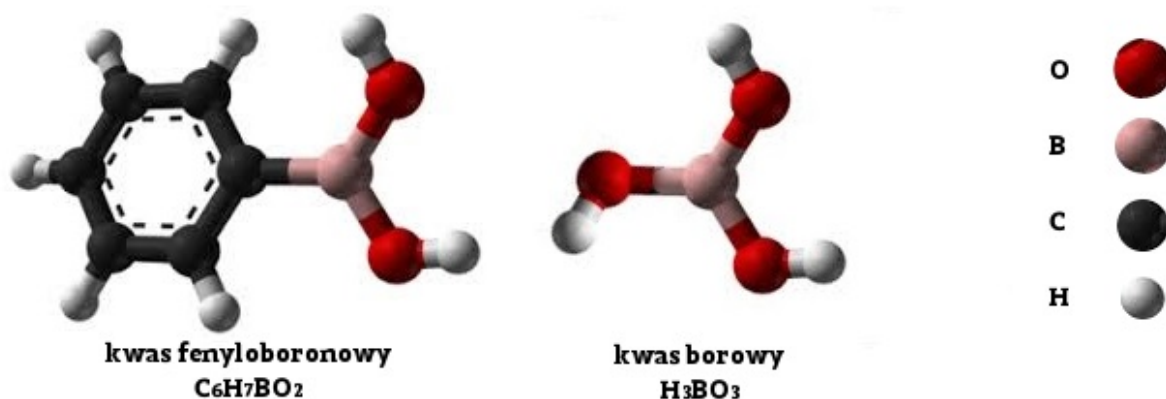


Projekt naukowy – synteza innowacyjnych związków oksoborowych do zastosowań w optoelektronice przez studentów PW

Celem projektu jest zsyntezowanie złożonych związków oksoborowych i zbadanie ich potencjalnych właściwości optycznych do zastosowań np. w laserach. Wykorzystując wybrane kwasy: borowy i fenyloboronowy (np. kwasu chlorofenyloborowego) i amin (np. etylenodiaminy), zamierzamy otrzymać związki nieorganiczne i hybrydowe trzema różnymi metodami: solwotermalnie, mechanochemicznie i tzw. mokrą syntezą z krystalizacją/odparowaniem. W dalszej perspektywie wykonamy różne pomiary, których wynikiem będzie określenie optymalnej metody syntezy ze względu na czystość, łatwość syntezy i koszt, a także charakteryzacja otrzymanych kryształów.



Synteza

W literaturze jest opisane całe spektrum związków oksoborowych o różnych właściwościach. Wynika to z możliwości tworzenia różnych, skomplikowanych podsiatek anionowych. Warunki otrzymywania, stechiometria i metoda umożliwiają spodziewać się otrzymania konkretnych związków. Nas interesują te, które mogą wykazywać zjawiska odpowiednie dla optyki liniowej, dlatego zaproponowaliśmy trzy następujące metody:

Solwotermalna/hydrotermalna

Rozpuszczanie substancji w rozpuszczalniku (w przypadku metody hydrotermalnej – w wodzie) w warunkach poniżej punktu krytycznego powoduje uzyskanie roztworu przesyconego, z którego, z wykorzystaniem metody krystalizacji, jesteśmy w stanie otrzymać podsieci anionowe o innej strukturze niż w przypadku krystalizacji z roztworu w normalnych warunkach

Mechanochemiczna

Metoda ta jest metodą, która nie wymaga użycia rozpuszczalnika. Reakcja zachodzi tylko i wyłącznie dzięki energii dostarczanej mechanicznie czyli np. poprzez ucieranie w moździerz agatowym lub młynku kulowym. Nie stosując rozpuszczalnika unikamy jego wpływu na przebieg reakcji. Mechanizmy reakcji zachodzących mechanochemiczne są często skomplikowane i znacząco różne od tych zachodzących w roztworach co pozwala na otrzymanie unikalnych związków i struktur.

Synteza w rozpuszczalniku

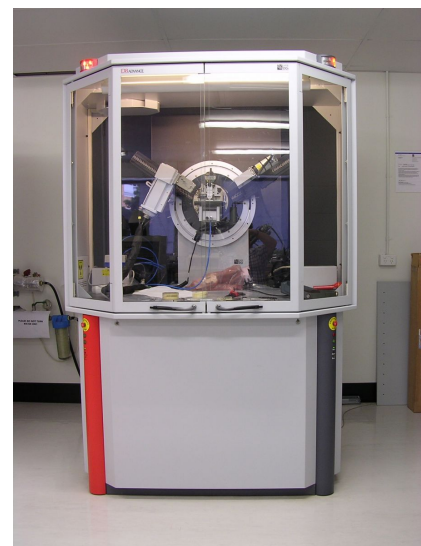
Według niektórych źródeł, korzystając z odpowiednich substratów, jesteśmy w stanie otrzymać optycznie czynne związki w wyniku reakcji kwas zasada bez konieczności dbania o specjalne warunki. Chcemy sprawdzić tę metodę ze względu na jej niski koszt.

Badania i pomiary

Po syntezie przeprowadzimy szereg badań w celu ustalenia/potwierdzenia struktury, m. in.:

Rentgenografia strukturalna (XRD)

Pomiary rentgenowskie będą podzielone na dwie części. Pierwsza obejmuje dyfrakcje proszkową dzięki której ustalimy czy reakcja zaszła i w jakim stopniu. Metoda ta jest szybka i tania, pozwala na ilościowe i jakościowe badania, jednak nie jest wystarczająca do ustalenia struktury. Żeby ustalić strukturę wykorzystamy dyfrakcję na monokryształach – stąd potrzeba wytworzenia monokryształów.



Przyrząd do pomiarów XRD

Spektroskopia magnetycznego rezonansu jądrowego (NMR) ciała stałego

Z wykorzystaniem spektroskopii jądrowego rezonansu magnetycznego możemy pośrednio określić strukturę (potwierdzić wyznaczoną strukturę z XRD), a także na podstawie analizy stałych sprzężeń ustalić energie oddziaływań międzycząsteczkowych. Będzie także możliwe wykonanie pomiarów z przystawką temperaturową, która pozwoli wyznaczyć strukturę w różnych temperaturach (co nie będzie możliwe na pomiarach XRD)

Spektroskopia IR, Ramana, UV-Vis

Przedstawione rodzaje spektroskopii pozwolą ustalić energie wiązań i oddziaływań międzycząsteczkowych występujących w kryształach, a co za tym idzie umożliwi nam potwierdzenie zaproponowanej przez nas struktury.

Skaningowa kalorymetria różnicowa (DSC)

To badanie pozwoli nam określić temperatury przejść fazowych naszych związków: np. temperatur topnienia lub rozkładu czy przemian fazowych w kryształach. Jest to istotne przy określaniu użyteczności przemysłowej otrzymanych przez nas związków.



Przyrząd do pomiarów DSC

Planowane osiągnięcia

Po udanej syntezie i opracowaniu wyników badań zamierzamy napisać artykuł nt. otrzymanych związków. Liczymy na dobry odbiór naszych wyników ze względu na ich prawdopodobną użyteczność m. in w laserach.