

Badanie własności warstw ciekłokrystalicznych wybranych cyjanobifenyli na powierzchniach nanostruktur węgla i azotku boru metodą symulacji komputerowych

Streszczenie

Materiały kompozytowe, oparte na ciekłych kryształach i materiałach 2D takich jak grafen czy heksagonalny borek azotu, są bardzo interesujące, ze względu na ich praktyczne zastosowanie w optoelektronice, mikroelektronice czy telekomunikacji. O ich właściwościach w dużej mierze decydują oddziaływania pomiędzy mezogenem a substratem, które wciąż nie są dostatecznie dobrze zbadane na poziomie molekularnym. W ramach pracy doktorskiej, metodą symulacji komputerowych zbadane zostały właściwości wielowarstwowych kompozytów zbudowanych z cyjano-bifenyli ulokowanego pomiędzy warstwami grafenowymi, heksagonalnym borkiem azotu lub powierzchnią wiązki jednościennych nanorurek węglowych. Przebadany został zarówno wpływ odległości między powierzchniami substratu jak i efekty związane z długością molekuł z rodziny cyjano-bifenyli.

Przeprowadzone symulacje wykazały tworzenie się wyraźnie odróżnialnych, molekularnych warstw mezogenu, których grubość i uporządkowanie zależy od odległości od substratu. Dodatkowo, w badanych układach z molekułami z szeregu cyjano-bifenyli wykazano występowanie zjawiska związanego z długością molekuł, tzw. zjawiska odd-even. Molekuły o nieparzystej ilości atomów węgla w ogonie węglowodorowym wykazują wyższe uporządkowanie niż molekuły o parzystej ilości. Zwiększanie odległości pomiędzy warstwami substratu powoduje osłabienie efektów odd-even, co sugeruje, że są one wywoływane przez oddziaływania w warstwie interfejsu mezogen-substrat. Dodatkowo nieparzyste mezogeny z szeregu mają wyższą energię aktywacji termicznej relaksacji reorientacyjnej. Z praktycznego punktu widzenia, istotny jest też wniosek, że polaryzacja substratu (heksagonalny azotek boru) znacząco wpływa na strukturę warstw mezogenu i przyspiesza reorientację molekuł.