

Postęp nauki w ostatnich dziesięcioleciach umożliwił wytwarzanie materiałów o grubości nanometrów. Takie nanowarstwy w urządzeniach (opto)elektronicznych (tj. tranzystorach, ogniwach słonecznych, czujnikach gazu lub biosensorach) są często łączone w wielowarstwowe struktury materiałów o różnych właściwościach. O skuteczności urządzenia decydują właściwości warstw składowych. Kluczową kwestią są procesy zachodzące na powierzchni i na styku materiałów lub między materiałem otaczającą atmosferą. Najważniejsze dla sprawności urządzeń elektronicznych są właściwości elektroniczne, chemiczne i morfologiczne materiałów. Dlatego przewidywanie tych właściwości i procesów fizykochemicznych zachodzących na powierzchniach granicznych jest kluczowe dla projektowania urządzeń opartych o struktury wielowarstwowe.

W dobie dużej mocy obliczeniowej otworzyły się nowe możliwości w materiałoznawstwie. Właściwości materiałów można przewidzieć przed przygotowaniem próbek fizycznych. Zastosowanie modelowania komputerowego badanych materiałów metodami chemii kwantowej może posłużyć do wstępnej selekcji najbardziej obiecujących struktur, ograniczając pomiary eksperymentalne do wąskiej grupy struktur o optymalnych właściwościach. W związku z tym zmniejsza się koszt i czas potrzebny do scharakteryzowania nowych struktur, a co za tym idzie poprawia się efektywność badań.

Struktury hybrydowe, definiowane jako struktury składające się z co najmniej dwóch elementów z różnych grup materiałów, wzbudzają ostatnio duże zainteresowanie. Najpowszechniejszą kombinacją jest krystaliczna warstwa nieorganiczna połączona z organicznymi warstwami molekularnymi. Takie struktury łączą zalety obu rodzajów materiałów.

Atrakcyjną grupą materiałów, które można zastosować jako organiczną część struktury, są ftalocyjaniny metalu (MPc). Najpopularniejszymi materiałami na warstwy nieorganiczne są tlenki metali. Popularnym ostatnio tlenkiem metalu jest tlenek aluminium. Jest on badany i stosowany od prawie wieku, jednak wraz ze wzrostem zainteresowania nanomateriałami, nanostruktury tlenku aluminium stały się jednym z najpopularniejszych materiałów, mającym zastosowanie w separacji molekularnej, katalizie, wytwarzaniu i magazynowaniu energii, (opto) elektronice, czujnikach i biosensorach. Najnowsze trendy w materiałoznawstwie nastawione są na utrzymanie wysokiej jakości urządzeń, ale jednocześnie obniżanie kosztów produkcji. Jednocześnie jednym z najważniejszych wyzwań dla naukowców jest wykorzystanie materiałów nadających się do recyklingu i znalezienie możliwych sposobów ich odzyskania. Z tego punktu widzenia nie należy lekceważyć znaczenia badań aluminium i tlenku aluminium. Materiały te mogą być stosowane jako tańsze alternatywy dla innych metali i tlenków metali jako elektrody, warstwy w tranzystorach polowych lub podłoża w czujnikach gazu. Chociaż istnieje wiele obliczeniowych i eksperymentalnych badań powierzchni tlenku aluminium, interfejs tlenek aluminium/materiały organiczne (tj. MPc) nie jest dobrze scharakteryzowana. Istnieją jednak potencjalne zastosowania takich interfejsów w ogniwach słonecznych lub tranzystorach. Badanie wpływu ftalocyjanin metalu na właściwości tlenku aluminium, oprócz urządzeń elektronicznych, może być również wykorzystane do odzyskiwania aluminium. Ostatnio pojawiły się badania wskazujące na możliwość zastosowania ftalocyjanin metalu jako inhibitorów korozji aluminium. Dlatego celem tego projektu jest zastosowanie nowej metodologii opartej na modelowaniu teoretycznym poprzedzającym badania doświadczalne w celu zrozumienia procesów zachodzących na powierzchni i interfejsie w strukturach opartych na tlenkach aluminium i ftalocyjaninach metalu.

Potencjalne wyniki projektu mogą przynieść korzyści zarówno ekonomiczne, jak i środowiskowe w produkcji efektywnych urządzeń na bazie nadającego się do recyklingu aluminium oraz jego tlenku. Ponadto, potencjalny szeroki wpływ projektu na inżynierię materiałową, to oprócz scharakteryzowania interfejsu konkretnego tlenku i ftalocyjanin metalu, wskazówka metodologiczną do projektowania podobnych układów.