

Wpływ dynamiki alicyklicznych amin na właściwości fizykochemiczne ich hybryd organiczno–nieorganicznych

mgr Marcin Moskwa

Promotor: prof. dr hab. inż. Grażyna Bator

Promotor pomocniczy: dr Magdalena Rok

Celem przedstawionej dysertacji była synteza, hodowla monokryształów i charakteryzacja fizykochemiczna kryształów z grupy hybryd organiczno-nieorganicznych zawierających w swej strukturze kationy organiczne, wykazujące dynamikę konformacyjną. Do realizacji pracy użyto kationy organicznych alicyklicznych amin o pierścieniu siedmio-, sześć- i pięcioczłonowym. Takie kationy organiczne wykazują dynamiczną równowagę między dwoma lub więcej konformacjami. Ta dynamiczna równowaga konformacyjna może być przyczyną ciekawych właściwości elektrycznych i optycznych.

Osiągnięcie powyższych celów wymagało opracowania syntezy oraz hodowli monokryształów. Następnie otrzymane kryształy hybryd organiczno-nieorganicznych scharakteryzowano metodami rentgenowskimi (X-ray) w celu wyznaczenia struktur w ciele stałym. Ponadto zastosowanie komplementarnych metod, czułych na dynamikę cząsteczek lub fragmentów tych cząsteczek, pozwoliło zaobserwować makroskopowe efekty związane ze zmianą konformacji kationów wraz ze zmianą temperatury (spektroskopia dielektryczna, ^1H NMR w ciele stałym, spektroskopia w podczerwieni (IR) i Ramana oraz pomiar przewodnictwa elektrycznego zmiennie- (*ac*) i stałoprądowego (*dc*)). Wykorzystano również metody służące do detekcji przemian fazowych w ciele stałym (TGA/DTA oraz DSC) oraz metody optyczne, takie jak spektroskopia UV-Vis i generacja drugiej harmonicznej (SHG).

W trakcie realizacji doktoratu zsyntezowano 16 hybryd organiczno-nieorganicznych z czego 11 otrzymano i scharakteryzowano po raz pierwszy w literaturze. W otrzymanej grupie hybryd pięć związków wykazuje niestabilność strukturalną. Na podstawie przeprowadzonych badań zaproponowano mechanizmy molekularno-strukturalne przemian fazowych tych hybryd. Niektóre z przebadanych kryształów wykazują właściwości półprzewodnikowe. Dodatkowo siedem (7) związków ma właściwości nieliniowe optyczne, co udowodniono poprzez pomiar generacji drugiej harmonicznej (SHG). Połączenie właściwości półprzewodnikowych oraz optycznych stwarza szansę na wykorzystanie opisanych hybryd np. w fotowoltaice czy optoelektronice.