

Badanie dynamiki układów oddziaływań w wybranych strukturach kokrystalicznych

POPULARNONAUKOWE STRESZCZENIE PROJEKTU

W powszechnej opinii kryształy są stabilnymi ciałami stałymi, będącymi jedną z najtrwalszych form materii na świecie. Wielość symetrycznych form kryształów jak również różnorodność ich kolorów i rodzajów od zawsze zachwycała ludzi, przez co uważali je za drogie. Dynamiczny rozwój nauki oraz odkrycie metod dyfrakcji rentgenowskiej na początku dwudziestego wieku umożliwiły wizualizację wewnętrznej, periodycznej budowy kryształów. Od tego czasu naukowe znaczenie materiałów krystalicznych nieustannie rosło. W połowie lat pięćdziesiątych R. Pepinsky po raz pierwszy użył terminu „inżynieria krystaliczna”. Pepinsky zasugerował możliwość kontroli symetrii otrzymywanych kryształów poprzez odpowiedni dobór krystalizowanych substancji. Stwierdzenie to wywołało natychmiastowe pytanie: **Jak dobrać odczynniki chemiczne by otrzymać kryształ o oczekiwanej symetrii?** To z pozoru proste pytanie doprowadziło do powstania zupełnie nowego podejścia do badania kryształów.

Wróćmy jednak do natury omawianych kryształów. Zgodnie z ich własnościami dyfrakcyjnymi, kryształy są znane jako periodyczne i uporządkowane ciała stałe. Przedstawione cechy mogą prowadzić do wniosku o stabilnej, a przez to statycznej naturze kryształów. Nic bardziej mylnego! W rzeczywistości wszystkie atomy i cząsteczki wewnątrz każdego kryształu żywiłowo oscylują. Ich ruch nie jest jednak losowy i chaotyczny. Wszystkie oscylacje cząsteczek są uwarunkowane poprzez symetrię oddziaływań całej struktury krystalicznej. Uruchamiając nieco wyobraźnię, możemy teraz wyobrazić sobie ruchy wewnątrz kryształu jako pewnego rodzaju skomplikowany taniec. Każdy rodzaj molekuł ma w nim swoje charakterystyczne kroki taneczne (oddziaływania), które silnie zależą od otoczenia cząsteczek. Ich rozłożenie przestrzenne – samo-organizacja kryształu – jest wynikiem ustalonej sekwencji ruchów wszystkich molekuł w strukturze kryształu – czyli ich choreografii. Właśnie w tym momencie pojawiają się dwa pytania sformułowane w zakresie proponowanego projektu: **Jak nauczyć molekuły tańca ze sobą?** oraz, **Jak ustalić i zaplanować ich choreografię wewnątrz kryształu przy określonych warunkach zewnętrznych?** Jeśli się nad tym zastanowić, pytania te dokładnie parafrazują sens pytania postawionego w pierwszym akapicie.

Odpowiedź na oba zadane problemy, po części leży w zrozumieniu wcześniej nadmienionych „tanecznych kroków cząsteczek”. Jednakże, jest to wiedza nie wystarczająca. Nie można zrozumieć choreografii jedynie poprzez naukę kroków. Osiąga się to dopiero poprzez wytrwałe, dynamiczne ćwiczenie kroków w rytmie muzyki i, co najważniejsze, z innymi ludźmi na parkiecie. W ramach projektu proponuję takie ćwiczenie poprzez dwutorowe podejście do zagadnienia. Podejście teoretyczne, będzie oparte o metodę kwantowo-chemiczną – dynamikę molekularną Born-Oppenheimer – której zadaniem będzie symulacja drgań molekuł wewnątrz kryształu. W projekcie symulacje będą wykonywane dla szczególnej odmiany materiałów wieloskładnikowych – kokryształów. Układy kokrystaliczne składają się z co najmniej dwóch różnych cząsteczek i/lub jonów. Ich wielorakie zastosowania w produkcji leków jak również wielofunkcyjnych materiałów, wynika z możliwości łączenia w kokryształach własności chemicznych i fizycznych kokrystalizowanych składników. Proponowane symulacje, uzupełnione o analizę oddziaływań opartą o obliczenia DFT, pozwolą pogłębić wiedzę dotyczącą samo-organizacji układów kokrystalicznych. Dodatkowo, w drugiej, eksperymentalnej części projektu, zostaną zaprojektowane i otrzymane nowe polarne i chiralne kokryształy. Ich układy oddziaływań będą badane przy pomocy metod dyfrakcji rentgenowskiej oraz spektroskopii.

Podsumowując, zaproponowany projekt jest dedykowany poszerzeniu wiedzy na temat dynamiki układów oddziaływań w kokryształach. Co więcej, planowane eksperymenty, pozwolą na otrzymanie nowych materiałów kokrystalicznych o potencjalnych zastosowaniach w zaawansowanej optoelektronice.