

POPULARNONAUKOWE STRESZCZENIE PROJEKTU

Barwniki fluorescencyjne znajdują obecnie liczne zastosowania technologiczne m.in. w mikroskopii fluorescencyjnej, jako biomarkery, sondy fluorescencyjne, barwniki laserowe czy też organiczne diody elektroluminescencyjne. Niestety większość dostępnych barwników absorbuje/emituje w zakresie 300-600 nm co znacznie ogranicza ich aplikacje biomedyczne. Wobec tego niezwykle pożądane są barwniki wykazujące właściwości fotofizyczne w obszarze bliskiej podczerwieni (NIR) i charakteryzujące się dużymi przesunięciami Stokes'a. W tym kontekście zjawisko wewnątrzcząsteczkowego transferu protonu w stanie wzbudzonym (ESIPT) może zostać wykorzystane do projektowania barwników fluorescencyjnych o właściwościach fotofizycznych przesuniętych w region NIR.

W przeciwieństwie do większości fluoroforów, barwniki wykazujące ESIPT charakteryzują się wyjątkowo dużymi przesunięciami Stokesa (powyżej 5000 cm^{-1}). Dzięki temu możliwy jest pomiar wydajności fluorescencji barwników wykazujących ESIPT w wyższych stężeniach, co z kolei umożliwia liczne aplikacje biomedyczne jak i optoelektroniczne. Kolejną niezwykle pożądaną właściwością którą można osiągnąć poprzez modyfikacje barwników wykazujących ESIPT, jest zdolność pojedynczej cząsteczki do emitowania w 2 różnych zakresach spektralnych, tzw. podwójna fluorescencja.

Niemniej pomimo licznych badań poprawna charakteryzacja mechanizmu ESIPT wciąż stanowi wyzwanie zarówno dla syntetyków jak i teoretyków, czego główną przyczyną jest złożony charakter reakcji przeniesienia protonu w stanie wzbudzonym. Z kolei aby osiągnąć podwójną fluorescencję, należy zachować szczególną równowagę pomiędzy energiami swobodnymi dwóch form tautomerycznych, co jest możliwe jedynie przy użyciu zaawansowanych metod teoretycznych, pozwalających dokładnie opisać obie formy równocześnie.

Ważkość przedstawionej problematyki badawczej zachęciła wnioskodawcę do przedstawienia propozycji kompleksowych badań fotofizycznych prowadzonych metodami chemii kwantowej, dotyczących mechanizmu ESIPT dla ważnej serii związków, tzw. barwników HPIP.

Głównym celem tego projektu jest przeprowadzenie szeregu obliczeń kwantowo-mechanicznych (bazujących na formalizmie teorii funkcjonałów gęstości, DFT) które pozwolą przewidywać strukturalne, energetyczne i spektralne właściwości barwników wykazujących ESIPT. Takie podejście umożliwi zaprojektowanie nowych związków wykazujących podwójną fluorescencję, opartych na strukturach już znanych barwników HPIP.