

Streszczenie rozprawy doktorskiej mgr Weizhao Cai

„Ciśnieniowe przemiany agregatów supramolekularnych”

W ramach niniejszej pracy badałem wpływ ciśnienia na zmiany strukturalne substancji organicznych oraz polimerów koordynacyjnych. Skupiłem się głównie na przemianach fazowych badanych związków oraz ich właściwościach.

Wybrałem trzy różne mieszaniny racemiczne w celu potwierdzenia prawidłowości reguły Wallacha. Jako pierwszy związek zbadałem (\pm)-*trans*-1,2-diaminocykloheksan (DACH), który krystalizuje w tej samej formie co zbadane kryształy w niskiej temperaturze. Natomiast racemat kwasu migdałowego ulega przemianie fazowej w ciśnieniu 0.65 GPa. Otrzymałem również dwa kryształy 2-chlorobutanu w ciśnieniu 2.37 i 2.85 GPa. Po wykonaniu pomiarów dyfraktometrycznych okazało się, że badany związek tworzy mieszaninę enancjomerów.

Wykonałem również wysokociśnieniowe badania dla kwasu benzoowego do 2.21 GPa, które wykazały zależności między zmianami wiązań wodorowych a orientacją cząsteczek.

Benzoosan metylu krystalizuje w fazie α pomiędzy 0.35 a 0.54 GPa przyjmując niestabilną konformację cząsteczek. Powyżej 0.54 GPa zachodzi izostrukuralna przemiana fazowa z niewielką zmianą objętości. Cząsteczki w nowej fazie posiadają energetycznie stabilną płaską konformację.

Wykonałem również wysokociśnieniowe badania diwodorofosforanu potasu. Określiłem strukturę różnych odmian tego związku oraz wykonałem obliczenia metodami DFT.

N-tlenek 3-metylo-4-nitropyridyny wykazuje silnie ujemną liniową ściśliwość do około 0.12 GPa, natomiast powyżej tego ciśnienia występuje dodatnia ściśliwość aż do 3.57 GPa. Ujemną liniową ściśliwość zauważyłem również dla koordynacyjnego polimeru serbra(I).