



M:M-PROP: oddziaływania metalofilowe - sojusznicy czy wrogowie?

Jednym z najważniejszych obszarów chemii jest obecnie chemia nowych materiałów, które są w stanie szybko i niezawodnie reagować na zmiany w lokalnym środowisku oraz wysyłać sygnały, które poinformują nas o zachodzących zjawiskach. Z tego powodu związki chemiczne wykazujące konkretne, specyficzne właściwości fotoaktywne, zarówno w roztworze, jak i, co ważniejsze, w stanie stałym, należą do najbardziej pożądaných materiałów. Szczególnie interesujące są tutaj luminescencyjne kompleksy koordynacyjne metali przejściowych, mające już szerokie zastosowania w konwersji energii słonecznej, a także w innych dziedzinach, począwszy od elektroniki molekularnej i fotokatalizatorów, po urządzenia emitujące światło (urządzenia LED) i znaczniki biologiczne. Bardzo ważna jest też możliwość kontrolowania właściwości optycznych takich materiałów na poziomie molekularnym, aby następnie zastosować tę wiedzę do produkcji materiałów o określonych, istotnych dla wybranych zastosowań, właściwościach w każdej skali, tj. od cząsteczek po materiały makroskopowych. Mimo wielu poczynionych wysiłków ten bardzo trudny cel pozostaje w dużej mierze nieosiągnięty.

Niniejszy projekt poświęcony jest grupie kompleksów (ale nie wyłącznie) zawierających centra Rh^I , Pt^{II} oraz Au^{III} . Takie układy często są luminescencyjne (m.in. silnie fosforescencyjne czy wykazujące opóźnioną fluorescencję aktywowaną termicznie), wykazują dichroizm lub różne barwy zależnie od agregacji cząsteczek w ciele stałym. Wyselekcjonowane układy będą obejmować zarówno dyskretne kompleksy monocentrowe, jak i struktury stabilizowane przez różnego rodzaju wewnątrz- i/lub międzycząsteczkowe oddziaływania metal...metal. Celem tego projektu jest dogłębne zbadanie efektu występowania kontaktów metalofilowych – ich rodzaju, charakteru i wpływu na indukowane przez światło procesy przenoszenia ładunku, a w konsekwencji na właściwości spektroskopowe badanych materiałów. Interesują nas wszelkie zależności między cechami strukturalnymi i elektronowymi oraz makroskopowymi właściwościami substancji. Chcielibyśmy wyjaśnić obserwowane zjawiska i trendy, znaleźć jasne odpowiedzi, kiedy określone specyficzne oddziaływania wzmacniają pożądanę właściwość, a kiedy nie, oraz sprawdzić, czy (a jeśli tak – kiedy) można rozsądnie kontrolować właściwości spektroskopowe za pomocą temperatury i ciśnienia.

Badania będą prowadzone możliwie kompleksowo i systematycznie, począwszy od syntezy, poprzez krystalizację, spektroskopię w roztworze i ciele stałym, badania dyfrakcyjne (w tym pomiary wysokorozdzielcze, wielotemperaturowe i pod wysokim ciśnieniem), aż do zaawansowanych metod absorpcji przejściowej i fotokrystalografii. Wymienione metody eksperymentalne będą uzupełnione obliczeniami teoretycznymi, a także standardowymi analizami fizykochemicznymi.

Otrzymane wyniki pomogą wyjaśnić naturę oddziaływań w badanych układach (zwłaszcza oddziaływań metal...metal) w kryształach i w roztworze, oraz ich rolę w procesach indukowanego światłem przeniesienia ładunku. Uzyskane wyniki powinny dostarczyć informacji o dynamice zjawisk towarzyszących procesom przeniesienia ładunku, o indukowanych światłem zmianach struktury i rozkładu gęstości elektronowej w badanych kompleksach. Ponadto wysokociśnieniowe i wielotemperaturowe pomiary dyfrakcji rentgenowskiej powinny umożliwić korelację między strukturą a właściwościami spektroskopowymi badanych układów oraz wskazać zakres, w jakim możemy je kontrolować. Zgromadzona wiedza może znacząco przyczynić się do świadomego i inteligentnego projektowania nowych materiałów o właściwościach dedykowanych zastosowaniom w LEDach, ogniwach słonecznych, biomarkerach itp.