

Urządzenia fotoniczne odgrywają niezwykle ważną rolę w rozwoju nowoczesnych technologii. Systemy modulacji światła, diody OLED, urządzenia fotorefrakcyjne, optycznie przełączalne maszyny molekularne, soczewki fotochromowe, sondy i czujniki biochemiczne to tylko kilka przykładów zastosowań materiałów optycznych. Postępy w dziedzinie optoelektroniki wymagają prostych, stabilnych i preferencyjnie tanich rozwiązań. Wydajne materiały optyczne można zaprojektować stosując podejście krystalografii kwantowej. Metoda ta stosuje narzędzia obliczeniowe chemii kwantowej w celu zrozumienia, scharakteryzowania i inżynierii materiałów krystalicznych.

W tym projekcie skoncentrujemy się na nowych materiałach krystalicznych wykazujących dużą dwójłomność, wysokie współczynniki załamania światła, wysoką wydajność generowania drugiej harmonicznej (SHG, podwojenie częstotliwości wiązki padającej) oraz wykazujących efekty chromowe (indukowaną zmianę koloru materiału). Wzmocnione właściwości optyczne kryształów można uzyskać przez połączenie dwóch różnych bloków budulcowych w jedną strukturę krystaliczną (kokrystalizacja). Pierwszy komponent (target) posiada odpowiednie właściwości elektronowe (np. dużą hiperpolaryzowalność), a drugi (ko-former) zapewnia odpowiednią orientację cząsteczek w kryształach, co daje wzmocnienie właściwości optycznych.

Weryfikacja struktury krystalicznej otrzymanych faz zostanie przeprowadzona metodą dyfrakcji promieni rentgenowskich na monokryształach. Eksperymentalne i teoretyczne badania gęstości elektronowej przyczynią się do zrozumienia rozmieszczenia cząsteczek w stanie stałym. Właściwości optyczne będą wyliczone przy użyciu metod kwantowo-mechanicznych (Q-LFT) i zmierzone eksperymentalnie. Stabilność kryształów będzie badana przy użyciu metod PXRD, DSC i TG. Zaproponowany projekt badawczy doprowadzi do powstania nowych materiałów o z góry zaprogramowanych efektach optycznych. Proponowana metodologia badań przyczyni się do zrozumienia zależności struktura-właściwość w wieloskładnikowych materiałach krystalicznych.