

## **Uporządkowanie orientacyjne i dynamika molekuł w nematycznych strukturach polarnych. Właściwości elektro-optyczne i elastyczne.**

Termin ciekłe kryształy (LCs) odnosi się do stanu skupienia materii, pośredniego między izotropową cieczą a stanem stałym, których właściwości znajdują się pomiędzy. Stan ciekłokrystaliczny jest wyjątkowy i istnieje bogata różnorodność faz, z których dany materiał może wykazywać jedną lub kilka. Najmniej uporządkowaną z takich faz jest faza nematyczna, w której składniki wykazują uporządkowanie orientacyjne dalekiego zasięgu, ale brak porządku translacyjnego dalekiego zasięgu. Prosta jednoosiowa faza nematyczna ( $N$ ) utworzona przez niechiralne cząsteczki jest najszerzej zbadaną i technologicznie stosowaną. Z drugiej strony wiadomo, że chiralne cząsteczki tworzą skręconą (chiralną) fazę nematyczną ( $N^*$ ) i trzy tak zwane „niebieskie” fazy charakteryzujące się siatką defektów liniowych. Dopiero w ostatniej dekadzie do tej listy doszły nowe fazy nematyczne. W 2011 roku dla niechiralnych elastycznych cząsteczek dimerowych (podobne do banana) odkryto przewidywaną lata wcześniej modulowaną przestrzennie fazę nematyczną twist-bend ( $N_{TB}$ ). Długo zasięgowy, helikonikalny porządek orientacyjny pojawia się tutaj w skali 10 nm i stanowi unikalny w naturze przykład spontanicznego łamania symetrii zwierciadlanej. Okres helikoidy jest w zakresie nanometrowym, a zatem spodziewany czas odpowiedzi elektrooptycznej jest bardzo krótki i wynosi około 1  $\mu$ s a więc wielokrotnie krótszy w porównaniu z czasem odpowiedzi dla konwencjonalnych materiałów nematycznych. Następnie odkryty został nematyk splay-bend ( $N_{SB}$ ) w koloidach bananopodobnych oraz w polu elektrycznym przyłożonym do fazy  $N_{TB}$ . Fazę tą można scharakteryzować jako spolaryzowaną liniowo periodyczną falę naprzemiennych deformacji typu splay i bend uśrednionego porządku orientacyjnego. Ale w przeciwieństwie do  $N_{TB}$ , faza  $N_{SB}$  jest niechiralna i globalnie dwuosiowa. W ramach grantu OPUS 2018/31/B/ST3/03609 (data zakończenia: 2022-30-06) z powodzeniem zbadaliśmy te struktury, a najważniejsze wyniki wyjaśniające ich samoorganizację oraz właściwości elektro-optyczne zostały opublikowane w siedmiu artykułach. Największym osiągnięciem była obserwacja zmiany struktury fazy jako skutek działania efektów powierzchniowych oraz pola elektrycznego. Wywołane działaniem pola deformacje w fazie  $N_{TB}$  mogą są niezwykle użyteczne w zastosowaniach technologicznych, ponieważ są one podobne do efektu elektroklinowego obserwowanego w fazach smektycznych (PCCP 2019, 21, 22839). W ostatnich dwóch latach odkryto eksperymentalnie termotropowe polarne fazy nematyczne. Znaleziony został antyferroelektryczny nematyk splay ( $N_S$ ) i ferroelektryczny nematyk ( $N_F$ ) dla mezogenów w kształcie klina (gruszki) z dużym elektrycznym momentem dipolowym ( $\sim 11$  D dla RM734). Pomysł, że faza nematyczna może być ferroelektryczna, został po raz pierwszy zaproponowany przez Borna w 1916 roku. Chociaż pomysł wydawał się prosty to jego realizacja okazała się bardzo trudna, oddziaływania dipolowe są zbyt słabe a ruchy termiczne w cieczy zbyt silne by uzyskać dalekozasięgowe uporządkowanie momentów dipolowych. Do tej pory porządek polarny w fazach ciekłokrystalicznych jest efektem ubocznym oddziaływań sterycznych, a nie bezpośrednim wynikiem oddziaływań dipoli elektrycznych. Uporządkowanie polarne można uzyskać przez obniżenie symetrii fazy wynikające z chiralności molekularnej lub silnie hamowanej rotacji wymuszonej przez kształt molekuly, np. przez wygięcie rdzenia. Niedawno odkryta faza  $N_F$  i jej porządek polarny również może wynikać ze specyficznego kształtu molekuł. W materiałach tych obserwowane przełączanie ferroelektryczne jest rzędu 10-100  $\mu$ s, czyli znaczenie dłuższe niż obserwowane w fazach twist-bend. Niemniej jednak materiały tworzące fazy  $N_{TB}$ ,  $N_{SB}$ ,  $N_S$  oraz  $N_F$ , są materiałami polarnymi i mają duży potencjał aby zmienić oblicze przyszłych technologii (np. jako części superszybkich, energooszczędnych wyświetlaczy elastycznych, elastycznych pamięci, super-kondensatorów).

Głównym celem projektu będzie określenie zależności między strukturą molekularną a wynikającymi z niej właściwościami makroskopowymi materiału tworzące nematyczne fazy polarne. Aby to osiągnąć, konieczne jest określenie orientacji i porządku polarnego dla grupy materiałów o różnej strukturze cząsteczkowej jak również mieszanin substancji o różnych kształtach molekularnych. Proponowany plan badań obejmuje syntezę nowych materiałów podejrzanych o formowanie nematycznej fazy polarnej jak również próba wytworzenie mieszanin materiałów  $N_{TB}$  i  $N_F$ , w celu wytworzenia polarnej struktury z trójwymiarowym uporządkowaniem molekuł. Badania eksperymentalne będą połączone z modelowaniem DFT w warunkach periodycznych, które pozwolą przewidywać stabilność i właściwości faz polarnych. Wykorzystując mikroskopię polaryzacyjną, spektroskopię w podczerwieni i Ramana, pomiary anizotropii współczynnika załamania i anizotropii przenikalności dielektrycznej, wyznaczone zostaną temperatury przejść odpowiednich mezofaz oraz odpowiednie wartości anizotropii.