

## **Badania spektroskopowe nowych materiałów wielofunkcyjnych utworzonych przez chiralne pochodne tetratiafulwalenu oraz jony magnetyczne**

**Miejsce realizacji:** Instytut Fizyki Molekularnej PAN,  
Zakład Kryształów Molekularnych  
<http://www.ifmpan.poznan.pl/scientificd.php?div=12>

### **Kontakt:**

*Opiekun: dr hab. Andrzej Łapiński*  
tel. (61) 86-95-201, e-mail: [lapinski@ifmpan.poznan.pl](mailto:lapinski@ifmpan.poznan.pl)

### **Wprowadzenie:**

W wielu ośrodkach na świecie prowadzi się szeroko zakrojone badania nad otrzymaniem nowych, obiecujących materiałów wielofunkcyjnych, które miałyby potencjalne zastosowanie w elektronice molekularnej. Wśród tego typu materiałów hybrydowych intensywnie są badane sole utworzone przez chiralne pochodne tetratiafulwalenu (TTF) oraz różne nieorganiczne akceptory elektronów posiadające stały moment magnetyczny. Wykazują one interesujące właściwości przewodzące, magnetyczne oraz optyczne.

Zagadnienie współistnienia uporządkowania magnetycznego oraz przewodnictwa elektrycznego jest bardzo rzadkie i budzi duże zainteresowanie wśród eksperymentatorów oraz teoretyków z zakresu fizyki ciała stałego. W układach, które będą badane, występują elektrony zdelokalizowane w warstwach oraz elektrony d zlokalizowane na anionach. Najważniejszą konsekwencją z tym związaną to możliwość oddziaływania elektronów  $\pi$  z warstw przewodzących z elektronami d (oddziaływanie  $\pi$ -d). Tego typu oddziaływania mogą prowadzić do magnetycznie uporządkowanych struktur przewodzących. Wśród badaczy zajmujących się materiałami wielofunkcyjnymi dla optoelektroniki, szczególnie interesująca jest koncepcja zastosowania takich donorów, które posiadałyby centra chiralne, poprzez które układ może w pożądanym przez nas sposób oddziaływać ze światłem spolaryzowanym.

W tym miejscu warto podkreślić fakt, że właściwości fizyczne materiałów wielofunkcyjnych nie są prostą sumą właściwości przewodzących, magnetycznych oraz chiralnych poszczególnych elementów składowych układu. Mamy w tym przypadku synergiczny układ, który może prowadzić do zaobserwowania niespodziewanych, interesujących zjawisk fizycznych. Dla potwierdzenia tych słów, można przytoczyć przykład odkrycia w ostatnich latach nowego efektu zwanego elektryczno magneto-kalorycznym efektem chiralnej anizotropii (efekt występowania synergistycznego związku przewodności i chiralności).

### **Cel naukowy pracy i proponowane metody badawcze:**

Głównym celem naukowym będzie charakteryzacja metodami spektroskopii optycznej nowych chiralnych molekuł organicznych, pochodnych TTF, mających zastosowanie jako donory w materiałach wielofunkcyjnych łączących własności przewodzące, chiralne oraz magnetyczne oraz zbadanie właściwości fizycznych nowych przewodników organicznych utworzonych przez chiralne donory oraz jony magnetyczne za pomocą metod eksperymentalnych i teoretycznych fizyki ciała stałego.

W celu realizacji powyższych zadań planuje się przeprowadzenie badań zsyntetyzowanych układów za pomocą metod spektroskopowych w szerokim zakresie spektralnym od dalekiej podczerwieni do ultrafioletu, techniki rozpraszania Ramana oraz spektroskopii VCD. Na potrzeby interpretacji danych doświadczalnych przeprowadzi się stosowne obliczenia teoretyczne DFT (ang. *density functional theory*) oraz TD-DFT (ang. *time-dependent density functional theory*). Ponadto do interpretacji otrzymanych wyników otrzymanych z badań spektroskopowych planuje się wykonanie pomiarów strukturalnych oraz pomiarów przewodnictwa elektrycznego. Za pomocą metod spektroskopii optycznej będzie możliwe dostarczenie wielu cennych informacji na temat własności chiralnych, natury przejść fazowych, struktury elektronowej i wibracyjnej oraz takich oddziaływań jak oddziaływanie elektron – elektron, elektron – fonon.