

Wieloskładnikowe materiały organiczne cieszą się ogromnym zainteresowaniem w projektowaniu materiałów optycznych ze względu na szereg potencjalnych zastosowań w optoelektronice a także przy przesyłaniu i przechowywaniu danych. Organiczne układy oferują znacznie wyższe wydajności i szybszą odpowiedź na działanie bodźca zewnętrznego niż obecnie używane materiały nieorganiczne. Największym problemem przy projektowaniu materiałów funkcjonalnych jest otrzymanie fazy krystalicznej o odpowiedniej symetrii. Przykładowo zjawisko generowania drugiej harmonicznej (SHG), które sprowadza się do podwojenia częstości fali padającej, obserwowane jest tylko dla materiałów o niecentrosymetrycznej strukturze. Ponadto, do uzyskania dużych wartości własności optycznych projektowany materiał musi być zbudowany z cząsteczek charakteryzujących się dużą (hiper)polaryzowalnością, czyli zdolnością do tworzenia dipoli elektrycznych w materiale pod wpływem zewnętrznego pola elektrycznego. Niestety bardzo często cząsteczki z dużą (hiper)polaryzowalnością orientują się antyrównolegle w strukturze krystalicznej, co prowadzi do wytworzenia środka symetrii i zerowania się niektórych efektów optycznych. Rozwiązaniem tego problemu jest projektowanie materiałów składających się z kilku komponentów, których wzajemna orientacja w strukturze krystalicznej maksymalizuje pożądane efekty i zapobiega antyrównoległemu ustawieniu się dipoli.

Głównym celem niniejszego projektu badawczego jest zaprojektowanie i otrzymanie nowych wieloskładnikowych materiałów optycznych opartych o związki należące do grupy sulfonamidów oraz kwasów sulfonowych. Cząsteczki zawierające pochodną grupy sulfonylowej zostały wybrane jako wartościowe komponenty nowych materiałów optycznych ze względu na łatwą dostępność a także dużą ilość informacji przydatnych przy projektowaniu materiałów. Znane są również cząsteczki sulfonamidów oraz kwasów sulfonowych o dużych wartościach (hiper)polaryzowalności. Do racjonalnego projektowania materiałów wykorzystane zostaną metody krystalografii kwantowej, które opierają się na badaniu faz krystalicznych poprzez połączenie informacji otrzymanych z analizy strukturalnej oraz mechaniki kwantowej. Wykonane badania pozwolą na jakościową i ilościową ocenę wiązań międzycząsteczkowych obserwowanych w kryształach. Zrozumienie ich wpływu na wzajemną orientację cząsteczek w przestrzeni umożliwi otrzymanie nowych faz krystalicznych o większych efektach niż dotychczasowo wykorzystywane materiały. W trakcie trwania projektu przebadane zostaną własności optyczne liniowe (współczynniki załamania światła, dwójłomność) jak i nieliniowe (wydajność generowania drugiej harmonicznej) otrzymanych materiałów. Wielkość obserwowanych efektów zostanie skorelowana bezpośrednio ze strukturą krystaliczną materiałów.

Realizacja zaprezentowanego projektu będzie składała się z następujących etapów: projektowanie i otrzymanie nowych materiałów, wyznaczenie struktury krystalicznej przygotowanych faz krystalicznych, a następnie charakterystyka właściwości optycznych i analiza oddziaływań międzycząsteczkowych w oparciu o metody kwantowej krystalografii wybranych materiałów. Końcowy etap projektu będzie opierał się na podsumowaniu zebranych informacji dotyczących istniejących wiązań niekowalencyjnych oraz ich wpływu na organizację cząsteczek w strukturze krystalicznej i wyznaczeniu zależności struktura-własność fizyczna.

Otrzymane w trakcie projektu wyniki poszerzą wiedzę dotyczącą racjonalnego projektowania materiałów funkcjonalnych. Wyciągnięte wnioski na temat korelacji struktura-własność fizyczna będą mieć kluczowe znaczenie przy projektowaniu nowych materiałów o łatwo modyfikowalnych własnościach.