



MXO2-ISOMER: w poszukiwaniu wydajnych materiałów fotoprzełączalnych o zmiennej barwie na bazie kompleksów metali przejściowych 4. okresu zawierających proste ligandy ambidentne

Oddziaływanie światła z materiałem jest jednym z kluczowych procesów zachodzących w naturze. Dogłębne zrozumienie jego charakteru i związanych z nim zjawisk ma kluczowe znaczenie dla świadomego projektowania nowych materiałów funkcjonalnych o pożądanych cechach. W tym kontekście, związki chemiczne wykazujące określone właściwości fotoaktywne, zarówno w roztworze, jak i, co ważniejsze, w stanie stałym, należą

obecnie do najbardziej pożądanych materiałów. Materiały fotoaktywne mogą znaleźć różnorodne zastosowania w dziedzinie optoelektroniki czy medycyny, jak w technologiach przetwarzania energii słonecznej i przechowywania danych. Związki przełączalne są tu szczególnie interesujące. Ich strukturę można bowiem modyfikować za pomocą bodźców zewnętrznych (światło, temperatura), co wpływa na zmianę ich właściwości mikro- i makroskopowych. Z łatwością możemy sobie wyobrazić nowoczesne materiały oparte na fotoprzełączalnych układach chemicznych, stosowane jako powłoki zmieniające kolory (np. karoseria samochodowa, soczewki kontaktowe, itp.), których barwę można kontrolować za pomocą bodźców zewnętrznych. Właśnie taka idea stanowiła inspirację dla niniejszego projektu badawczego.

W konsekwencji, przedstawiany projekt poświęcony jest dogłębnym i systematycznym badaniom indukowanych światłem procesów zachodzących w kryształach wybranych kompleksów Fe, Ni i Co, zawierających ambidentne ligandy nitrowe i/lub cząsteczki dwutlenku siarki. Takie ligandy mogą przełączać się między podstawowym sposobem wiązania z metalem a izomerycznym pod wpływem naświetlania lub zmian temperatury. Z kolei wybór metali jest podyktowany ich dostępnością, ceną i, co najważniejsze, stosunkowo łatwą modyfikacją ich kompleksów, możliwą poprzez wymianę ligandów, co pozwala na znaczną różnorodność strukturalną, zmienne środowisko molekularne w kryształach, a także różną liczbę fotoprzełączalnych fragmentów związanych z centrum metalicznym. Taki wybór umożliwi badanie wpływu wielu czynników na izomeryzację wiązania grupy nitrowej i dwutlenku siarki, pozwoli porównać rolę różnych centrów metalicznych, ligandów, oddziaływań międzycząsteczkowych, ładunków na atomie metalu, itp. Ponadto będziemy się starali ocenić wpływ temperatury na przebieg procesu izomeryzacji, jak również zbadać odwracalność analizowanego procesu i stabilność utworzonych izomerów. Badania rozpoczniemy od modelowych związków koordynacyjnych Fe, Ni i Co zawierających grupy nitrowe i/lub cząsteczki dwutlenku siarki, wybranych na podstawie naszego doświadczenia i dostępnej literatury przedmiotu, a następnie będziemy je modyfikować. Planujemy systematycznie przebadać wyselekcjonowane związki i ich właściwości, począwszy od syntezy, poprzez krystalizację, analizy spektroskopowe czy strukturalne, po metody fotokrystalograficzne. Wyniki eksperymentalne zostaną uzupełnione modelowaniem teoretycznym, w celu zaproponowania możliwego mechanizmu reakcji w ciele stałym i oceny wzajemnej stabilności różnych połączeń ugrupowań NO₂ i SO₂.

Wierzmy, że w toku projektu otrzymamy wydajne związki fotoprzełączalne o zmiennej barwie i/lub uzyskamy zestaw informacji, który pozwoli w przyszłości zaprojektować nowoczesne materiały funkcjonalne, w szczególności charakteryzujące się pożądanymi właściwościami spektroskopowymi, odwracalnością przełączania, wysokim stopniem konwersji i stabilnością, odpowiednimi do dalszych potencjalnych zastosowań technologicznych.

