

KOLOKVIJ

Igor Rončević,

sa Sveučilišta u Oxfordu, UK

održat će u petak 17. svibnja u predavaonici 222 (2. kat zgrade Kemije, Horvatovac 102a) s početkom u 9:30 sati kolokvij pod naslovom:

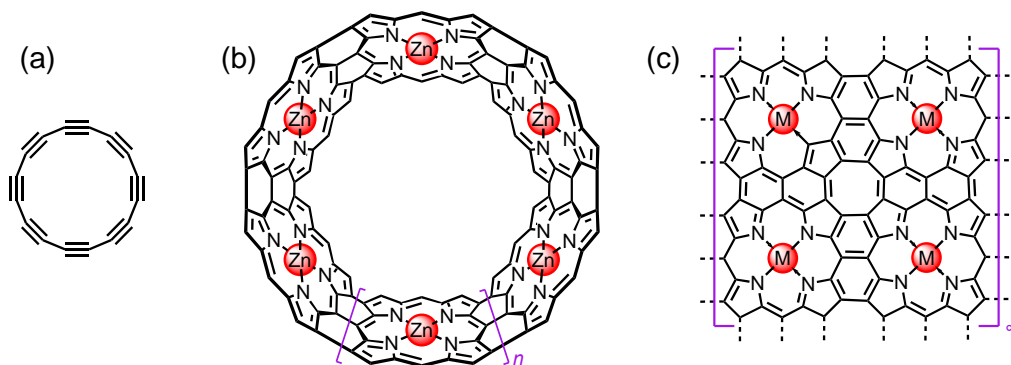
Priča o anti-aromatičnosti: od ciklouglijika do 2D materijala

Aromatičnost često povežemo s delokalizacijom elektrona, stabilnošću, energijom HOMO-LUMO prijelaza i mnogim drugim molekularnim svojstvima, što je čini jednim od centralnih pojmova u kemiji.¹ Moderna definicija (anti-)aromatičnosti temelji se na magnetnim svojstvima: u aromatičnim molekulama, delokalizirani elektroni pod utjecajem magnetnog polja reagiraju klasično (prema Lenzovom zakonu), dok anti-aromatični sustavi reagiraju neklasično (suprotno Lenzovom zakonu). U ovom predavanju, diskutirat ćemo vezu između (anti-)aromatičnosti i elektronske strukture u ciklouglicima (~10 atoma), porfirinskim prstenovima (~100 atoma) i porfenu (>1000 atoma).

Ciklo[n]ugljici (Slika 1a) su prstenovi sastavljeni n atoma ugljika, što ih čini najmanjim poznatim molekularnim alotropima ugljika. Koristeći ciklo[16]ugljik i ciklo[13]ugljik kao primjere, ilustrirat ćemo vezu između elektronske strukture, geometrije i (anti-)aromatičnosti u ovim neobičnim molekulama.²⁻⁴

Konjugirani porfirinski sustavi (Slika 1b) pokazuju izvanredna svojstva kao su kvantna interferencija i vodljivost neovisna o duljini, što ih čini izvrsnim kandidatima za molekularnu elektroniku.⁵ Ta kvantna svojstva povezana su s koherentnom delokalizacijom valne funkcije kroz cijelu molekulu, koja slabi kako molekula (i njen π sustav) postaju veći. Koristeći teorijske metode, procijenit ćemo na kojoj veličini dolazi do prelaska iz kvantno u klasično ponašanje.

Porfen (Slika 1c) je nedavno pripremljeni 2D materijal sastavljen od potpuno sraštenih porfirina.⁶ Pokazat ćemo kako se svojstva porfena mogu razumjeti kroz ravnotežu između njegovih aromatičnih i anti-aromatičnih fragmenata, i predvidjeti neke moguće primjene.⁷



Slika 1. (a) Ciklo[16]ugljik. (b) Potpuno srašteni porfirinski prsten. (c) Porfen.

1. G. Merino et al. *Chem. Sci.* **2023**, *14*, 5569; 2. Y. Gao et al. *Nature* **2023**, *623*, 977; 3. I. Rončević et al. *J. Am. Chem. Soc.* **2023**, *145*, 26962.; 4. F. Albrecht, I. Rončević et al. *Science* **2024**, u tisku, DOI: 10.26434/chemrxiv-2023-ddrh7-v2; 5. J.-R. Den et al. *J. Am. Chem. Soc.* **2024**, *146*, 3651; 6. T. Magnera et al. *Nat. Commun.* **2023**, *14*, 6308; 7. I. Pavlak et al. *J. Am. Chem. Soc.* **2024**, *146*, 3992.