

Doskonalenie urządzeń, które mogłyby poprawić jakość życia wymaga rozwiązywania szczegółowych problemów naukowych. Proponowany projekt jest tego przykładem, gdy jego dalekosiężna motywacja leży w sferze zastosowań, jednak bezpośrednim celem jest zrozumienie podstawowych praw rządzących pewnym zjawiskiem.

Aspektem stosowanym, który motywuje nasze prace są liczne zastosowania ditlenku tytanu TiO_2 , takie jak fotokataliza czy rozwój ogniw słonecznych opartych o barwniki organiczne (ang. dye-sensitized solar cells, DSSC). Na przykład ogniwa DSSC, zostały zaproponowane po raz pierwszy przez O'Regana i Graetzel w 1991 roku i od tego czasu są intensywnie badane, gdyż mają one pewne przewagi nad stosowanymi obecnie ogniwami półprzewodnikowymi (choć też nie są wolne od wad). Istotą ich działania jest fakt, że światło jest absorbowane w molekułach, które są zaadsorbowane na powierzchni odpowiedniej elektrody. Połączenie to powinno zapewnić efektywne odprowadzenie ładunku. I stanowi ono jedno z punktów, które ograniczają efektywność ogniw.

W toku lat badań, wyselekcjonowano materiały na elektrody, na których molekuly barwnikowe są adsorbowane. Najczęściej stosowanym materiałem jest tlenek tytanu, zwykle w formie nanocząstek będących mieszaniną tlenku tytanu w formie rutyli i anatazu. Molekuly barwników są zwykle aromatycznymi związkami o dość szerokim paśmie absorpcji światła. Połączenie pomiędzy molekułami a elektrodą powinno zapewnić dobry przekaz ładunku, jak również zapewnić odpowiednią stabilność ogniwa. Zatem działanie ogniwa istotnie zależy jak molekuly są ułożone i umocowane na powierzchni.

Aby przewidzieć oraz ulepszyć jakość takich warstw molekularnych musimy zrozumieć zasady, które rządzą adsorpcją i organizacją molekuł. W przypadku rutyli można znaleźć w literaturze sporo danych opisujących jak istotne molekuly wiążą się i organizują na powierzchni. Jednak dla anatazu takich danych niemal brak. Spowodowane to jest trudnym przygotowaniem powierzchni monokryształu anatazu do badań. Dzięki temu, że w grupa, proponująca projekt opanowała te niełatwą sztukę, możemy zaproponować eksplorację niezbadanych dotąd układów molekuł na powierzchni anatazu.

Wybraliśmy trzy barwniki oparte na porfirynach, różniące się liczbą grup karboksylowych (a więc najpowszechniej używanych grup kotwiczących dla powierzchni ditlenku tytanu) oraz trzy barwniki oparte na ftalocyjaninach z atomami różnych metali w strukturze. To pozwoli nam zbadać dwa główne czynniki wpływające na tworzenie warstwy molekularnej: wpływ grup wiążących oraz rolę metalu w procesie adsorpcji. W związku z tym, że interesują nas bardzo małe ilości molekuł – mniej niż dwie warstwy atomowe, badać je musimy przy pomocy mikroskopii bliskich oddziaływań SPM, wspomaganą przez spektroskopię fotoelektronów XPS, która dostarczy nam informacji o oddziaływaniach pomiędzy molekułami a powierzchnią podkładu.