



**Ινστιτούτο Θεωρητικής και Φυσικής Χημείας
Εθνικό Ίδρυμα Ερευνών**

Βασ. Κωνσταντίνου 48, Αθήνα

ΔΙΑΔΙΚΤΥΑΚΟ ΣΕΜΙΝΑΡΙΟ

**“Χημική τροποποίηση διδιάστατων διχαλκογενιδίων
μετάλλων μετάπτωσης με φωτοενεργά μόρια”**

Ελένη Νικολή

**Ινστιτούτο Θεωρητικής και Φυσικής Χημείας,
Εθνικό Ίδρυμα Ερευνών**

Τρίτη 27 Μαΐου 2025, ώρα 12:00

Σύνδεσμος για την παρακολούθηση του σεμιναρίου

Χημική τροποποίηση διδιάστατων διχαλκογενιδίων μετάλλων μετάπτωσης με φωτοενεργά μόρια

Ελένη Νικολή

Ινστιτούτο Θεωρητικής Φυσικής και Χημείας, Εθνικό Ίδρυμα Ερευνών

Στο σεμινάριο θα παρουσιαστεί η παρασκευή, ο χαρακτηρισμός και η μελέτη νανοδομημένων υλικών που συνδυάζουν διδιάστατα διχαλκογενίδια μετάλλων μετάπτωσης (ΔΜΜ), όπως το MoS_2 , με οργανικά φωτοενεργά μόρια. Σκοπός της παρούσας εργασίας είναι η παρασκευή υβριδικών νανοϋλικών τύπου δότη-δέκτη ηλεκτρονίων, για διαχείριση φαινομένων φωτοεπαγώμενης μεταφοράς φορτίου. Για την επίτευξη αυτού του σκοπού, υλοποιήθηκαν διαφορετικές μεθοδολογικές προσεγγίσεις χημικής τροποποίησης των διδιάστατων υλικών με οργανικά χρωμοφόρα μόρια μέσω: (α) ηλεκτροστατικών αλληλεπιδράσεων Coulomb, μεταξύ τροποποιημένων διδιάστατων φύλλων MoS_2 με οργανικές αλυσίδες που φέρουν φορτισμένες ομάδες για την προσάρτηση αντιθέτως φορτισμένων παραγώγων πορφυρίνης του ψευδαργύρου (ZnP), φθαλοκυανίνης του ψευδαργύρου (ZnPc) και διπυρρομεθενίου βορίου (BODIPY), (β) ομοιοπολικής τροποποίησης των περιφερειακών κενών θέσεων θείου του MoS_2 με διθειολανικά παράγωγα, πάνω στα οποία αναπτύχθηκαν διακλαδισμένες οργανικές αλυσίδες τύπου PAMAM, δημιουργώντας πολλαπλά σημεία σύνδεσης για προσάρτηση πολλών φωτοενεργών μορίων ανά δομική ατέλεια πλέγματος του MoS_2 , (γ) αξονικής σύνδεσης μακροκυκλικών μορίων (ZnP, ZnPc) μέσω δεσμών συναρμογής μετάλλου-αζώτου, όπου το MoS_2 (και συγκριτικά το WS_2) τροποποιήθηκε ομοιοπολικά ώστε να φέρει πυριδινικές ομάδες πάνω στις οποίες συναρμόζονται τα κεντρικά ιόντα ψευδαργύρου των χρωμοφόρων, εξασφαλίζοντας την αξονική προσάρτησή τους, και (δ) ομοιοπολικής αξονικής προσάρτησης μέσω δεσμών Si-O, όπου φθαλοκυανίνη του πυριτίου συνδέθηκε ομοιοπολικά σε τροποποιημένο MoS_2 . Επιπλέον, παρασκευάστηκαν, χαρακτηρίστηκαν και μελετήθηκαν υβριδικά υλικά βασισμένα στο MoS_2 , που φέρουν ομοιοπολικά προσδεδεμένα υποκατεστημένα παράγωγα περυλενίου, προκειμένου να εξεταστεί η επίδρασή τους στις μη γραμμικές οπτικές ιδιότητες του MoS_2 . Με συνδυασμό φασματοσκοπικών και απεικονιστικών τεχνικών καθώς και μέσω θερμικής και ηλεκτροχημικής ανάλυσης, επιβεβαιώθηκε η επιτυχής παρασκευή όλων των παραπάνω υβριδικών υλικών και μελετήθηκαν οι φωτοφυσικές και οξειδοαναγωγικές ιδιότητές τους. Συνολικά, η εργασία αυτή παρέχει νέα γνώση σχετικά με τον ρόλο παραγόντων όπως η μέθοδος προσάρτησης, η ποσοστιαία φόρτωση φωτοενεργών μορίων προς τα φύλλα MoS_2 και οι υποκαταστάτες των οργανικών μορίων που χρησιμοποιούνται, στον τρόπο που αυτά αλληλεπιδρούν με διδιάστατους ημιαγωγούς. Η δυνατότητα ελέγχου των φωτοφυσικών ιδιοτήτων μέσω χημικής τροποποίησης αναδεικνύει τα υβριδικά υλικά των διδιάστατων ΔΜΜ με φωτοενεργά μόρια ως ελκυστικούς υποψηφίους για εφαρμογές στην οπτοηλεκτρονική. Επιπρόσθετα, τα ευρήματα της διατριβής συμβάλλουν στη βαθύτερη κατανόηση των μηχανισμών μεταφοράς φορτίου και ενέργειας, θέτοντας έτσι τα θεμέλια για τον σχεδιασμό νέων υλικών με ελεγχόμενες ιδιότητες για τις τεχνολογίες του μέλλοντος.