

Teoretyczne projektowanie i przewidywanie struktury i właściwości fosforescencyjnych materiałów krystalicznych z wiązaniami halogenowymi i eksperymentalna weryfikacja ich właściwości.

Projektowanie nowych materiałów jest stałym procesem istotnie wpływającym na postęp technologiczny i ekonomiczny ludzkości. Liczy się jednak nie tylko to, jakie materiały opracujemy, ale także jakimi metodami to zrobić. Ogólnie rzecz biorąc, do tej pory nowe materiały są opracowywane w laboratoriach badawczych poprzez tak zwane badania przesiewowe, w których różne związki są poddawane badaniom w różnych warunkach eksperymentalnych, aż do znalezienia materiału spełniającego pożądane właściwości. To jest zarówno kosztowne jak i długotrwałe. Ostatnio jednak coraz więcej uwagi poświęca się metodom teoretycznym, jako alternatywie dla tradycyjnych badań eksperymentalnych. Projektowanie teoretyczne ma wiele zalet: uwalnia naukowców od pracochłonnych prób eksperymentalnych i pozwala im skupić się na bardziej kreatywnych zadaniach, zmniejsza koszty prowadzenia eksperymentów, zużycie energii i ilość odpady chemicznych. Jednocześnie badania teoretyczne pomagają nie tylko przewidzieć, ale także lepiej zrozumieć właściwości materiałów i mechanizmy ich działania. Wraz z postępem coraz dokładniejszych metod symulacji teoretycznych, którym towarzyszy wzrost dostępnej mocy obliczeniowej, przejście na teoretyczne projektowanie materiałów jest bardzo pożądane i oczekiwane.

Badania w naszej grupie koncentrują się na opracowaniu nowych zaawansowanych metod teoretycznych użytecznych w projektowaniu nowych materiałów. W tym projekcie badamy wpływ tak zwanych wiązań halogenowych na generowanie nowego rodzaju materiałów fluorescencyjnych. Wiązanie halogenowe jest oddziaływaniem, które łączy razem cząsteczki zawierające donory wiązania halogenowego (zazwyczaj atomy jodu lub bromu) i atomy/grupy akceptorowe (tlen, azot, siarka, pierścienie aromatyczne). Umożliwia to tworzenie kryształów zawierających wiele różnych cząsteczek w bliskiej odległości, dzięki czemu uzyskuje się materiały o właściwościach innych niż właściwości poszczególnych składników molekularnych analizowanych osobno. Jednym z bardzo ekscytujących efektów umożliwianym przez wiązanie halogenowe jest zdolność do indukowania tak zwanej emisji fosforescencyjnej cząsteczek organicznych. W przeciwieństwie do częściej występującej fluorescencji, fosforescencja charakteryzuje się znacznie dłuższym czasem życia (pomyśl o zegarkach z tarczami świecącymi w ciemności) i możliwymi zmianami koloru emisji. Oczywiście rzeczywiste zastosowania fosforescencji są znacznie bardziej zróżnicowane, na przykład biologiczne obrazowanie tkanek wewnętrznych, barwniki do wykrywania odcisków palców i nielegalnych substancji, a także ochrona banknotów przed fałszowaniem i wiele innych.

Celem tego projektu jest opracowanie metod obliczeniowych wyjaśniających zdolność cząsteczek do tworzenia wiązania halogenowego w stanie stałym, przewidywania w jaki sposób cząsteczki te „wołą” układać się w struktury krystaliczne i wreszcie symulacja właściwości optyczne powstałych materiałów. Oznacza to, że chcemy szacować zdolność materiałów do wytwarzania emisji fosforescencyjnej i przewidywać ich kolor. Na każdym etapie obliczeń przeprowadzimy eksperymenty, aby zweryfikować nasze prognozy i zmodyfikować metody obliczeniowe w razie potrzeby. Na koniec nauczymy się przewidywać struktury i właściwości optyczne kryształów z wiązanych halogenowym całkowicie obliczeniowo, tak aby tylko struktury o interesujących właściwościach były syntetyzowane eksperymentalnie.