

Streszczenie rozprawy doktorskiej mgr. inż. Damiana Paliwody pt.:

Intermolecular interactions in compressed crystals

Ciśnienie, tak jak temperatura, jest jednym z podstawowych parametrów termodynamicznych, dzięki któremu możliwe jest kontrolowanie warunków procesów chemicznych i reakcji. Przełomem w chemii wysokich ciśnień było skonstruowanie komory z kowadłami diamentowymi, w której generowane ciśnienie może osiągnąć bardzo duże wartości. Co więcej, badania dyfrakcyjne w warunkach wysokiego ciśnienia stanowią unikatową technikę badawczą pozwalającą na poznanie oraz zrozumienie zjawisk zachodzących w warunkach ekstremalnych, takich jakie panują np. we wnętrzu Ziemi czy w kosmosie.

Celem mojej pracy doktorskiej było otrzymanie oraz charakterystyka strukturalna kryształów molekularnych w aspekcie ich przemian strukturalnych związanych z transformacjami oddziaływań międzycząsteczkowych oraz agregacją molekuł w sieci krystalicznej w warunkach wysokiego ciśnienia. W ramach doktoratu podjąłem próby otrzymania pierwszego molekularnego ferroelektryka z wiązaniami wodorowymi typu $\text{NH}\cdots\text{N}$. W wyniku ciśnieniowej rekrystalizacji imidazole w komorze z kowadłami diamentowymi otrzymałem nową, polarną odmianę polimorficzną imidazolu oraz określiłem warunki termodynamiczne, w których obie odmiany polimorficzne współistnieją.

W kryształach ferrocenu zaobserwowałem anomalną ściśliwość jednego z parametrów strukturalnych oraz indukowane wysokim ciśnieniem wygaszenie drgań termicznych atomów węgla w pierścieniu cyklopentadienylowym, w związku z czym zaproponowałem model przemiany izostrukuralnej.

W ramach doktoratu otrzymałem także hybrydowy nieorganiczno-organiczny materiał luminescencyjny – dietyloditiokarbaminan złota(I), w zależności od warunków termodynamicznych, krystalizujący w układzie tetragonalnym lub rombowym. Powyżej 50 MPa faza tetragonalna ulega przemianie do fazy rombowej. Wykazałem, iż przemiana fazowa związana jest ściśle ze zmianą ułożenia helikalnych łańcuchów złota(I) oraz ich częściowym rozwijaniem w sieci krystalicznej.