

Podstawowym celem badań przedstawionym w niniejszym grancie jest opracowanie metod otrzymywania nowej generacji układów hybrydowych zbudowanych z nieorganicznych półprzewodnikowych nanokryształów i organicznych ligandów półprzewodnikowych. Dzięki, między innymi, „zjawisku uwięzienia kwantowego” rozmiar, kształt, struktura i skład nanokryształu decyduje o podstawowych właściwościach fizycznych układu hybrydowego. Natomiast organiczny ligand związany z powierzchnią nanokryształu, oprócz stabilizacji dyspersji, musi zapewnić odpowiedni kontakt nieorganicznego rdzenia z szeroko pojmowanym otoczeniem. Dla układów koloidalnych w rozpuszczalnikach organicznych, wykorzystywanych do otrzymywania cienkich warstw w urządzeniach służących do konwersji energii, takich jak ogniwa słoneczne, należy odpowiednio dobrać nieorganiczny rdzeń i właściwy ligand półprzewodnikowy. Natomiast inny typ ligandu zastosujemy do otrzymania układów koloidalnych w rozpuszczalnikach polarnych, których przeznaczeniem są zastosowania typowo biologiczne i analityczne.

Pierwsza generacja układów hybrydowych opierała się na wykorzystaniu nanokryształów dwuskładnikowych półprzewodników takich jak CdSe i PbS. Podstawową wadą tych półprzewodników jest obecność toksycznych pierwiastków. Alternatywą dla tych półprzewodników stanowią trójskładnikowe i czteroskładnikowe półprzewodniki nie zawierające kadmu i ołowiu. Dodatkowym argumentem przemawiającym za tymi półprzewodnikami jest możliwość nicowania struktury oraz składu, co otwiera nowe możliwości w syntezie nanokryształów. Oprócz etapu syntezy nanokryształów, w procesie otrzymywania układów hybrydowych ważnym etapem jest etap wymiany ligandów. Otrzymywane nanokryształy zawierają długocząsteczkowe ligandy pierwotne, które bardzo dobrze stabilizują dyspersje nanokryształów, ale jednocześnie nie izolują nieorganicznego rdzenia, co utrudnia wymianę ładunku w otrzymywanych cienkich warstwach. Zastosowanie metod wymiany ligandów pierwotnych, stosowanych dla dwuskładnikowych nanokryształów, bez przeprowadzenia odpowiednich modyfikacji nie zapewni odpowiednich parametrów urządzeń opartych na trójskładnikowych i czteroskładnikowych nanokryształach półprzewodnikowych.

Odpowiednie sfunkcjonalizowanie ligandu organicznego przez wprowadzenie grup solubilizujących i grupy funkcyjnej zdolnej do tworzenia trwałego wiązania z powierzchnią nanokryształu zapewni stabilizację dyspersji w organicznych rozpuszczalnikach. Natomiast odpowiedni dobór fragmentów donorowych i akceptorowych cząsteczki zapewni właściwe cięciwo elektronowe sprzyjające wymianie ładunku. Tego typu odpowiednio zaprojektowane ligandy jako nośniki dziur i elektronów zostaną wykorzystane przede wszystkim do otrzymywania układów hybrydowych, w których nieorganicznym rdzeniem będą nanokryształy stopowych półprzewodników takich jak Cu-In-Zn-S i Ag-In-Zn-S, charakteryzujących się wysokimi wydajnościami kwantowymi luminescencji i wykorzystywanymi jako emitery w diodach luminescencyjnych. W badaniach wykorzystamy opracowane przez nas metody syntezy nanokryształów stopowych. Druga grupa hybryd zostanie oparta na nanokryształach półprzewodników Cu-Fe-S i Cu-Zn-Sn-S, szczególnie interesująca ze względu na efekt termoelektryczny, pozwalający na konwersję energii cieplnej w prąd elektryczny. Interesującą cechą tego typu hybryd jest też elektrochromizm, pozwalający na zmianę koloru materiału po przyłożeniu odpowiedniego potencjału.

Otrzymane układy hybrydowe zostaną dokładnie scharakteryzowane przede wszystkim wykorzystując dostępne metody rentgenostrukturalne i mikroskopowe, zostanie dokładnie scharakteryzowany nieorganiczny rdzeń oraz dzięki zastosowaniu spektroskopii fotoelektronowej, również jego powierzchnia.

Właściwości luminescencyjne i elektronowe zostaną określone przy użyciu metod spektroskopowych i elektrochemicznych. Uzyskane dane pozwolą określić podstawowe parametry układów hybrydowych, potencjał jonizacji, powinowactwo elektronowe, przerwy energetyczne oraz współczynnik absorpcji i wydajność kwantową luminescencji. Materiały charakteryzujące się najlepszymi parametrami (wysoka wydajność kwantowa luminescencji oraz odpowiedni trwałość) zostaną wykorzystane do otrzymania diod emitujących światło. W przypadku materiałów opartych na nanokryształach Cu-Fe-S i Cu-Zn-Sn-S otrzymane kompozyty zostaną wykorzystane do otrzymania kształtek i folii, dla których zostaną wyznaczone parametry określające efekt termoelektryczny.

Podsumowując autorzy projektu proponują otrzymanie nowej generacji elektroaktywnych układów hybrydowych, których właściwościami materiałowymi, dzięki odpowiedniemu zestawieniu nieorganicznego nanokryształu z organicznym ligandem, są obecnie nieosiągalne dla wielu innych obecnie stosowanych i testowanych materiałów.