

Celem projektu jest zbadanie zależności ciśnienia wywołującego transfer protonu w kokryształach molekularnych i różnicy w kwasowości cząsteczek je budujących.

Kokryształy stanowią ciekawą grupę materiałów, często wykazujących korzystniejsze właściwości w porównaniu do ich czystych składników. Znalazły one zastosowanie jako materiały energetyczne oraz w optyce nieliniowej, jednak najczęściej stosowane są w przemyśle farmaceutycznym. Projektowanie kokryształów oparte jest na wzajemnym dopasowaniu ich składników (koformerów) w celu stworzenia uzupełniającej się sieci wiązań wodorowych. Związkami chemicznymi chętnie tworzącymi ze sobą oddziaływania międzycząsteczkowe są kwasy i zasady Brønsted'a-Lowry'ego. Jednakże, w zależności od ich kwasowości i zasadowości mogą one utworzyć sól zamiast kokryształu. Różnica w kwasowości koformerów może służyć do przewidywania tendencji związków do tworzenia kokryształów lub soli w warunkach normalnych. Jednocześnie, zależność różnicy w kwasowości i przeskoku kationu wodorowego między kwasem a zasadą w warunkach odmiennych od normalnych nie została szczegółowo przebadana. Warto zauważyć, że wcześniejsze doniesienia naukowe na przykładzie dwuwodnego kwasu szczawowego rzeczywiście pokazały, że zwiększenie ciśnienia może prowadzić do przemiany kokryształu w sól. Dlatego, celem tych badań jest określenie zależności między różnicą w kwasowości koformerów a ciśnieniem wymaganym do wywołania przejścia kationu wodorowego w kokryształach molekularnych.

Prace eksperymentalne wykonane zostaną przy użyciu komory z kowadełkami diamentowymi (DAC). Próbką umieszczana jest w otworze specjalnie przygotowanej metalowej uszczelki zamontowanej w komorze diamentowej. Gdy dwa równoległe diamenty naciskają na metalową uszczelkę powodują jej odkształcenie i wzrost ciśnienia wewnątrz komory. Niestety, konstrukcja komory ciśnieniowej wpływa na jakość i ilość danych zbieranych podczas pomiaru dyfrakcji rentgenowskiej, utrudniając określenie pozycji atomów wodoru w strukturze krystalicznej- co jest kluczowym aspektem służącym do odróżnienia kokryształu od soli. W związku z tym komora ciśnieniowa o nowej konstrukcji, z szerokim kątem otwarcia, będzie użyta by zapewnić zebranie danych o jak najwyższej kompletności. Umożliwi to specjalistyczne udokładnienie pozycji atomów wodoru. Dane rentgenowskie zostaną dodatkowo wsparte pomiarami spektroskopii ramanowskiej. Gdy przemiana kokryształu w sól zostanie potwierdzona, wysokociśnieniowa rekrytalizacja próbki będzie przeprowadzona by zbadać czy zmiana ładunku składników prowadzi do alternatywnego sposobu ich agregacji w ciele stałym.

Badania te poszerzą ogólną wiedzę na temat zachowania kokryształów molekularnych pod ciśnieniem i pozwolą wyznaczyć zależność między różnicą w kwasowości koformerów a ciśnieniem wymaganym do wymuszenia przejścia kationu wodorowego. Ponadto, mogą one prowadzić do odkrycia nowych form krystalicznych niemożliwych do otrzymania w warunkach normalnych. Dlatego, zastosowane podejście może okazać się metodą otrzymywania nowych materiałów o interesujących właściwościach.