

W obliczu bardzo dynamicznego rozwoju cywilizacyjnego, ciągłego polepszania jakości życia oraz zwiększania się konsumpcji wszelkich dóbr materialnych, My - osoby zajmujące się nauką jesteśmy zobligowani do poszukiwania nowych rozwiązań technologicznych, które będą bardziej wydajne, tańsze i dostępne dla większej liczby ludzi. Wśród takich technologii i niezbędnych do nich materiałów możemy wyróżnić diody elektroluminescencyjne (OLEDs - organic light emitting diodes), ogniwa słoneczne (OPVs - organic photovoltaics, DSSC - dye-sensitized solar cell) oraz organiczne tranzystory polowe (OFETs - organic field-effect transistors). Wszystkie wymienione powyżej technologie zaliczane są do organicznej elektroniki, czyli działu nauki i techniki, którą wykorzystuje każdy z nas w codziennym życiu m. in. w smartfonach, telewizorach LED, czy też komputerach. W celu sprostania oczekiwaniom konsumentów poszukuje się materiałów, które dzięki swoim właściwościom chemicznym i procesom w nich zachodzącym, emitują lub też absorbują światło - co wykorzystuje się w wyżej wymienionych urządzeniach. Do takiej grupy należą związki organiczne, jak i kompleksy, czyli takie związki, które zawierają w swojej strukturze atomy metali. W ostatnich latach widoczne jest duże zainteresowanie związkami, które są pochodnymi pirenu, czyli związku chemicznego, który otrzymywany jest zwykle poprzez wyodrębnienie z sadzy podczas niecałkowitego spalania węgla kamiennego. Jego pochodne charakteryzują się intensywną niebieską barwą świecenia, co więcej są one odpowiednimi substratami do kolejnych reakcji, w wyniku których można otrzymać inne molekuly o innych oczekiwanych, właściwościach. Mając na celu poszukiwanie nowych, wydajniejszych luminoforów opartych na pierścieniu pirenowym postanowiono zrealizować niniejszy projekt. Jego głównym celem jest synteza odpowiednio zaprojektowanych ligandów NCN-cyklometalujących (będących pochodnymi pirenu) o dwojakiej naturze. Po pierwsze związki te będą wykazywały interesujące właściwości fotofizyczne, a po drugie będą odpowiednimi ligandami do syntezy związków kompleksowych o innych właściwościach. Wszystkie otrzymane związki będą szeroko scharakteryzowane za pomocą metod optycznych, elektrochemicznych, termicznych i innych. Dzięki temu będzie możliwe sprawdzenie jak modyfikacje w strukturze wpływają na ich właściwości. Ta wiedza tj. znajomość relacji struktura - właściwości, pozwoli nam w kolejnych etapach modyfikować, czyli zmieniać poszczególne elementy lub je rozbudowywać (można to śmiało porównać do układania klocków, w celu zbudowania jak najlepszych budowli) co stwarza szerokie możliwości świadomego wpływania na właściwości syntezowanych struktur. Wszystkie badania eksperymentalne będą wspierane przez obliczenia teoretyczne, metodami kwantowo-mechanicznymi, takimi jak DFT (density functional theory) oraz TD-DFT (time-dependent density functional theory). Uzyskana w ten sposób wiedza pozwoli na zaprojektowanie i zsyntezowanie kolejnych związków, efektywniejszych od tych znanych dla zastosowań w organicznej elektronice. W wyniku realizacji projektu otrzyma się potencjalne materiały funkcjonalne jako warstwy aktywne w organicznych diodach elektroluminescencyjnych. Dzięki współpracy z naukowcami zajmującymi się badaniami materiałowymi, najbardziej obiecujące związki zostaną przetestowane. Tylko takie komplementarne podejście do przedstawionego problemu badawczego może w pełni rozwiązać jego założenia i pozwolić na osiągnięcie zaplanowanych celów.