

Streszczenie

Lublin 2019

UNIwersytet Marii Curie-Skłodowskiej w Lublinie

Wydział Chemii

Katedra Chemii Ogólnej, Koordynacyjnej i Krystalografii

DWUSKŁADNIKOWE KRYSTALICZNE KOMPLEKSY MOLEKULARNE WYBRANYCH POCHODNYCH BENZOFURANU

Autor: mgr Ilona B. Materek

Promotor: prof. dr hab. Anna E. Kozioł

Promotor pomocniczy: dr Liliana A. Mazur

Pierwsza część przedstawionej pracy stanowi przegląd literatury i opisuje zagadnienia powiązane z dziedziną chemii supramolekularnej, inżynierii krystalicznej, oddziaływaniami w fazie stałej, a także syntezą i metodami charakterystyki krystalicznych kompleksów molekularnych. Dane dostępne w literaturze oraz bazie danych strukturalnych pozwoliły na stworzenie koncepcji i celów badawczych niniejszej rozprawy.

W prezentowanej pracy doktorskiej opracowałam metodę syntezy dwuskładnikowych krystalicznych kompleksów molekularnych dwu pochodnych benzofuranu (BZF) z wybranymi ko-formerami, którymi były kwasy dikarboksylowe, związki monokarboksylowe oraz inne, takie jak hydrochinon czy sacharyna. Łącznie, według opracowanego sposobu syntezy otrzymałam 31 nowych krystalicznych faz. Dla każdej z nich zostały zarejestrowane dyfraktogramy proszkowe, w celu potwierdzenia zgodności fazowej produktów po mieleniu i po rekrystalizacji. Struktura krystaliczna otrzymanych kompleksów została wyznaczona metodą rentgenowskiej analizy strukturalnej. Badania strukturalne otrzymanych faz krystalicznych obejmowały przede wszystkim analizę ich stechiometrii w fazie stałej, a także analizę geometrii cząsteczek BZF w ko-kryształach oraz kationów $[\text{HBZF}]^+$ w solach i analizę oddziaływań stabilizujących układ molekularny $\text{BZF}\cdots\text{ko-former}$ (syntony supramolekularne, wiązania wodorowe, oddziaływania $\pi-\pi$ oraz $\text{C-H}\cdots\pi$). Zinterpretowane zostały również sposoby asocjacji cząsteczek w sieci kryształu. Dla wszystkich otrzymanych faz krystalicznych zostały obliczone powierzchnie Hirshfelda cząsteczek BZF i kationów $[\text{HBZF}]^+$ wraz z mapami oddziaływań międzycząsteczkowych. Przedmiotem rozważań w tej części pracy były również słabe oddziaływania międzycząsteczkowe typu $\text{C-H}\cdots\text{O}$. Dla najważniejszych typów oddziaływań została wykonana analiza ilościowa. Badania strukturalne zostały uzupełnione o widma zarejestrowane w podczerwieni oraz analizę termiczną.