

W dobie dzisiejszego szybkiego rozwoju cywilizacyjnego nakłady energetyczne niezbędne do funkcjonowania ludzkości stają się coraz większe. Fakt ten, oraz świadomość ocieplającego się klimatu skłaniają do poszukiwania rozwiązań technologicznych opartych na mniej konsumpcyjnych energetycznie technologiach i urządzeniach. Przykładowo, obecnie stosowane urządzenia oświetleniowe zużywają 19% całkowitego zapotrzebowania na energię. Poszukiwane są zatem rozwiązania, które będą potrzebować mniejszych nakładów energii, np. oparte na technologii organicznych diod elektro-luminescencyjnych (ang. OLEDs – organic light-emitting diodes), ogniw słonecznych (OPVs – ang. organic photovoltaics, DSSC- ang. dye-sensitized solar cell) czy organicznych tranzystorów polowych (OFETs – ang. organic field-effect transistors). Wszystkie wspomniane technologie wpisują się w szeroko rozumianą naukę o materiałach, do której należy również organiczna elektronika. Zajmuje się ona poszukiwaniem materiałów funkcjonalnych do urządzeń elektronicznych, które dzięki swoim właściwościom emitują bądź absorbują światło w wyniku kontrolowanego procesu przepływu ładunków w urządzeniu. Takimi materiałami aktywnymi mogą być zarówno związki organiczne jak i metaloorganiczne (zawierające w swojej strukturze atomy metali), jednak te drugie mają pewną przewagę na organicznymi. Otóż dzięki obecności w ich strukturach atomów metali (np. irydu, platyny, rutenu, złota) możliwe jest uzyskanie większych wydajności emitowanego światła. Kolejną zaletą stosowania metaloorganicznych materiałów jest łatwa modulacja barwy światła emitowanego, poprzez wprowadzanie nawet niewielkich modyfikacji struktury chemicznej. W ostatnich latach opracowane zostały wydajne emiterzy oparte na związkach platyny i irydu, jednak nadal pozostają duże możliwości rozwoju tej gałęzi organicznej elektroniki. Emitujące światło związki irydu i platyny są również coraz częściej badane jako środki do bio-obrazowania, ponieważ są one bardziej obiecującymi niż czysto organiczne, dotąd stosowane materiały. Mechanizmy procesów emisji światła w metaloorganicznych związkach (kompleksach) metali, w tym irydu i platyny są ciągle badane, bowiem zależności pomiędzy strukturą chemiczną a rodzajem i efektywnością emisji światła są skomplikowane. Zrozumienie procesów zachodzących podczas pochłaniania i emitowania światła w związkach chemicznych jest możliwe tylko poprzez powiązanie ze sobą metod eksperymentalnych i metod obliczeniowych (kwantowo-mechanicznych). Mając na celu poszukiwanie wydajniejszych (oraz projektowalnych) luminoforów opartych na związkach irydu i platyny, postanowiono zrealizować niniejszy projekt. Jego zasadniczym celem jest synteza odpowiednio zaprojektowanych związków (kompleksów) irydu i platyny oraz wyznaczenie ich właściwości fotofizycznych, elektrochemicznych i innych. W strukturze tych kompleksów obecne będą odpowiednio dobrane elementy (ligandy), dzięki którym możliwe będzie uzyskanie oczekiwanych właściwości - szczególnie luminescencyjnych. Co ważne wymienione elementy strukturalne można łatwo modyfikować (wymieniać je jak puzzle w układance) co stwarza szerokie możliwości wpływania na ich właściwości fizyczne i tym samym użytkowe. Badania eksperymentalne będą połączone z obliczeniami kwantowo-mechanicznymi metodą DFT (ang. Density Functional Theory). Zostaną wyznaczone widma absorpcyjne, luminescencyjne, czasy życia stanów wzbudzonych, emisyjne wydajności kwantowe, potencjały utlenienia i redukcji; badana będzie odwracalność procesów redoks. Wymienione właściwości fizykochemiczne (eksperymentalne) będą analizowane na gruncie elektronowym – za pomocą metody DFT, dzięki czemu przewiduje się znalezienie i zrozumienie zależności pomiędzy strukturą kompleksów a ich właściwościami. Uzyskana w ten sposób wiedza pozwoli na zaprojektowanie i zsyntezowanie kolejnych związków, efektywniejszych (od znanych) dla zastosowań w technologii elektronicznej czy też fizyce medycznej. W wyniku realizacji projektu otrzyma się potencjalne materiały funkcjonalne jako warstwy aktywne w organicznych diodach elektro-luminescencyjnych oraz środki luminescencyjne do bio-obrazowania. Dzięki współpracy z naukowcami zajmującymi się technologią elektroniczną oraz fizyką biomedyczną przydatność zsyntezowanych związków platyny i irydu do wspomnianych zastosowań zostanie przetestowana.