

Analiza oddziaływań międzycząsteczkowych w strukturze 1,3-diacetylopirenu na podstawie dyfrakcji w zmiennych warunkach temperatury oraz ciśnienia.

Aleksandra Zwolenik

Kierownik pracy: **dr hab. Anna Makal, prof. ucz.**

Pochodne pirenu wykazują ciekawe właściwości elektroniczne i fotofizyczne, dlatego są intensywnie badane pod kątem szerokiego zakresu zastosowań. Dzięki obecności oddziaływań typu π -stacking są dobrym przykładem półprzewodników organicznych, a ich właściwości fluorescencyjne sprawiają, że są powszechnie stosowane jako barwniki, m.in. do badań strukturalnych białek, DNA lub błon lipidowych. Diacetylopochodne pirenu wykazują wiele odmian polimorficznych, co dodatkowo zwiększa możliwość ich zastosowań. Są to dobre układy modelowe co sprawia, że ich analiza może pomóc w zrozumieniu jak działają podobne, ale większe i bardziej skomplikowane układy.

Pierwotnie w literaturze znana była tylko jedna odmiana polimorficzna 1,3-diacetylopirenu [1]. Udało się otrzymać nową odmianę tego związku, wykonać eksperyment dyfrakcyjny oraz stworzyć model jego struktury krystalicznej z wykorzystaniem udokładnienia z użyciem asferycznych atomowych czynników rozpraszania. W tej pracy skupiono się na przeanalizowaniu oddziaływań międzycząsteczkowych występujących w strukturze 1,3-diacetylopirenu oraz sprawdzenie, jak ich zmiany wpływają na zmiany właściwości fizykochemicznych. W tym celu, wykonano serię eksperymentów dyfrakcyjnych w szerokim zakresie temperatur (od 90 do 390 K), a także umieszczono badany związek w kowadełku diamentowym typu Merilla-Basseta i wykonano eksperymenty pod zwiększonym ciśnieniem (od 0 do 1.7 GPa przyłożonego ciśnienia). Struktury eksperymentalne uzyskane pod zwiększonym ciśnieniem porównano z teoretycznymi strukturami (z zakresu od 0 do 4.08 GPa przyłożonego ciśnienia), które uzyskano z obliczeń periodycznych wykonanych w programie crystal17. Policzono również wartości energii oddziaływań za pomocą metod przybliżonych w programie CrystalExplorer. Wyniki kluczowych punktów pomiarowych zostały zwizualizowane m.in. za pomocą tzw. „Energy frameworks” [2], co pozwoliło na powiązanie najważniejszych oddziaływań z kierunkami maksymalnej i minimalnej ściśliwości. Na podstawie zebranych danych stwierdzono, które oddziaływania najbardziej stabilizują strukturę 1,3-diacetylopirenu oraz jak zmiany tych oddziaływań pod wpływem działania siły zewnętrznej wpływają na właściwości fizykochemiczne badanego związku, np. jego barwy czy widma luminescencji.

Literatura:

[1] S. K. Rajagopal, A. M. Philip, K. Nagarajan, M. Hariharan, Chem. Commun. 2014, 50(63) 8644-8647.

[2] C. F. Mackenzie, P.R. Spackman, D. Jayatilaka, M. A. Spackman, IUCrJ, 2017, 4(5), 575-587.