

Pierścienie aromatyczne w porfirynach i ich naturalnych pochodnych są jednymi z najważniejszych układów chemicznych na świecie: warunkują one istnienie życia na naszej planecie transportując tlen w układzie krwionośnym (jako część hemoglobiny) czy umożliwiając roślinom na przechwytywanie energii słonecznej dzięki chloroplastom. Na przestrzeni ostatnich dziesięcioleci wyjątkowe zdolności makro- i policyklicznych cząsteczek aromatycznych do przetwarzania energii i transportowania elektronów zaczęto wykorzystywać w niemal wszystkich dziedzinach nauki i przemysłu, ze szczególnym uwzględnieniem medycyny (terapię nowotworowe, obrazowanie, farmakoterapia, itd.) i nowoczesnych materiałów (elektronika molekularna, ogniwa słoneczne, fotokonwertery, biosensory, materiały fotoluminescencyjne, itd.), czyniąc aromatyczność jedną z najważniejszych i najchętniej eksplorowanych koncepcji w chemii – wg danych z bazy *ISI Web of Science* w 2018 roku każdego dnia publikowano około 45 artykułów zawierających słowo „aromatic” (lub „antiaromatic”) w tytule, słowach kluczowych lub abstrakcie. Z drugiej jednak strony, brak ścisłej definicji na gruncie mechaniki kwantowej i wynikająca z tego faktu olbrzymia różnorodność związków aromatycznych (w literaturze można znaleźć ponad 60 typów aromatyczności!) oraz liczne kontrowersje dotyczące reguł klasyfikacji i półilościowej kwantyfikacji aromatyczności, przyczyniły się do postrzegania tej koncepcji przez dużą część społeczności chemicznej jako niejasnej, podejrzanej, czy wręcz niepotrzebnej. Czy jest tak w istocie?

W ramach niniejszego projektu proponujemy zasadniczą zmianę paradygmatu koncepcji (anty)aromatyczności i jej identyfikacji/ewaluacji, która pozwoli w pełni wykorzystać potencjał predykcyjny teorii rezonansu chemicznego bazując na następujących hipotezach badawczych:

1. Rezonans wiązań chemicznych, prowadzący do delokalizacji elektronów i stabilizacji energetycznej cząsteczki, ma w istocie naturę entropowo-informacyjną: interferencja wielu możliwych konfiguracji wiązań chemicznych w cząsteczce (tzw. form rezonansowych) sprawia, że tracimy *informację* o przynależności elektronów do poszczególnych pozycji wiązań w cząsteczce.
2. Jedną z najbardziej fundamentalnych cech aromatycznych związków chemicznych, kształtujących ich wyjątkowe właściwości termodynamiczne, magnetyczne i optyczne, jest ich zdolność do przeciwdziałania destrukcyjnym efektom wzbudzenia elektronowego na układ π -skoniugowanych wiązań chemicznych poprzez taką redystrybucję form rezonansowych, która maksymalizuje produkcję lub minimalizuje utratę entropii rezonansowej, pozwalając w ten sposób zachować maksymalną entropię informacyjną układu.

Zasadniczym celem tego interdyscyplinarnego projektu jest wykorzystanie zaawansowanych narzędzi teorii informacji (w tym tzw. teorii komunikacyjnej wiązania chemicznego) do „odkodowania” *informacji* zawartej w funkcji falowej stanu podstawowego wybranych (topologicznie zróżnicowanych) cząsteczek aromatycznych i determinującej ich wyjątkowe właściwości fizykochemiczne, a także głębsze zrozumienie tego w jaki sposób *informacja* ta ewoluuje w najniższych stanach wzbudzonych cząsteczki, pod wpływem zewnętrznego pola magnetycznego czy też w biegu reakcji chemicznych. Mamy nadzieję, że walidacja zaproponowanej zasady maksymalnej entropii rezonansowej dla materiałów skoniugowanych otworzy zupełnie nowe kierunki w dziedzinie badań nad reaktywnością chemiczną a opracowane narzędzia i wytworzone oprogramowanie będą dużym wsparciem w projektowaniu nowych materiałów do sztucznej fotosyntezy i fotoindukowanego transferu elektronów, fotowoltaiki molekularnej i wielu, wielu innych. Wymiernym rezultatem projektu będzie wytworzone oprogramowanie, specjalna strona poświęcona projektowi oraz publikacje naukowe w renomowanych czasopismach z listy filadelfijskiej.