

Toruń, 18.12.25

miejsowość, data

Imię i nazwisko doktoranta: Simran Chaudhary

Nr albumu: 503287

STRESZCZENIE ROZPRAWY DOKTORSKIEJ

Dyscyplina naukowa: Chemia

Tytuł rozprawy doktorskiej: **Porosity and dynamics in crystalline materials of transition metal complexes based on dipodal N-donor ligands and related solid-state phenomena**

Streszczenie rozprawy doktorskiej:

Materiały porowate zdolne do adsorpcji molekularnej cieszą się w ostatnich dwóch dekadach ogromnym zainteresowaniem ze względu na swój potencjał w zastosowaniach takich jak usuwanie zanieczyszczeń, magazynowanie gazów oraz separacja chemiczna. Wiązania koordynacyjne, znane ze swojej kierunkowości i różnorodności, stanowią solidną podstawę do tworzenia krystalicznych struktur o zróżnicowanej mikroporowatości. Choć struktury metaloorganiczne (MOF) były w ostatnich latach intensywnie badane, materiały te często napotykają problemy związane ze stabilnością i skalowalnością. W związku z tym rośnie zapotrzebowanie na alternatywne materiały porowate. W szczególności nadal brakuje systematycznych badań porowatości materiałów opartych na związkach metalocyklicznych (OD). Układy te, dzięki wnętrzą o ograniczonej przestrzeni, mają potencjał do selektywnego rozróżniania cząsteczek gości na podstawie takich właściwości jak rozmiar czy oddziaływania elektrostatyczne, co czyni je obiecującymi kandydatami do zastosowań w detekcji i separacji.

Niniejsza praca miała na celu przeprowadzenie badań nad alternatywnymi mikroporowatymi materiałami krystalicznymi, koncentrując się na dyskretnych cyklicznych związkach koordynacyjnych (MC) syntetyzowanych z dipodalnymi ligandami o różnej elastyczności opartymi na pochodnych imidazolu. Podczas syntezy tych układów uzyskano również potencjalnie porowate jednowymiarowe polimery koordynacyjne (CP), które zostały poddane dalszej analizie. Prace rozpoczęto od syntezy serii



ligandów dipodalnych, różniących się długością rdzenia aromatycznego, elastycznością oraz podstawnikami, które następnie wykorzystano w połączeniu z różnymi solami metali przejściowych do konstrukcji dyskretnych cyklicznych związków koordynacyjnych. Ponadto przeprowadzono badania w stanie stałym ligandów, ujawniając m.in. ich konformacyjną elastyczność, która zwiększa ich przydatność do tworzenia związków koordynacyjnych wykazujących dynamikę w kryształach. Niektóre z wyizolowanych związków koordynacyjnych wykazały niezwykle transformacje w stanie stałym, wywołane bodźcami zewnętrznymi, takimi jak ogrzewanie czy próżnia. Na przykład związki: **MC2**, $[\text{Co}_2(\text{L3})_2\text{Cl}_4] \cdot 0.8\text{CH}_3\text{CN}$ zawierający ligand 2,6-bis((2-metyloimidazol-1-yl)metyl)naftalen (**L3**), **MC8** $[\text{Cd}_2(\text{L7})_2\text{Cl}_4] \cdot 2\text{MeOH}$ skonstruowany z 4,4'-bis((2-metyloimidazol-1-yl)metyl)-1,1'-bifenylu (**L7**), **MC10** $[\text{Zn}_2(\text{L9})_2\text{Cl}_4] \cdot x\text{S}$ zawierający 4,4'-bis((1H-benzimidazol-1-yl)metyl)-1,1'-bifenyl (**L9**) oraz jednowymiarowe polimery koordynacyjne **CP2**, $\{[\text{Cu}(\text{L3})\text{Cl}_2] \cdot \text{CH}_3\text{CN}\}_n$ i **CP3**, $\{[\text{Cd}(\text{L3})\text{Cl}_2] \cdot \text{CH}_3\text{CN} \cdot 0.2\text{H}_2\text{O}\}_n$ syntetyzowane z użyciem ligandu 2,6-bis((2-metyloimidazol-1-yl)methyl)naftalen (**L3**), uległy transformacjom strukturalnym prowadzącym do powstania faz o odmiennych konformacjach ligandów. Transformacje te analizowano za pomocą analizy termogravimetrycznej oraz dyfrakcji rentgenowskiej na monokryształach i proszkach, zyskując szereg informacji o dynamice zachodzącej w materiałach krystalicznych. Dodatkowo badania właściwości sorpcyjnych ujawniły selektywność w stosunku do CO_2 w przypadku **MC2** oraz H_2 w przypadku **CP2** i **CP3** – podkreślając potencjał tych materiałów w zastosowaniach takich jak magazynowanie wodoru i przesiewanie molekularne. Podsumowując, uzyskane wyniki potwierdzają potencjał cyklicznych związków koordynacyjnych oraz polimerów koordynacyjnych o niskiej wymiarowości (1D) w kontekście właściwości sorpcyjnych, przy czym dla optymalizacji tych właściwości konieczne są dalsze, systematyczne badania.

.....
podpis doktoranta