

W ciągu ostatniej dekady nastąpił znaczący rozwój nowych technologii wykorzystujących światło w zakresie bliskiej podczerwieni (near infrared, NIR). Obejmują one tak różnorodne obszary jak telekomunikacja, rolnictwo, obrazowanie biomedyczne, technologie wojskowe oraz liczne „inteligentne” rozwiązania, np. osobiste monitory parametrów zdrowotnych czy analizatory żywności na użytek konsumentów. Aby umożliwić dalsze wdrażanie tych technologii, konieczne jest opracowanie nowych, wydajnych emiterów promieniowania w zakresie bliskiej podczerwieni (800–2500 nm), które zastąpią starsze, mniej efektywne rozwiązania, takie jak lampy żarowe. Jednym z najlepszych sposobów osiągnięcia tego celu jest zastosowanie luminoforów na podczerwień — materiałów pochłaniających światło widzialne (np. z niebieskiej diody LED) i emitujących je ponownie w postaci światła podczerwonego.

Luminofor to materiał otrzymywany z nieorganicznych związków w procesie aktywacji, polegającym na domieszkowaniu śladowymi ilościami określonych pierwiastków, takich jak jony metali przejściowych (TM, zlokalizowane w bloku *d* układu okresowego). Domieszki te pochłaniają docierające promieniowanie, a następnie emitują promieniowanie o większych długościach fal. Jony metali przejściowych stanowią szczególnie wszechstronnych aktywatorów, ponieważ dzięki zmianom ich otoczenia atomowego można precyzyjnie regulować długość fali emitowanego światła.

Jednymi z najbardziej efektywnych luminoforów na podczerwień są te z jonami chromu (Cr^{3+}), emitujące światło w zakresie 700–1000 nm. Nadal jednak dużym wyzwaniem pozostaje odnalezienie materiałów opartych na jonach metali przejściowych, zdolnych do emisji przy jeszcze dłuższych falach — powyżej 1000 nm — bez utraty wysokiej wydajności.

Celem tego projektu jest odkrycie nowych materiałów luminescencyjnych bazujących na różnorodnych jonach metali przejściowych, które pozwolą na uzyskanie luminoforów emitujących w bliskiej podczerwieni (NIR) przy długościach fal przekraczających 1000 nm. Idea polega na tym, że gdy metale przejściowe zostaną wprowadzone do struktury krystalicznej materiału „gospodarza” (tzw. matrycy), tworzą specyficzne poziomy energetyczne, na co wpływ ma bezpośrednio otoczenie atomowe. Modyfikując skład chemiczny luminoforu, można kontrolować ten proces i przesuwac zakres emisji w pożądanym obszarze NIR — procedura ta jest określana jako „inżynieria pola krystalicznego”.

Aby sprostać ogromnej liczbie potencjalnych jonów metali przejściowych i matryc, w projekcie zostanie wykorzystane uczenie maszynowe. Analizując obszerne bazy danych dotyczące właściwości materiałów optycznych, algorytmy uczenia maszynowego przyspieszą poszukiwanie obiecujących kombinacji, skuteczniej niż tradycyjne metody prób i błędów. Podejście to może również ujawnić nowe, nieoczekiwane zależności między składem materiału gospodarza a zdolnością do silnej emisji NIR.

Po wytypowaniu kandydatów materiały te zostaną zsyntezowane w warunkach laboratoryjnych, z wykorzystaniem technik takich jak synteza hydrotermalna czy reakcje w fazie stałej. Ich właściwości luminescencyjne będą badane w zróżnicowanych warunkach, w tym pod wysokim ciśnieniem (aby zasymulować silniejsze oddziaływania pola krystalicznego) oraz w niskich temperaturach (w celu lepszego zrozumienia stabilności termicznej). Uzyskane wyniki zostaną następnie porównane z modelami teoretycznymi, co pozwoli ulepszyć nasz model działania tych materiałów.

Łącząc zaawansowane techniki syntezy, uczenie maszynowe i modelowanie teoretyczne, projekt ten dąży do poszerzenia granic technologii luminoforów NIR, otwierając drogę do innowacji w dziedzinie czujników, technologii obrazowania i wielu innych zastosowań.