

W ostatnim czasie, jednym z głównych nurtów badań naukowych jest projektowanie i wytwarzanie zaawansowanych nanomateriałów. Niewątpliwie powodem zainteresowania nanotechnologią oraz jej produktami są ich wyjątkowe właściwości, wynikające ze zmniejszonego rozmiaru kryształów lub cząstek do mniej, niż 100 nm. Jedną z najczęściej badanych grup materiałów są nanocząstki (NPs) zawierające w swej strukturze jony lantanowców ( $\text{Ln}^{3+}$ ). Ich unikatowe właściwości, takie jak zdolność luminescencji mają szczególne znaczenie aplikacyjne w biologii i medycynie, m.in. mogą służyć do bioobrazowania, terapii fotodynamicznej czy transportu leków. Zjawiskiem o szczególnym znaczeniu jest zdolność analizowanych nanocząstek do tzw. up-konwersji. W przeciwieństwie do klasycznej luminescencji (konwersji w dół), podczas up-konwersji promieniowanie z zakresu bliskiej podczerwieni (NIR) lub podczerwieni (IR) jest konwertowane do promieniowania widzialnego lub ultrafioletowego (UV). Kolejną ważną cechą materiałów zawierających jony  $\text{Ln}^{3+}$  jest wpływ temperatury na ich właściwości spektroskopowe. Wiedza na temat mechanizmu wpływu temperatury na właściwości luminescencyjne nanomateriałów jest ważnym czynnikiem odpowiedzialnych za ich charakter aplikacyjny.

W związku z powyższym, celem niniejszego projektu jest synteza oraz modyfikacja powierzchniowa nanokryształów zawierających jony lantanowców, a następnie przyłączenie do ich powierzchni funkcjonalnych związków organicznych. Wybrane materiały zostaną zanalizowane pod względem zastosowania ich jako potencjalne sensory. Zbadany zostanie również wpływ temperatury na właściwości luminescencyjne otrzymanych nanocząstek (NPs). Następnie opracowana zostanie metoda kapsułkowania oraz kontrolowanego uwalniania wybranych NPs z ludzkich erytrocytów (potencjalnych nośników). W celu oszacowania wpływu nanomateriałów na zdrowie ludzi przeprowadzone zostaną badania dotyczące właściwości cytotoksycznych wybranych związków. Istotną częścią projektu będzie zbadanie mechanizmów oddziaływania NPs na komórki (genotoksyczność). Zostaną przeprowadzone obliczenia ab initio i pół-empiryczne celem ustalenia jak odległość powierzchni i powierzchniowych molekuł wpływa na geometrię otoczenia koordynacyjnego jonów aktywatora, jaki jest rozkład jonów domieszki wewnątrz i na powierzchni NPs. Obliczenia teoretyczne pozwolą również określić wpływ powyższych czynników na kolor emisji, czas życia i wydajność kwantową. Będzie także możliwe określenie oddziaływań pomiędzy grupami (molekułami) powierzchniowymi i jonami aktywatora luminescencji.

Planowane badania mają charakter interdyscyplinarny i dotyczą wciąż aktualnych i niezwykle istotnych zagadnień z pogranicza chemii, materiałów i biologii. W wyniku realizacji projektu wytworzone zostaną zaawansowane nanomateriały, o dobrze określonych właściwościach chemicznych, foto-fizycznych i biologicznych. Dzięki modyfikacji powierzchniowej za pomocą związków organicznych, zostaną otrzymane nanocząstki dwu- lub wielofunkcyjne, o przestrajalnej i wielobarwnej luminescencji. Natomiast, badania nad wpływem temperatury na up-konwersyjną luminescencję przyczynią się do dokładnego poznania mechanizmów wzbudzenia i obserwowanej emisji. Przeprowadzone obliczenia teoretyczne pozwolą wyselekcjonować optymalne nanomateriały do dalszych badań i zastosowań biologicznych. Znaczącym efektem projektu będzie opracowanie odpowiedniej metody enkapsulacji nanocząstek w erytrocytach oraz ich kontrolowanego uwalniania. Nanomateriały obecne są w szerokim zakresie produktów, można je spotkać praktycznie na każdym etapie życia codziennego. Z tego powodu niezbędne jest uzyskanie informacji na temat ich toksyczności. Otrzymane rezultaty mogą doprowadzić do bardziej odpowiedzialnego stosowania nanomateriałów. Realizacja projektu przyczyni się do uważniejszej ochrony środowiska otaczającego ludzi, a także zdrowia osób bezpośrednio narażonych na działanie nanocząstek, np. zaangażowanych w ich wytwarzanie. Funkcjonalizacja nieorganicznych NPs o właściwościach luminescencyjnych, zawierających jony  $\text{Ln}^{3+}$  jako aktywatory luminescencji zwiększy ich wpływ na fundamentalne badania biomedyczne, a w konsekwencji spowodować znaczący postęp w wykorzystaniu nanotechnologii w medycynie, a także w praktyce klinicznej.