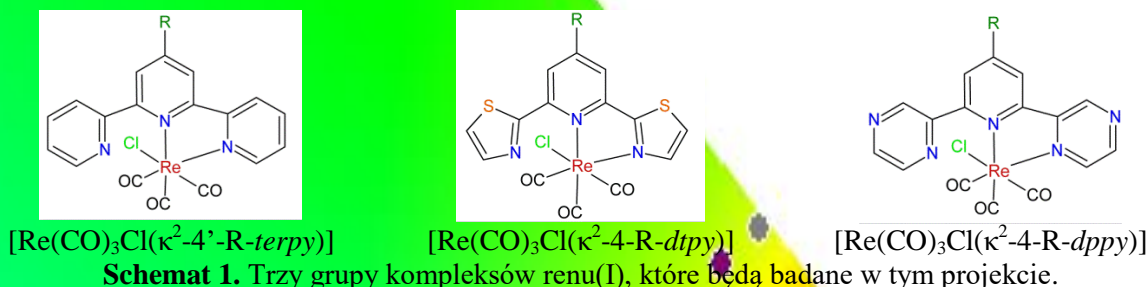
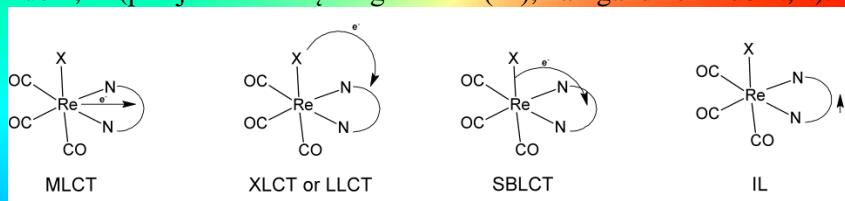


Celem naszych badań jest modelowanie właściwości foto- i elektroluminescencyjnych kompleksów renu(I) o wzorze ogólnym $[\text{Re}(\text{CO})_3\text{Cl}(\kappa^2\text{-N-N})]$, poprzez strukturalne modyfikacje liganda triiminowego, skoordynowanego bidentnie ($\kappa^2\text{-N-N}$) do centrum Re(I) prowadzące do opracowania nowych, efektywnych materiałów emisyjnych o potencjalnym zastosowaniu w technologii organicznych diod elektroluminescencyjnych (OLED). Zmiany właściwości foto- i elektroluminescencyjnych karbonylowych kompleksów Re(I) będą zrealizowane przez użycie odpowiednich podstawników R oraz trzech różnych szkieletów triiminowych: 2,2':6',2''-terpirydyny (4'-R-*terpy*), 2,6-di(tiazol-2-il)pirydyny (4-R-*dtpy*) i 2,6-di(pirazyn-2-yl)pirydyny (4-R-*dppy*), koordynujących do centralnego atomu za pomocą dwóch atomów azotu (schemat 1). Wpływ pierścienia bocznego (pirydyny, tiazolu lub pirazyny) liganda triiminowego zostanie zbadany poprzez analizę porównawczą właściwości strukturalnych i spektroskopowych kompleksów $[\text{ReCl}(\text{CO})_3(\kappa^2\text{-R-terpy})]$, $[\text{ReCl}(\text{CO})_3(\kappa^2\text{-R-dtpy})]$ i $[\text{ReCl}(\text{CO})_3(\kappa^2\text{-R-dppy})]$, zawierających te same podstawniki R. Pozwoli to nam na ustalenie rzetelnej zależności struktura-właściwości dla kompleksów $[\text{Re}(\text{CO})_3\text{Cl}(\kappa^2\text{-N-N})]$, a także zrozumienia procesów transferu elektronów i energii spowodowanych absorpcją światła, co jest wysoce pożądane w celu syntezy materiałów o predefiniowanych właściwościach fotofizycznych.



Hipoteza projektu opiera się na fakcie, że w przypadku tych kompleksów możliwe są różne przejścia elektronowe oraz generowanie odmiennych stanów wzbudzonych, w zależności od względnego poziomu energii pomiędzy orbitalami metalu i liganda:

- σ_L, π^* (przejście z przeniesieniem ładunku z wiązania sigma na ligand (SBLCT)),
- $\pi_{\text{halide}}, \pi^*$ (przejście z przeniesieniem ładunku z halogenu na ligand (XLCT)),
- stany $\pi_L, \pi_{N,N}^*$ (przeniesienie ładunku z ligandu na ligand (LLCT)),
- stany d, π^* (przeniesienie ładunku z metalu na ligand (MLCT)),
- stany π, π^* lub n, π^* (przejścia wewnątrzligandowe (IL), na ligandzie L lub N,N).



W celu modulacji energii poziomów HOMO i LUMO, a tym samym przerwy HOMO-LUMO i barwy światła emitowanego przez kompleksy Re(I), planuje się wprowadzić 3 typy podstawników R do szkieletów triiminowych. Pierwsza klasa podstawników zawiera silnie elektronodonorowe grupy połączone przez pierścień fenyłowy. Oczekuje się, że te grupy będą sprzyjały przeniesieniu energii z podstawnika na centralny pierścień pirydynowy liganda. Druga klasa zawiera podstawniki oparte na skondensowanych pierścieniach aromatycznych, takich jak naftalen, antracen i piren. Oczekuje się, że wydłużą one czas życia stanu wzbudzonego kompleksu w temperaturze pokojowej ze względu na efekt bichromoforowy, w którym trypletowy stan MLCT jest w równowadze ze stanem trypletowym na naftalenie/antracenie/pirenie. W przypadku trzeciej klasy grupy alkoksyłowe są przyłączone do fenyłu, dwóch lub trzech skondensowanych pierścieni aromatycznych podstawnika w celu poprawy rozpuszczalności i procesów przeniesienia ładunku.

Otrzymane związki Re(I) zostaną zastosowane do wytworzenia urządzeń OLED. Ze względu na nadzwyczajne właściwości fotoluminescencyjne, znakomitą wydajność elektroluminescencyjną, stabilność fotochemiczną i termiczną oraz łatwą syntezę, kompleksy Re(I) dobrze nadają się do zastosowań optoelektronicznych, są dobrymi kandydatami na urządzenia OLED, jako warstwy emisyjne i domieszki. Z drugiej strony, grubość i morfologia warstw aktywnych, która wpływa na współczynnik załamania warstw organicznych, będzie regulowana metodologią wytwarzania urządzenia OLED. Otrzymane związki mogą być również interesujące dla chemii medycznej, katalizy, fotosensytyzacji substratów organicznych, sensorów luminescencyjnych i konwersji energii słonecznej.