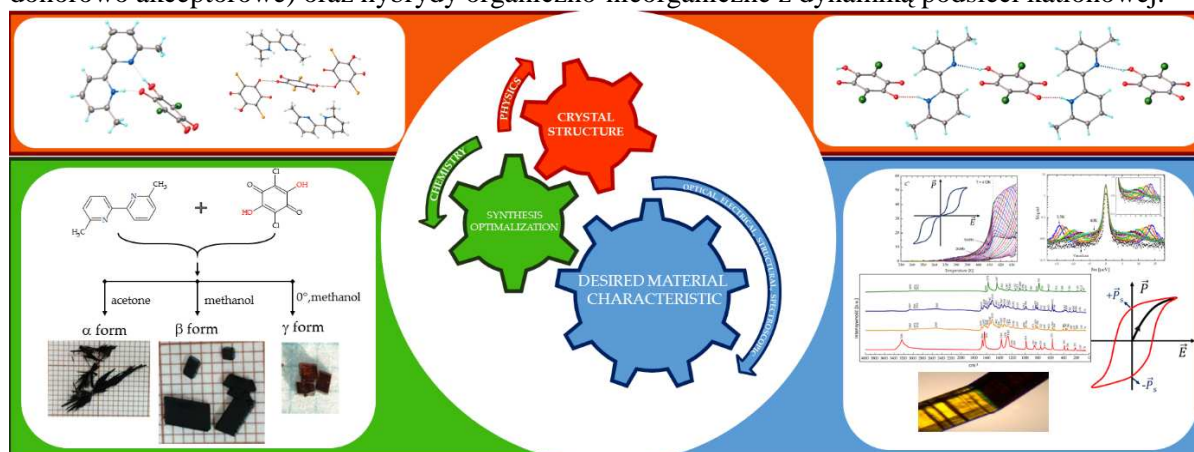


## Struktura a właściwości antyferroelektryczne i półprzewodnikowe kompleksów aromatycznych zasad i kwasów oraz hybryd organiczno-nieorganicznych

Wiązania wodorowe ze względu na swoją siłę, a także, że względu na własności kierunkowe są jednym z najważniejszych oddziaływań niekowalencyjnych prowadzących do samoorganizacji, a co za tym idzie do tworzenia nowych aglomeratów supramolekularnych. W kompleksach molekularnych proponowanych w tym projekcie dynamika protonu w wiązaniu wodorowym determinuje wiele interesujących własności fizycznych, takich jak ferroelektryczność, antyferroelektryczność lub przewodnictwo protonowe a nawet własności półprzewodnikowe. **Głównym celem projektu jest zaprojektowanie nowych funkcjonalnych materiałów do potencjalnych zastosowań w organicznej elektronice, jak również określenie korelacji między ich budową strukturalną a właściwościami optycznymi, termicznymi i elektronicznymi.** Przedmiotem badań będą układy organiczne oraz hybrydy organiczno-nieorganiczne. Projekt będzie podzielony na dwie sekcje, (i) w badanych układach będziemy dobierać dwa centra: protonodonorowe (organiczne kwasy, HCl, HBr, HBF<sub>4</sub>, HClO<sub>4</sub> i inne) oraz protonoakceptorowe (metylowe pochodne pirazyny i bipyridylu) oraz (ii) połączenia typu hybrydy organiczno-nieorganiczne o ogólnym wzorze: R<sub>a</sub>M<sub>b</sub>X<sub>(3b+a)</sub> (gdzie R- kation metylo-pochodnej pirazyny, M = Sb(III), Bi(III) i X = Cl, Br, I). Liczymy na to, że otrzymamy układy z asymetrycznym wiązaniem wodorowym X-H...Y lub/i z przeniesieniem ładunku (kompleksy donorowo akceptorowe) oraz hybrydy organiczno-nieorganiczne z dynamiką podsiéci kationowej.



Tworzenie się aglomeratów supramolekularnych z jednowymiarowym wiązaniem wodorowym w postaci „warstw/wstęg” wzdłuż jednego kierunku krystalograficznego wpływa na pojawienie się oddziaływań dalekiego zasięgu i w konsekwencji własności półprzewodnikowych i/lub antyferroelektrycznych. **Oczekujemy, że przynajmniej niektóre związki będą się charakteryzować pożądanymi właściwościami.** Jak dotąd nie daje się z góry przewidzieć struktury kompleksu w fazie stałej i trzeba stosować metodę prób i błędów.

**Charakterystyka fizykochemiczna wybranych materiałów będzie dotyczyć:** 1. Wyznaczania struktury krystalicznej w różnych temperaturach związanych z obecnością strukturalnych przemian fazowych. 2. Detekcji przemian fazowych metodami termicznymi jak DSC, TGA-DTA, oraz dylatometrycznymi. 3. Określenia siły i typu wiązań wodorowych przy użyciu metod spektroskopowych (IR i Raman). 4. Pomiarów elektrycznych: przewodnictwo stało- i zmiennoprądowe, zespolonej przenikalności elektrycznej, polaryzacji spontanicznej dla układów polarnych, pomiar podwójnej pętli histerezy dla układów antyferroelektrycznych. 5. Obliczeń przy użyciu modeli teoretycznych w zastosowaniu do ciała stałego.

Liczymy, że systematyczne badania w proponowanej grupie związków pozwolą rzucić więcej światła na przyczyny powstawania właściwości polarnych lub/i przewodnictwa protonowego w przemiennym polu elektrycznym. Wnioski wysunięte z badań w ramach projektu pozwolą nam zaproponować mechanizm, który łączyłby budowę mikroskopową kryształów z właściwościami optycznymi, termicznymi i elektrycznymi. Występując z wnioskiem o przyznanie funduszy na badania proponowane w projekcie kierowaliśmy się zarówno przesłankami naukowymi, związanymi z pracami nad nowymi materiałami funkcjonalnymi jak i aspektami aplikacyjnymi. Stworzony zespół naukowy w ramach tego projektu dysponuje odpowiednim zapleczem naukowo-badawczym oraz posiada duże doświadczenie niezbędne do osiągnięcia wartościowych wyników.