

Zjawisko przeniesienia ładunku CT (ang. *charge transfer*) jest oparte na przemieszczeniu się ładunku na znaczne odległości zachodzącym pod wpływem światła. Ogromne znaczenie tego procesu w badaniach naukowych wynika z roli jaką odgrywa on w reakcjach redoks zachodzących w organizmach żywych m.in. w oddychaniu komórkowym czy fotosyntezie. Przykładem wykorzystania CT jest konwersja energii słonecznej w energię elektryczną, zachodząca w ogniwach fotowoltaicznych. W procesie przekształcenia jednego rodzaju energii na inny ogromne znaczenie ma zmniejszenie strat energetycznych. Ponieważ zjawisko przeniesienia ładunku ma zasadnicze znaczenie dla naszego życia tak istotne jest zrozumienie szczegółów jego mechanizmów.

Dipole charakteryzują się momentem dipolowym wynikającym z nierównomiernego rozkładu ładunku dodatniego i ujemnego w cząsteczce. Pojedyncze doniesienia dotyczące wpływu budowy dipolowej na przenoszenie elektronów (ET) zaczęły się pojawiać około 50 lat temu. W latach 90 XX wieku opisano wpływ orientacji dipoli łańcuchów polipeptydowych na ET co było początkiem dalszych badań tej zależności. Nasza koncepcja tzw. *electrets* tzn. układów molekularnych z uporządkowanymi elektrycznymi momentami dipolowymi, umożliwi skokowy rozwój tej dziedziny wiedzy. Zastosowanie *electrets* pozwoli na spowolnienie procesu rekombinacji ładunków względem procesu rozdzielania ładunków, co umożliwi uzyskanie cząsteczek o bardzo długim czasie życia stanu o rozdzielonych ładunkach.

Pola elektryczne w pobliżu dipoli molekularnych są ogromne i dlatego powinny silnie wpływać na ET. Eksperymentalnie zmierzona zależność ET od orientacji dipoli często jednak nie pozwala na wyciągnięcie ogólnych wniosków, a efekty te dalej pozostają niezupełnie dobrze zrozumiane. W ramach tego projektu prowadzone będą innowacyjne badania nad wpływem dipoli molekularnych na CT o dalekim zasięgu zachodzące według różnych mechanizmów. Te podstawowe badania naukowe są motywowane potrzebą zrozumienia, co wiąże strukturę molekularną i dynamikę CT.

W tym projekcie będą zrealizowane trzy zadania badawcze. W pierwszej kolejności będzie to synteza organiczna układów modelowych opartych o rdzeń pirolopirolu jako donora, połączony mostkiem zbudowanym z kilku jednostek antranilamidowych z diketopirolopirolem pełniącym funkcję akceptora elektronów. W kolejnym etapie zostanie opracowana metodologia otrzymywania zaprojektowanych układów na podłożu stałym. Dla uzyskanych struktur w ostatnim etapie zostaną wykonane badania fotofizyczne i elektrochemiczne, które pozwolą ustalić wpływ ich budowy na przeniesienie ładunku.

Otrzymane wyniki pozwolą ustalić szybkość przeniesienia ładunku CT w różnych warunkach oraz zależność pomiędzy strukturą oligomerów antranilamidowych, a dwoma konkurencyjnymi mechanizmami CT o dalekim zasięgu. Jest oczywiste, że dalszy postęp w tej dziedzinie można osiągnąć jedynie poprzez badania większych układów, zawierających rdzeń, który pozwala na pełną kontrolę właściwości optoelektronicznych. Metody syntetyczne, które umożliwiają dostęp do takich systemów multichromoforycznych, nie istnieją, a jednym z głównych celów tego projektu jest ich opracowanie.

Długoterminowy wpływ na środowisko naukowe obejmuje pogłębione zrozumienie zależności między strukturą biomolekuł zawierających wiązania amidowe (oraz ich mimetyków,) a mechanizmem przenoszenia elektronów. Odpowiedź na pytanie, w jakich warunkach dominuje określony mechanizm, wpłynie na rozwój materiałów do fotolizy wody w celu uzyskania czystych paliw niezbędnych do rozwoju ludzkiej cywilizacji na naszej planecie.