

Tematem mojej pracy naukowej jest zaprojektowanie i otrzymanie nowych wieloskładnikowych materiałów optycznych opartych o związki należące do grupy sulfonamidów korzystając z metod krystalografii kwantowej.

Materiały optyczne cieszą się ogromnym zainteresowaniem ze względu na szereg potencjalnych zastosowań w optoelektronice oraz telekomunikacji. Obecnie otrzymanie nowych faz krystalicznych o pożądanym własnościach optycznych stanowi wyzwanie dla naukowców zajmujących się inżynierią krystaliczną. Największym problemem jest wytworzenie fazy krystalicznej o odpowiedniej symetrii. Przykładowo obecność środka inwersji w strukturze krystalicznej powoduje zerowanie się nieliniowych efektów drugiego rzędu dla takiego materiału. Ponadto, w celu uzyskania dużych wartości własności optycznych projektowany materiał musi zawierać cząsteczki o znacznym momencie dipolowym. Niestety bardzo często duży moment dipolowy wymusza anty-równoległą orientację cząsteczek w strukturze krystalicznej nierzadko prowadząc do wytworzenia środka symetrii. Rozwiązaniem pozwalającym na jednoczesną kontrolę symetrii i własności bloków budulcowych materiałów jest zaprojektowanie faz krystalicznych zawierających kilka komponentów. Jedna z cząsteczek posiada duży moment dipolowy a druga gwarantuje niecentrosymetryczne upakowanie cząsteczek w sieci krystalicznej.

W swojej pracy jako startowe komponenty nowych wieloskładnikowych materiałów optycznych wykorzystuję sulfonamidy. Cząsteczki te zostały wybrane jako pożyteczne komponenty ze względu na łatwą dostępność a także dużą ilość informacji krystalograficznych przydatnych przy projektowaniu materiałów. Ponadto znane są przykłady sulfonamidów o dużym momencie dipolowym. Do zaprojektowania nowego materiału o pożądanym własnościach optycznych korzystam z metod krystalografii kwantowej. Przeprowadzane analizy pozwalają na jakościową i ilościową ocenę oddziaływań międzycząsteczkowych obserwowanych w kryształach. Dzięki zrozumieniu ich wpływu na upakowanie cząsteczek w trójwymiarowej strukturze oraz korzystając z transferowalności motywów wiązań pomiędzy strukturami krystalicznymi możliwe jest otrzymanie nowych materiałów o lepszych własnościach optycznych niż znane do tej pory.

Realizacja prezentowanego tematu składa się z kilku etapów: 1) projektowanie i otrzymanie materiałów korzystając ze znanych technik ko-krystalizacji, 2) wyznaczenie struktur krystalicznych uzyskanych materiałów, 3) otrzymanie rozkładów gęstości elektronowej za pomocą pomiarów dyfrakcyjnych promieni rentgenowskich oraz obliczeń teoretycznych i analiza topologiczna uzyskanych wyników, 4) pomiary eksperymentalne i badania teoretyczne liniowych (współczynniki załamania światła, dwójłomność liniowa) oraz nieliniowych (wydajność generowania drugiej harmonicznej) własności optycznych otrzymanych faz krystalicznych. Końcowym etapem jest zebranie wyników na temat występujących oddziaływań międzycząsteczkowych i wielkości właściwości optycznych i ich anizotropii w celu wyznaczenia zależności struktura-własność.

Badania przeprowadzone w trakcie projektu przyczynią się do poszerzenia wiedzy na temat charakterystycznych wiązań międzycząsteczkowych obecnych w materiałach zawierających sulfonamidy, efektywnego projektowania materiałów funkcjonalnych, a informacje uzyskane na temat korelacji struktury krystalicznej z własnościami fizycznymi będą kluczowe dla projektowania nowych materiałów funkcjonalnych.