

Celem projektu LOW-LIGHT jest zaprojektowanie stabilnych i wysoce wydajnych hybrydowych nanomateriałów do zastosowań optoelektronicznych, czyli do zbierania światła słonecznego i przetwarzania go na inny rodzaj światła lub czystą energię. Nanomateriały zostaną umieszczone w urządzeniach prototypowych przez multidyscyplinarny i międzynarodowy zespół chemików i fizyków eksperymentalnych. Projekt badawczy koncentruje się na badaniu hybrydyzacji wybranych nanoobiektów, tzw. Nano Building Blocks (w skrócie NBBs) i ich dalszego procesu transformacji w stabilne dyspersje koloidalne (formę umiarkowanie gęstej substancji). NBBs jako dyspersja koloidalna, rozproszona w formie cienkiego filmu na urządzeniach elektrycznych, będzie ich integralną częścią transformującą światło w energię. Kluczem do badań jest kontrola oddziaływań i właściwości samoorganizacji NBB w nanoskali, w celu optymalizacji związku pomiędzy strukturą, właściwością a funkcją zintegrowanych nanosystemów. Cel projektu to uzyskanie struktur o wysokiej konwersji światła i osiągnięcie dobrej wydajności i długoterminowej stabilności w rzeczywistych urządzeniach.

Badane NBBs to materiały niskowymiarowe oparte na węglu – są to więc małe cząsteczki organiczne, węglowe kropki kwantowe, nanowstążki, nanorurki i grafen. Badanie będzie polegać na zaprojektowaniu i przekształcaniu małych, funkcjonalnych NBBs w większe zintegrowane systemy, co zaprowadzi do powstania zintegrowanych nanoarchitektur o wysoce wydajnym zbieraniu/konwersji światła i/lub emisji energii. W ten sposób różne NBBs zostaną połączone ze sobą za pomocą metod chemicznych, aby wzmocnić procesy transferu energii (ET)/transferu ładunku (CT). Projektowanie komponentów NBBs odbędzie się za pomocą modelowania obliczeniowego, a następnie ich syntezy metodami chemicznymi, szczegółowej charakterystyce technikami spektroskopowymi oraz integracji w urządzenia. Główne wyzwanie projektu to znalezienie połączenia materiałów, które mogą zapewnić ograniczoną rekombinację ładunków/eksycyonów w binarnych nanofazach, a jednocześnie mogą przeprowadzić sprawne procesy ET/CT w zakresie wytwarzania prądu/światła. Sposób, w jaki poszczególne NBBs oddziałują ze sobą jest więc kluczowy by stworzyć działające urządzenia. Wymaga to dogłębnej wiedzy o chemicznej i fizycznej naturze interfejsu pomiędzy NBBs. W fazie projektu urządzeń zostaną rozważone różne poziomy budowy struktur nanohybrydowych aby zwiększyć generowanie/elektroluminescencję fotoprądu i powiązać morfologię interfejsu z jego funkcją: stosunek gęstości między składowymi, względna odległość, orientacja oraz wzajemne położenie.

W LOW-LIGHT zastosujemy 1:wieloskalowe metody obliczeniowe do opisu chemicznych i fizycznych właściwości interfejsów; 2:syntezę i charakteryzację interfejsów hybrydowych; 3:optymalizację funkcjonalności optoelektronicznej. Pierwszy punkt zostanie przeprowadzony przy uwzględnieniu różnych podejść obliczeniowych, aby prawidłowo opisać procesy pochłaniania i emisji światła przez NBBs. Co ważne, ewolucja interfejsu w czasie będzie modelowana metodami klasycznej dynamiki molekularnej, przedstawiającej atomy w postaci małych kulek połączonych ze sobą sprężynami. Metoda ta pozwala na wzięcie pod uwagę realistycznych systemów modelowych (tysiące atomów) i fizycznie znaczących skal czasowych (setki nanosekund) aby zbadać nie tylko ich ewolucję w czasie, ale także stabilność różnych interfejsów. Następnie skupimy się na dokładniejszych metodach obliczeniowych, by zrozumieć mechanizmy przewodzenia energii i ładunków elektrycznych występujące na granicy faz oraz zoptymalizujemy je tak, aby wyeliminować rekombinację ładunków. Produkcja nanohybryd, jak przewidziano w punkcie 2, będzie możliwa dzięki zastosowaniu zaawansowanych metod nanochemii w oparciu o oddziaływanie zarówno kowalencyjne, jak i niekowalencyjne, po to, by uzyskać ścisłą kontrolę nad końcowymi strukturami. Będzie to kluczem do wdrożenia punktu 3: gdy nano-hybrydy będą mieć odpowiednie ku temu cechy, zostanie przeprowadzona ich stabilizacja do postaci nanotuszów gotowych do wysokowydajnego odlewania roztworu w formie cienkich warstw gotowych do użycia w urządzeniach prototypowych. Wydajność wspomnianych urządzeń posłuży do wyciągnięcia wniosków na temat skuteczności całego podejścia LOW-LIGHT. LOW-LIGHT opracuje zestaw technik nanostrukturyzacji oraz dostarczy innowacyjne instrukcje racjonalnego projektowania nanohybryd przydatnych dla całej społeczności naukowej. Projekt będzie poszukiwał unikalnego połączenia najnowocześniejszych materiałów, by stworzyć wysoce innowacyjne platformy dla technologii optoelektronicznych. Jego obarczone są znacznym ryzykiem, biorąc pod uwagę niezwykle niski poziom innowacyjności, który w jednym projekcie łączy modelowanie i syntezę złożonych architektur nanohybrydowych opartych na materiałach niskowymiarowych, a także testowanie ich funkcjonalności. Jednak powodzenie tego projektu oznacza wysoki zysk, gdyż da on szansę na powstanie taniej technologii, stymulując też dalsze wdrażanie nowych rozwiązań technologicznych w służbie społeczeństwu.