

Modułowe projektowanie układów złożonych kokryształów do zastosowań w optoelektronice, sterowane metodami krystalografii kwantowej (MolQCMat)

Kryształy posiadają wiele fascynujących **właściwości fizycznych**, ale ich ekspresja zależy w dużej mierze od starannego doboru bloków budulcowych i ich rozmieszczenia w kryształach, czyli **symetrii**. Rozumiejąc ten fundamentalny aspekt, możemy **obserwować unikalne efekty w kryształach**. Na przykład, **materiały polarne** mogą wykazywać zjawiska optyczne, takie jak **generacja drugiej harmonicznej (SHG)**, **efekt Pockelsa**, a także właściwości **piezoelektryczne**, **piroelektryczne** i **ferroiczne**. Jednak sama symetria nie może determinować wielkości efektów fizycznych. Co ciekawe, cząsteczki o znacznych momentach dipolowych mogą agregować się, tworząc **struktury centrosymetryczne**, **niwelując tym samym efekty związane z polarnością materiału**. Podobnie, agregacja cząsteczek może wpływać na **fluorescencję** i właściwości **absorpcyjne**. Na przykład, wiele barwników fluorescencyjnych wykazuje intensywną emisję w roztworze, natomiast w stanie stałym z powodu niekorzystnej orientacji bloków budulcowych kryształu obserwujemy wygaszanie fluorescencji. Ostatnie lata przyniosły znaczący postęp w **projektowaniu materiałów funkcjonalnych**, głównie dzięki rozwojowi narzędzi **krystalografii kwantowej**, które pozwalają nam przewidywać i kontrolować oddziaływania między cząsteczkami. W tym projekcie proponujemy innowacyjne podejście wykorzystujące zdefiniowaną od nowa metodę **odwrotnej inżynierii krystalicznej** (*reverse crystal engineering*), wspieraną przez krystalografię kwantową, w celu poprawy właściwości materiałów. Nasza metoda uwzględnia podział struktur krystalicznych na podsekcje lub moduły, które można modyfikować, usuwać lub wymieniać. Kluczowe znaczenie dla projektowania inteligentnych urządzeń ma zrozumienie, w jaki sposób **moduły** te oddziałują ze sobą. Każdy moduł może być źródłem odrębnej "właściwości" (fluoro-, chromo- lub NLO-fory, chromogeny, cząsteczki chiralne), którą można wzmocnić/wykorzystać, wymuszając odpowiednie rozmieszczenie bloków budulcowych w strukturze krystalicznej. Moduły mogą obejmować zarówno składniki molekularne, jak i większe agregaty, istotne dla określonych właściwości, połączone poprzez kierunkowe oddziaływania. Wykorzystując **podejście modułowe**, zamierzamy zaprojektować nowe dwu- i trójskładnikowe kokryształy odpowiednie do zastosowań optoelektronicznych, w tym jako sensory, modulatory i pamięci optyczne. Materiały organiczne odgrywają istotną rolę w różnych nowoczesnych technologiach, takich jak OLED, OLET organicznych fotodetektorach, w laserowej diagnostyce medycznej i telekomunikacji. Wciąż jednak istnieje potrzeba poprawy ich stabilności w celu zapewnienia długiej żywotności urządzeń oraz zwiększenia ich wydajności. **Nasz projekt skupi się na dwóch rodzajach materiałów o dziedzicznych właściwościach**, które można modulować w strukturze krystalicznej. W pierwszej kolejności będziemy otrzymywać NLO-fory, cząsteczki o dużej hiperpolaryzowalności, w połączeniu z komponentami promującymi tworzenie niecentrosymetrycznych struktur krystalicznych. Ta kombinacja pozwala nam wzmocnić liniowe i nieliniowe właściwości optyczne, w tym **dwójłomność liniową i SHG**. Następnie będziemy badać chromogeny lub fluorofory w połączeniu z koformerami, które indukują **efekty chromowe** (umożliwiając selektywne zmiany koloru materiału na skutek bodźców zewnętrznych) lub zwiększoną **wydajność kwantową fluorescencji**. Aby osiągnąć sukces w syntezie kokryształów funkcjonalnych nasze eksperymenty będą realizowane w oparciu o różne techniki eksperymentalne i metody obliczeniowe. Szczególny nacisk położymy na wykorzystanie najnowszych osiągnięć w dziedzinie inżynierii krystalicznej takich jak **nowe techniki współkrystalizacji i projektowanie kryształów in silico**. To holistyczne podejście zapewni wgląd we właściwości powstałych materiałów i umożliwi określenie korelacji ze strukturą krystaliczną. Podejście modułowe ma na celu zwiększenie właściwości **elektrooptycznych** badanych kryształów, przesuwając granice możliwych do zaobserwowania efektów fizycznych i otwierając nowe możliwości zastosowań praktycznych.

