

Dr Joanna Jankowska

Silnie ukierunkowane fotoprzełączanie w układach molekularnych: pochodzenie, kontrola i zastosowania zjawiska

Popularnonaukowe streszczenie projektu

Możliwość wykorzystania cząsteczek chemicznych jako funkcjonalnych nano-urządzeń stała się w ostatnich latach inspiracją dla przeprowadzenia wielu przełomowych badań naukowych o interdyscyplinarnym charakterze. Dysponujemy obecnie układami chemicznymi o bogatej gamie różnych funkcjonalności, jak np. przełącznikami, rotorami, kondensatorami, motorami, czy układami o właściwościach bramek logicznych. Znajdują one zastosowanie w wielu rozwijanych nowoczesnych technologiach, takich jak elektronika molekularna, pamięci molekularne, światłoczułe materiały, super-rozdzielcze techniki obrazowania czy nawet zdalnie kontrolowane układy do transportu i uwalniania leków wewnątrz żywych organizmów. Znaczące osiągnięcia w dziedzinie nano-urządzeń zostały w roku 2016 wyróżnione Nagrodą Nobla w dziedzinie chemii. Wśród funkcjonalnych cząsteczek chemicznych szczególną rolę pełnią fotoprzełączniki molekularne, które mogą zostać wykorzystane do zdalnego kontrolowania za pomocą światła działania innych układów, umożliwiając w ten sposób tworzenie urządzeń o bardziej złożonej funkcjonalności.

U podstaw niniejszego projektu leży zjawisko silnie ukierunkowanego fotoprzełączania molekularnego. Zachodzi ono, gdy przełącznik molekularny wykazuje znacząco inną wydajność przełączania w zależności od kierunku indukowanej przemiany. Własność tę można świadomie wykorzystać do usprawnienia istniejących lub zainicjowania nowych technologii molekularnych. W naszych badaniach skupiamy się na grupie przełączników molekularnych należących do rodziny diarylethenów (DAE). Na przestrzeni wielu lat badań wielokrotnie zaobserwowano silnie ukierunkowane fotoprzełączanie tych układów. Niedawno zauważono również, że zastosowanie w fotoprzełączaniu impulsów światła o różnych długościach fali – jednocześnie lub z pewnym kontrolowanym opóźnieniem – może mieć znaczący wpływ na efektywność transformacji; nieznanym jednak pozostaje mechanizm tego efektu.

Celem naszych badań jest wyjaśnienie pochodzenia efektu silnie ukierunkowanego przełączania cząsteczek DAE oraz stwierdzenie czy i w jaki sposób jesteśmy w stanie racjonalnie kontrolować efektywność takiego fotoprzełączania z użyciem sekwencji impulsów światła. Z jednej strony pozwoliłoby to na zrozumienie najnowszych wyników badań eksperymentalnych, z drugiej – dałoby nam nowe narzędzie, które mogłoby znaleźć zastosowanie w technologiach molekularnych takich, jak fotostabilizatory (cząsteczki i materiały, które chronią swoje otoczenie przed szkodliwymi efektami promieniowania elektromagnetycznego), pamięci molekularne wielokrotnego odczytu (z możliwością realizacji zapisu i odczytu przy użyciu jedynie dwóch kolorów promieniowania) czy nowe techniki obrazowania super-rozdzielczego (z wykorzystaniem nieliniowych efektów oddziaływania silnie ukierunkowanych przełączników na sąsiadujące z nimi cząsteczki fluorescencyjne).

Zaplanowane badania mają charakter teoretyczny i opierają się na obliczeniach kwantowo-chemicznych, mających na celu scharakteryzowanie mechanizmu jedno- i wielofotonowego fotoprzełączania modelowych cząsteczek należących do rodziny DAE. Zastosowane zostaną zarówno statyczne techniki obliczeniowe (obliczenia profili energetycznych przewidywanych fotoreakcji), jak i symulacje dynamiczne (pozwalające na modelowanie zachodzących procesów w czasie rzeczywistym). W trakcie prac stworzony zostanie ponadto nowy moduł oprogramowania, pozwalający na prowadzenie badań dynamiki procesów wielofotonowych metodą symulacji nieadiabaticznej dynamiki molekularnej.

Spodziewane efekty naszych badań dotyczą kilku różnych obszarów chemii fizycznej. Przede wszystkim chcemy, aby nasz projekt przyniósł nowe spojrzenie na proces fotoprzełączania – w szczególności, na nowe możliwości rozwoju istniejących oraz otwarcie nowych kierunków badań w dziedzinie technologii molekularnych. Prócz tego mamy nadzieję, że pomoże on sformułować wyjaśnienie złożonych obserwacji eksperymentalnych odnośnie fotoprzełączania cząsteczek DAE. Pomyślna realizacja projektu pozwoli na poszerzenie zasobu wiedzy w zakresie bardzo słabo dotąd poznanej wielofotonowej fotochemii przełączników molekularnych oraz na zaproponowanie wielofotonowych protokołów kontroli efektywności fotoprzełączania. Wreszcie, planujemy także wytworzenie oraz udostępnienie szerokiemu gronu badaczy nowego narzędzia do prowadzenia unikalnych, wielofotonowych symulacji fotodynamiki cząsteczek chemicznych, które w przyszłości mogą stać się pomocą zarówno w interpretacji wyników eksperymentalnych, jak i wsparciem w projektowaniu zaawansowanych układów fotoprzełącznikowych.