

Projekt 3.9 Natura i właściwości najniższego stanu trypletowego pochodnych porfiryny i ich zastosowanie w biologii

Promotor: prof. dr hab. Jacek Waluk / dr Aleksander Gorski

Instytut: Chemii Fizycznej PAN

Zespół: Zespół 29. Fotofizyka i spektroskopia układów fotoaktywnych – prof. dr hab. Jacek Waluk

www: <https://ichf.edu.pl/zespoły/fotofizyka-i-spektroskopia-ukladow-fotoaktywnych>

Opis:

Stany trypletowe porfiryny zostały przebadane kilkadziesiąt lat temu z wykorzystaniem spektroskopii wysokiej rozdzielczości w sztywnych środowiskach przy niskich temperaturach. Położenie i natura dwóch najniższych stanów trypletowych porfiryny pierwotnie przypisane przez grupę van der Waalsa. Zasugerowano, że w niepolarnym środowisku przy niskich temperaturach pierwszym stanem trypletowym porfiryny jest stan o symetrii $3B_{2u}$ (Q_y), natomiast drugi stan trypletowy charakteryzuje się symetrią $3B_{3u}$ (Q_x). Grupa J. Michla pokazała, że w matrycach z gazów szlachetnych (Xe) przy 3.7 K najniższym stanem trypletowym jest stan Q_x . Stany Q_x i Q_y położone są blisko siebie w energii. Ta niewielka różnica energetyczna pomiędzy stanami może tłumaczyć niezgodność w określeniu natury najniższego stanu trypletowego na skutek zachodzącej inwersji stanów w zależności od polarności/polaryzowalności otoczenia. Natura najniższego stanu trypletowego ma wpływ na fotofizykę badanej cząsteczki i jej zastosowania. Odkryto, że na skutek oddziaływania z Xe największemu, około 100-krotnemu zwiększeniu ulega stała przejścia promienistego tryplet-singlet, co objawia się wzmocnioną fosforescencją. Natomiast, stała przejścia bezpromienistego ulega tylko kilkukrotnemu wzmocnieniu. Do tej pory pozostaje kilka pytań bez odpowiedzi. Czy możliwa jest inwersja stanów Q_x i Q_y i jak ona wpłynie na stałe promieniste i bezpromieniste relaksacji stanów trypletowych porfiryny i jej pochodnych oddziałujących z ciężkim atomem?

Cel projektu:

Celem projektu jest określenie natury i właściwości fotofizycznych stanów trypletowych pochodnych porfiryny oraz jej izomerów w zależności od polarności rozpuszczalnika lub rodzaju matrycy z gazu szlachetnego (Ne, Ar, Kr, Xe) i temperatury otoczenia. Wiedza ta jest niezbędna dla przyszłościowego projektowania nowych układów chromoforowych posiadających określone właściwości kluczowe do rozwoju narzędzi analitycznych w medycynie, biologii, chemii i nauki o środowisku.

Wymagania:

- magister chemii,
- podstawowa wiedza z zakresu chemii fizycznej ze szczególnym uwzględnieniem elektronowej i oscylacyjnej spektroskopii,
- wiedza z biologii komórek,
- podstawowa wiedza z chemii kwantowej.

Kontakt:

jwaluk@ichf.edu.pl

agorski@ichf.edu.pl