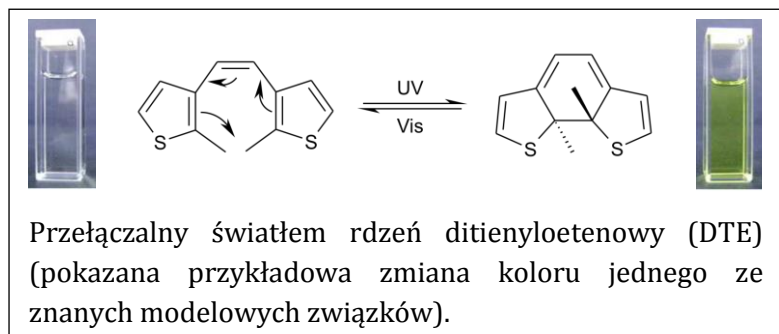




THIO-SWITCH: w poszukiwaniu nowych fotoaktywnych materiałów przełączalnych – badania kompleksów metali przejściowych, zawierających aktywny fragment ditienuloenenowy, za pomocą zaawansowanych metod fotokrystalograficznych i spektroskopowych

Oddziaływanie światła z materią jest jednym z najważniejszych procesów zachodzących w przyrodzie. Poznanie jego natury i towarzyszących zjawisk jest kluczowe dla świadomego projektowania nowych funkcjonalnych materiałów o pożądanych właściwościach. Z punktu widzenia konkretnych zastosowań w optoelektronice, ogniwach słonecznych czy medycynie, szczególne miejsce zajmują układy przełączalne impulsami świetlnymi. Możliwość sterowania układami chemicznymi za pomocą zewnętrznego bodźca ma niebagatelne znaczenie. Nietrudno sobie bowiem wyobrazić nowoczesne materiały, które można będzie w przyszłości wykorzystać jako powłoki (np. karoserii samochodów, soczewek kontaktowych itp.), których właściwościami (np. kolorem) można dowolnie sterować poprzez odpowiednio dobrane czynniki zewnętrzne, co jest przyszłością technologii. Wizja ta stanowi punkt wyjścia dla naszego projektu. Zamierzamy się skoncentrować na układach posiadających w cząsteczce ugrupowanie ditienuloetenowe (DTE), które można przełączać w obie strony impulsami o różnej długości fali. Przełączaniu temu często towarzyszy zmiana barwy substancji, jak i innych jej właściwości (np. zmiana właściwości luminescencyjnych).



Celem naszego projektu jest lepsze zrozumienie procesu przełączania w kompleksach metali przejściowych zawierających właśnie przełączalną grupę funkcyjną DTE. Umotywowane jest to tym, że obecność centrum metalicznego wprowadza kolejny wymiar zmienności i przez to nowe ciekawe własności optyczne. Zamierzamy zsyntezować kilka nowych

ligandów typu DTE, które potem będziemy przeprowadzać w różnego typu kompleksy metali przejściowych. Użyjemy do tego prekursorów zawierających metale takie, jak miedź(I), platyna(II) czy osm(II). Obiektem naszego zainteresowania będzie faza krystaliczna, jako ta najmniej obecnie zbadana dla takich układów molekularnych. Zamierzamy wyznaczyć struktury krystaliczne wszystkich otrzymanych związków i poddać je dalszym systematycznym i wymagającym badaniom.

Rdzeniem projektu są badania fotokrystalograficzne i spektroskopowe kryształów samych ligandów i otrzymanych układów koordynacyjnych. Chcemy się dowiedzieć, jak optyczne właściwości kryształów tych związków zależą od struktury, temperatury i/lub ciśnienia. Będziemy mogli dzięki temu określić mechanizm i dynamikę przełączania ugrupowania DTE oraz ocenić wpływ warunków zewnętrznych na ten proces. Nowatorskie w swej naturze fotokrystalograficzne badania *in situ* są możliwe dzięki skonstruowanej przez nas aparaturze badawczej, pozwalającej na naświetlanie kryształów wprost na dyfraktometrze. Wyniki takich dynamicznych badań dyfrakcyjnych zostaną odniesione do obserwacji spektroskopowych, ze szczególnym uwzględnieniem zmian absorpcji w zakresie UV-Vis i zmian właściwości luminescencyjnych tych związków w zależności od tego, czy układ DTE jest otwarty czy zamknięty. Wszystkie nasze eksperymenty będziemy porównywać i wspomagać obliczeniami teoretycznymi.

Proponowane przez nas badania będą stanowić pierwszą systematyczną analizę przełączalnych układów DTE i ich kompleksów z metalami przejściowymi w cieple stałym. Uważamy, że uzyskane wyniki pozwolą lepiej zrozumieć procesy fotochemiczne zachodzące w takich układach, co w dalszej perspektywie przyczyni się do świadomego projektowania nowych funkcjonalnych materiałów o określonych właściwościach.