

Półprzewodnikowe jednościenne nanorurki węglowe (SWCNTs) mogą świecić w kolorach od światła widzialnego po bliską podczerwień, w zależności od ich dokładnej struktury. Czyni je to ekscytującymi kandydatami do zastosowań w czujnikach optycznych, jednak ich emisja światła — zwana fotoluminescencją — jest naturalnie bardzo słaba. Naukowcy niedawno odkryli sposoby na wzmocnienie tego świecenia poprzez dodanie specjalnych „defektów” (defekty typu sp^3) na powierzchni nanorurek, co zwiększa efektywność emisji światła. Tak zmodyfikowane nanorurki SWCNT zostały już wykorzystane do wykrywania ważnych biomolekuł, takich jak cholesterol czy dopamina. Nadal jednak reakcje chemiczne używane do wprowadzania tych defektów nie zawsze działają zgodnie z oczekiwaniami, a przyczyny tego zjawiska nie są w pełni poznane.

Aby skutecznie wykorzystywać SWCNTs, należy je najpierw rozdzielić na poszczególne typy, ponieważ są wytwarzane jako mieszaniny różnych struktur. Jedną z najlepszych obecnie metod separacji jest ekstrakcja z wykorzystaniem sprzężonych polimerów (CPE), która polega na owijaniu konkretnych typów nanorurek przez odpowiednie polimery — część z nich miało okazję badać i udoskonalać. Po rozdzieleniu SWCNTs można poddać je modyfikacji chemicznej, jednak wstępne wyniki pokazują, że pozostałości polimerów używanych do separacji mogą zakłócać dalsze reakcje chemiczne. Zaskakująco, nikt dotąd nie zbadał tego efektu szczegółowo. Zrozumienie, jak te polimery wpływają na chemię nanorurek, może pomóc w projektowaniu lepszych materiałów do bioobrazowania, detekcji i przyszłych technologii nanomateriałowych.

Projekt ten ma na celu zrozumienie, w jaki sposób sprzężone polimery (CPs) wiążą się z nanorurkami SWCNTs i wpływają na ich modyfikację. SWCNTs to małe, rurkowate materiały, które mogą świecić po oświetleniu, ale tylko wtedy, gdy ich powierzchnia jest odpowiednio zmodyfikowana. Polimery pomagają w selektywnej separacji i owijaniu określonych typów nanorurek, ale nadal nie wiemy dokładnie, jak wpływa to na ich późniejsze przemiany chemiczne. Poprzez projektowanie nowych polimerów i badanie ich działania — zarówno eksperymentalnie, jak i przy użyciu symulacji komputerowych — chcemy odkryć zasady rządzące tymi interakcjami. Wiedza ta może w przyszłości pomóc w tworzeniu wydajniejszych materiałów do czujników i technik bioobrazowania.

Projekt rozpoczyna się od syntezy nowych sprzężonych polimerów opartych na jednostkach fluorenu i karbazolu, przy użyciu reakcji sprzęgania Suzuki, co umożliwia precyzyjne kontrolowanie składu i struktury polimerów. Polimery te są następnie charakteryzowane za pomocą technik takich jak chromatografia wykluczania przestrzennego (SEC), spektroskopia UV-VIS oraz spektroskopia NMR, w celu określenia masy cząsteczkowej, właściwości optycznych i struktury chemicznej. Kolejnym krokiem jest testowanie zdolności tych polimerów do rozpraszania SWCNTs w toluenie — optymalizowane są takie parametry jak stosunek masowy polimer/nanorurka, czas sonikacji i prędkość wirowania, aby uzyskać wysokiej jakości selektywne dyspersje. Gdy zostaną wyznaczone optymalne warunki, pierwotne polimery zostaną usunięte poprzez filtrację i płukanie, a nanorurki zostaną ponownie zdyspergowane z użyciem innych polimerów, umożliwiając dalsze modyfikacje powierzchni. Proces wymiany polimeru pozwala na systematyczne badanie wpływu różnych środowisk polimerowych na późniejsze reakcje chemiczne SWCNTs. Do chemicznej modyfikacji użyte zostaną pochodne fenylohydrazyny, które reagują z powierzchnią nanorurek, tworząc luminescencyjne defekty. Funkcjonalizacje będą monitorowane za pomocą spektroskopii UV-VIS-NIR, pomiarów fotoluminescencji i spektroskopii Ramana, w celu oceny efektywności reakcji i gęstości defektów. Ostatecznie, do modelowania interakcji polimer–nanorurka zostaną wykorzystane obliczenia dynamiki molekularnej (MD), Monte Carlo (MC) i funkcjonałów gęstości (DFT), co pomoże uzasadnić wyniki eksperymentalne i pogłębić zrozumienie wpływu owijania polimerowego na reaktywność i możliwości funkcjonalizacji nanorurek.

Badania te dostarczają bezprecedensowego wglądu w to, jak sprzężone polimery oddziałują z jednościnnymi nanorurkami węglowymi, zarówno pod kątem efektywności ich dyspersji, jak i wpływu na ich reaktywność chemiczną. Systematyczne badanie procesu wymiany polimeru i funkcjonalizacji pozwoli odkryć kluczowe zasady projektowania powierzchni SWCNTs z atomową precyzją. Uzyskane wyniki nie tylko wypełnią istotną lukę w wiedzy na temat chemii układów polimer–nanorurka, ale także stworzą przełomową platformę do tworzenia wysoce dostrajanych, luminescencyjnych nanomateriałów. Odkrycia te istotnie przyspieszą rozwój nowej generacji technologii optoelektronicznych i biosensorycznych.