

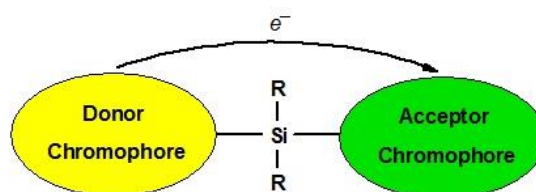
Barwna emisja typu charge-transfer w nowych związkach krzemooorganicznych

Celem projektu jest zbadanie właściwości spektroskopowych i fotofizycznych wybranych związków krzemooorganicznych zawierających w strukturze chromofor karbazolowy.

Związki krzemooorganiczne są interesujące pod kątem zastosowania ich w materiałach świecących (ang. *light-emitting materials*) dzięki ich atrakcyjnym właściwościom foto- i elektroluminescencyjnym. Wprowadzenie atomu krzemu poprawia niektóre właściwości materiału, tj. zdolność do tworzenia filmu, łatwiejsze przetwórstwo, rozpuszczalność i elastyczność. Ponadto obecność atomu krzemu pomiędzy sprzężonymi chromoforami działa jak separator, czyli przerywa skoniugowane wiązania π , co wiąże się z możliwością regulacji barwy emisji. Kolejnym istotnym aspektem wprowadzenia atomu krzemu jest zwiększenie efektywności wydajności kwantowej i przesunięcie pasm absorpcji i emisji w kierunku fal dłuższych. Często używanym związkiem do produkcji materiałów świecących jest karbazol, który charakteryzuje się dużym przewodnictwem dziur elektronowych, silną absorpcją w zakresie ultrafioletu i wysoką efektywnością fluorescencji.

Projekt jest podzielony na dwie części: pierwsza z nich skupia się nad odpowiedzią na pytanie jaki jest wpływ atomu krzemu na właściwości emisyjne wybranych związków krzemooorganicznych. Problem badawczy będzie rozpatrywany na przykładzie wybranego związku krzemooorganicznego i jego analogu węglowego. Taka analiza porównawcza pokaże jaka jest rola atomu krzemu i jego wpływ na właściwości emisyjne i fotofizyczne. Druga część projektu skupia się na zaprojektowaniu nowych związków wykazujących emisję typu *charge-transfer* (CT). Poprzez odpowiednie połączenie dwóch chromoforów (emitujących w zakresie ultrafioletu) przez mostek krzemowy można

zaobserwować ostatecznie kolorową emisję wynikającą z przeniesienia elektronu z części donora na akceptor. (Rys. 1). Koncepcją proponowanego modelu projektowania związków **Donor-SiR₂-Akceptor** jest użycie mierzalnych kryteriów (np. potencjałów utlenienia i redukcji, odległości pomiędzy donorem i akceptorem, sprzężenia pomiędzy oddziaływującymi stanami), aby móc przewidzieć czy przeniesienie elektronu jest lub nie jest możliwe już na etapie planowania syntezy. Ten pomysł ma być alternatywą dla tak zwanej syntezy metodą prób i błędów, która jest czasochłonna, kosztowna, a na końcu właściwości emisyjne otrzymanego produktu mogą nie być atrakcyjne. Oczekowaną emisję typu CT powinna charakteryzować duża intensywność pasma w zakresie światła widzialnego, dzięki czemu takie związki mogą być użyte do produkcji materiałów świecących, np. diod luminescencyjnych LED (ang. *light-emitting diodes*).



Rys. 1 Schematyczne przedstawienie związku modelowego, w którym przejście elektronu jest możliwe.