

Zależność właściwości optycznych od struktury w barwnikach o strukturze kwadrupolowej

Bartosz Szymański

Kierownik: **dr inż. Radosław Kamiński**

Barwniki kwadrupolowe zawierające układ akceptor-donor-akceptor są związkami o zastosowaniach w optoelektronice, obrazowaniu komórkowym i w mikroskopii wysokiej rozdzielczości. Jednym z najbardziej efektywnych donorów możliwych do zastosowania w tego typu barwnikach jest układ pirolo[3,2-b]pirolu. Dobierając akceptor o odpowiedniej sile możemy przesunąć widmo absorpcji, a co za tym idzie widmo emisji. W ramach niniejszej pracy przeanalizowano właściwości optyczne barwników opartych o rdzeń pirolo[3,2-b]pirolu w ciele stałym przy użyciu spektroskopii UV-Vis (statycznej i czasowo-rozdzielczej) oraz zbadano ich strukturę przy pomocy krystalografii rentgenowskiej na monokryształach. Zaobserwowano różnice w maksimach absorpcji w ciele stałym w porównaniu do roztworu. Różnice te są zależne od kąta dwuściennego pomiędzy fragmentami pochodzącymi od donora i akceptora w cząsteczce barwnika. Wykonane obliczenia teoretyczne przy użyciu zależnej od czasu teorii funkcjonału gęstości prowadzą do hipotezy, iż układy typu akceptor-donor-akceptor możemy traktować jako studnie kwantowe z barierami nieskończonego potencjału i na podstawie tego modelu możemy wyznaczać maksima absorpcji. Ów model daje dobrą zgodność z eksperymentem. W niniejszej pracy przeanalizowano wpływ silnych akceptorów na przesunięcie maksimów absorpcji w pirolo[3,2-b]pirolach, zaobserwowano zależność maksimum absorpcji w spektroskopii UV-Vis od struktury związku, a także wyjaśniono różnice geometrii w kryształach w oparciu o analizę oddziaływań międzycząsteczkowych. Niniejsze badania pozwolą, poprzez głębsze zrozumienie właściwości barwników organicznych w ciele stałym, na projektowanie cząsteczek do konkretnych zastosowań w przemyśle lub medycynie.

Literatura:

- [1] Sanil G., Koszarna B., Poronik Y., Vakuliuk O., Szymański B., Kusy D., Gryko D. T., Adv. Het Chem. 2022, 138, 335.
- [2] Jiang R., Wu X., Liu H., Guo J., Zou D., Zhao Z., Tang B. Adv. Sci. 2021, 9, 3, 2104435
- [3] Szymański B., Sahoo S., Valiev R., Vakuliuk O., Łaski P., Jarzemska K. N., Kamiński R., Baryshnikov G., Teimouri M., Gryko D. T., New J Chem. 2024, 48, 2416