

Streszczenie popularnonaukowe

Spektroskopia elektronowego rezonansu paramagnetycznego (EPR) jest metodą badania substancji zawierających niesparowane elektrony, takich jak: wolne rodniki, jony metali przejściowych, pierwiastki ziem rzadkich. Jednocześnie, technika ta pozwala badać elektrony przewodnictwa w metalach i półprzewodnikach. Za pomocą spektroskopii EPR możliwe jest określenie otoczenia chemicznego niesparowanych elektronów, charakteru jego oddziaływań z cząsteczką chemiczną oraz określenie liczebności niesparowanych elektronów w jednostkowej objętości lub masie próbki.

Badania za pomocą spektroskopii EPR mają szczególne znaczenie dla półprzewodników organicznych (małocząsteczkowych oraz polimerowych, tzw. „polimerów skoniugowanych”), gdyż część nośników ładunku obecnych w tych substancjach ma charakter rodnikowy, a ich liczebność oraz siła oddziaływań z cząsteczką macierzystą bezpośrednio kształtują przewodnictwo tych materiałów. Stąd, szczegółowa wiedza o ilości i właściwościach rodników umożliwia zrozumienie gwałtownych zmian przewodnictwa tych substancji podczas ich utleniania i redukcji. Jednocześnie, rodniki obecne w tych materiałach nadają im ich właściwości magnetyczne, mogąc, w niedalekiej przyszłości, znaleźć zastosowanie jako nowoczesne nośniki danych - tzw. bity kwantowe.

Jednakże, aby było możliwe uzyskanie szczegółowych informacji o badanych substancjach, konieczne jest kalibrowanie spektrometrów EPR i stosowanie substancji wzorcowych, pozwalających na wiarygodne określenie badania w/w cech materiałowych. Substancja odniesienia pożądana w spektroskopii EPR, powinna wykazywać następujące cechy:

- odpowiadać wysokim normom czystości chemicznej i wykazywać trwałość oraz niezmiennosc składu w czasie długotrwałego przechowywania;
- liczba spinów we wzorcu powinna być oznaczalna niezależną chemiczną metodą analityczną;
- parametry EPR wzorca powinny możliwie jak najdokładniej odpowiadać parametrom EPR badanej próbki, w szczególności pod względem wartości czynnika g , szerokości i kształtu sygnału EPR, charakterystyki relaksacyjnej populacji spinowych.

Pomimo, iż istnieje wiele substancji odniesienia, takich jak kryształ rubinu, sole wanadu (IV), miedzi (II), manganu (II), roztwory stałe MnO/MgO i Cr_2O_3/Al_2O_3 oraz nieliczne trwałe, obojętne rodniki organiczne, żadna z nich nie należy do klasy półprzewodników organicznych, a zwłaszcza do grupy polimerów skoniugowanych. W konsekwencji, zarówno jakościowe jak i ilościowe badania tych substancji za pomocą spektroskopii EPR obarczone są niepewnością i błędami związanymi z niepełną kompatybilnością substancji odniesienia z badanymi materiałami półprzewodnikowymi.

Głównym celem niniejszego projektu jest rozwiązanie powyższego problemu, poprzez opracowanie substancji wzorcowej będącej polimerem skoniugowanym. Mając na uwadze szereg korzystnych cech, proponowane jest wykorzystanie w tym celu domieszkowanej polianiliny. Projekt zakłada:

- rozpoznanie zarówno procesu syntezy i wpływu jego warunków na własności paramagnetyczne polianiliny, pod kątem jej zastosowania jako wzorca spektroskopii EPR;
- uzyskanie informacji o cechach własnych spinów w tym materiale syntetycznym, takich jak: ilość linii składowych widma EPR, czasy relaksacji podłużnej i poprzecznej poszczególnych grup spinów, liczebność centrów paramagnetycznych, wartość czynnika g i kształt każdej z linii składowych;
- rozpoznanie zmienności wymienionych powyżej cech spektralnych polianiliny w czasie oraz podczas oddziaływania na nią szeregu czynników mogących wpływać na właściwości paramagnetyczne wolnych rodników (środowisko gazów, podwyższona temperatura oraz działanie promieniowania z zakresu nadfioletu i światła widzialnego);

Opracowany w ramach projektu wzorzec koncentracji spinów na bazie polianiliny umożliwi rzetelne i miarodajne wyznaczanie techniką spektroskopii EPR parametrów centrów paramagnetycznych w innych polimerach skoniugowanych za sprawą bliskiego podobieństwa natury chemicznej centrów obecnych we wzorcu i badanej próbce.