

## Korelacja struktury i właściwości spektroskopowych płasko-kwadratowych dikarbonylowych kompleksów rodu(I)

Kacper Paszczyk

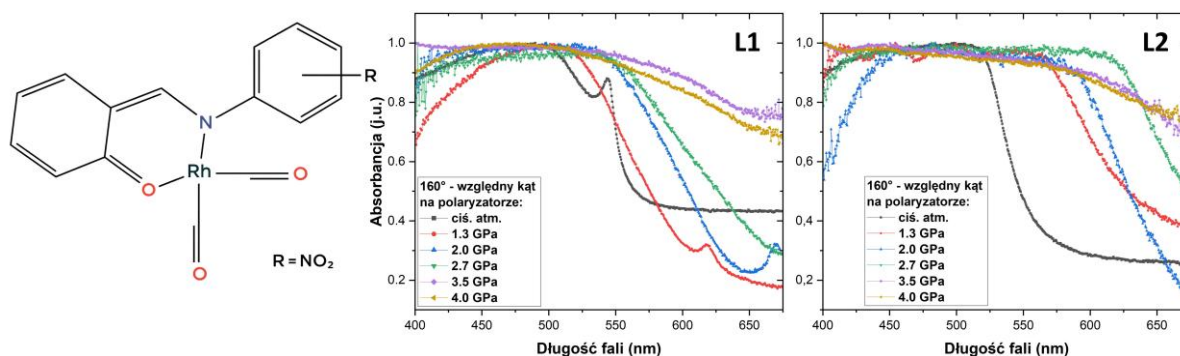
Kierownik: dr hab. Katarzyna Jarzemska prof. ucz.

Kompleksy metali przejściowych mogą wykazywać interesujące właściwości fotofizyczne, które w stanie stałym są często silnie zależne od oddziaływań międzycząsteczkowych, w tym oddziaływań metalofilowych [1,2]. Celem projektu było zbadanie dwóch nowych dikarbonylowych kompleksów rodu(I) z ligandem typu zasady Schiffa zawierającym grupę nitrową w pozycji para (L1) oraz meta (L2) (wzory strukturalne badanych związków przedstawiono po lewej stronie grafiki).

Związek L1 krystalizuje w grupie przestrzennej P-1. a obniżenie temperatury nie powoduje jakościowych zmian struktury. Z kolei L2 w temperaturze pokojowej krystalizuje w grupie P2<sub>1</sub>/n, tworząc stosy, natomiast w 240 K obserwuje się obniżenie symetrii do P-1 oraz zróżnicowanie odległości Rh–Rh w obrębie stosów tworzonych przez cząsteczki. Dla obu związków odległość między atomami metalu, w dimerach dla L1 oraz w stosach dla L2, jest krótsza od sumy promieni van der Waalsa.

Pomiary absorpcji wykonane dla monokryształów w temperaturze pokojowej wykazały, że absorpcja L2 jest przesunięta ku czerwieni względem L1 i jest zależna (~530 nm) od polaryzacji światła, co może wynikać z obecności oddziaływań metalofilowych w stosach. Zbadana została również absorpcja monokryształów umieszczonych w kowadełkach diamentowych – wykazywała ona znaczące przesunięcie ku czerwieni obejmując praktycznie cały zakres światła widzialnego powyżej co obserwowano poprzez zmianę koloru kryształów z pomarańczowej na czarną. Wyniki pomiarów absorpcji przedstawiono na wykresach poniżej.

Planowane są dalsze badania, obejmujące pomiary dyfrakcji rentgenowskiej kryształów w warunkach wysokiego ciśnienia oraz obliczenia metodą TD-DFT, które pozwolą na bardziej szczegółową analizę zależności między właściwościami spektroskopowymi a strukturą badanych kompleksów.



Literatura:

- [1] Slinker, Jason et al. Chem. Commun., 2003, 9, 2392
- [2] Syamala, Vishnu, et al. J. Mater. Chem., 2025, 13, 15634-15644.