

## Struktura i właściwości nowych kokryształów TCNB z pochodnymi pirenu

Liliana Siewierska

Kierownik: **dr hab. Anna Makal, prof. UW**

Opiekun: **dr Joanna Krzeszczakowska**

Diacetylopiren jest pochodną pirenu i posiada właściwości słabo luminescencyjne. Badania literaturowe wskazują, że wydajne luminescencyjnie materiały można otrzymać poprzez kokryształację z tetracyjanobenzenem <sup>1</sup>. Celem pracy magisterskiej było otrzymanie nowych luminescencyjnych kokryształów trzech izomerów diacetylopirenu – 1,3-diacetylopirenu (oAP), 1,6-diacetylopirenu (pAP) oraz 1,8-diacetylopirenu (bAP) z tetracyjanobenzenem (TCNB), określenie względnej stabilności kokryształów oraz zbadanie wpływ struktury i siły oddziaływań w sieci krystalicznej na ich właściwości luminescencyjne.

Podczas sesji plakatowej, zaprezentowane zostaną badania struktur krystalicznych trzech różnych kokryształów 1,8-diacetylopirenu z tetracyjanobenzenem, różniących się stosunkiem substratów (1:1, 1:2, 2:3). Badania te zostały wykonane metodą monokrystalicznej dyfrakcji rentgenowskiej. Przedstawione struktury udokładniono w programie SHELXS <sup>2</sup> (nakładka graficzna Olex2 <sup>3</sup>) oraz zwizualizowano w programie Mercury <sup>4</sup>, wraz z wizualizacją najważniejszych oddziaływań w każdej z nich, oraz wartościami energii oddziaływań, oszacowanych w programie CrystalExplorer <sup>5</sup>. Dla nowo otrzymanych materiałów określono również temperaturę topnienia. Ponadto, przedstawiono również wyniki spektroskopii UV-Vis dla każdego z otrzymanych kokryształów.

Widma emisyjne przebadanych związków były do siebie bardzo podobne, co potwierdza właściwości luminescencyjne otrzymanych kokryształów. We wszystkich strukturach, cząsteczki w sieci krystalicznej układają się w równoległe stosy, w każdej strukturze występuje również oddziaływanie typu  $\pi$ -stacking. Najbardziej stabilny materiał to kokryształ, w którym TCNB i bAP występują w stosunku 1:1 - dominujący typ oddziaływań w tym kokryształ to  $\pi$ -stacking.

### Literatura:

- [1] Ye, H.; Liu, L.; Liu, S.; Casanova, D.; Ye, X.; Tao, X.; Zhang, Q., Xiong, Q., *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2018, 57, 7, 1982-32.
- [2] Sheldrick, G.M, *Acta Crystallogr. A*, 2008, 64(1), 112-122
- [3] Dolomanov, O.V.; Bourhis, L.J.; Gildea, R.J.; Howard, J.A.K.; Puschmann, H., *J. Appl. Cryst.*, 2009, 42, 339-341
- [4] C. F. Macrae, I. Sovago, S. J. Cottrell, P. T. A. Galek, P. McCabe, E. Pidcock, M. Platings, G. P. Shields, J. S. Stevens, M. Towler, P. A. Wood, *J. Appl. Cryst.*, 2020, 53, 226-235
- [5] Spackman, P. R., Turner, M. J., McKinnon, J. J., Wolff, S. K., Grimwood, D. J., Jayatilaka, D., Spackman, M. A. *J. Appl. Cryst.*, 2021, 54, 3, 1006–1011

