

Dzisiejszy przemysł elektryczny i komputerowy mocno pożąda nowych związków o ściśle określonych właściwościach (np. ferroelektrycznych lub nieliniowych (NLO)). Celem spełnienia tych oczekiwań szeroko bada się grupę kryształów organiczno-nieorganicznych. Część organiczna odpowiadać ma w takich kompleksach za oczekiwane właściwości (jak na przykład nieliniowość optyczna), natomiast nieorganiczna część tych związków zapewniać ma większą stabilność termiczną i mechaniczną. W mojej pracy, strategia ta została rozszerzona o nową grupę kryształów, w których obie części zbudowane są ze związków organicznych połączonych słabymi wiązaniami wodorowymi.

Bazując na danych literaturowych wybrałem jon guanidyny jako mający potencjalnie dobre właściwości NLO i możliwość tworzenia rodziny kompleksów opartych na wiązaniami wodorowych różnych typów. Związki oparte na kationie guanidyny wydają się być łatwe do uzyskania i o wiele tańsze od kompleksów chemicznych na bazie np. aminokwasów. Wobec powyższego cząsteczka guanidyny, jako silna zasada, stanowi pierwszą część kryształu, podczas gdy drugą częścią jest wybrany kwas organiczny lub nieorganiczny.

Po wstępnych badaniach przesiewowych wybrałem 4 kompleksy do bardziej szczegółowego opisanie:

1. Całkowicie nowy kompleks guanidyny i kwasu akrylowego krystalizujący w niecentrosymetrycznej grupie przestrzennej i posiadającej niskotemperaturową przemianę fazową.
2. Ferroelektryczny kryształ nadchloranu guanidyny wykazujący wysokotemperaturowe przemiany fazowe.
3. Kompleks guanidyny z kwasem maleinowym w stosunku 1:1 krystalizujący w niecentrosymetrycznej grupie przestrzennej i posiadający w strukturze krystalicznej interesujące silne symetryczne wewnątrzcząsteczkowe wiązanie wodorowe O...H...O.
4. Tworzący duże kryształy, umożliwiające pomiar widm oscylacyjnych w świetle spolaryzowanym, kompleks guanidyny z kwasem benzoowym posiadający ciekawą sieć różnorodnych wiązań wodorowych.

Wybrane kompleksy zostały szeroko przebadane dostępnymi technikami: spektroskopia w podczerwieni (w tym w funkcji temperatury i w świetle spolaryzowanym), spektroskopia ramanowską (również w funkcji temperatury), różnicową kalorymetrią skaningową, nieelastycznym rozpraszaniem neutronów, dyfrakcją rentgenowską i metodami teoretycznymi. Podjęto również próby otrzymania i zbadania deuterowanych analogów wspomnianych kompleksów.

W ramach każdego badanego kompleksu komplet otrzymanych widm został porównany z obliczeniami teoretycznymi. Wszystkie pasma występujące w widmach badanych kryształów zostały przypisane właściwym drganiom oraz skorelowane z danymi krystalograficznymi.