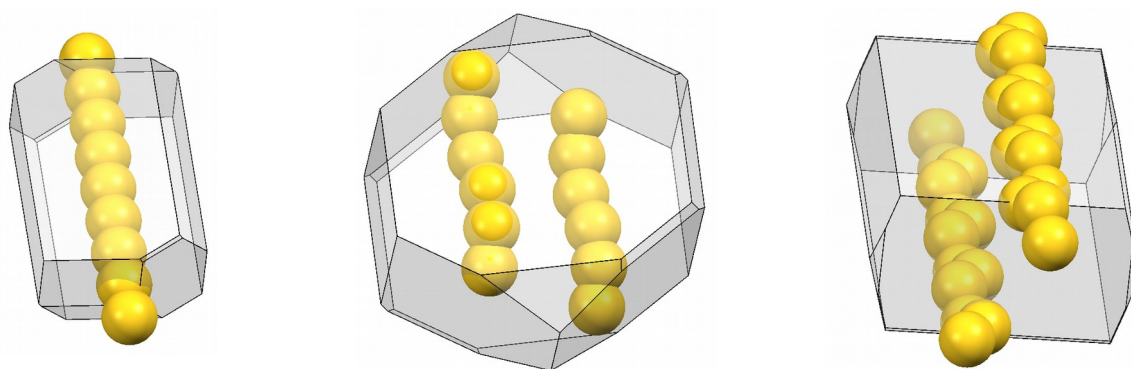


## Molekularne złote druty – otrzymywanie, polimorfizm i właściwości fizykochemiczne

Przedmiotem badań jest grupa metaloorganicznych związków złota(I), w których atomy ciężkiego metalu, jakim jest złoto, połączone są wiązaniami z cząsteczkami organicznymi, jak na przykład *fosfiny alkinylo złota(I)*. Szczególną cechą badanych związków jest to, że mogą one tworzyć struktury krystaliczne, w których atomy złota ułożone są w łańcuchy – „złote druty”, o różnym kształcie, oddzielone od siebie związkami organicznymi, patrz: ilustracja. W efekcie materiały takie mają bardzo użyteczne własności, np. silną fluorescencję i piezochromizm (zmiana koloru pod wpływem ciśnienia), wynikające z oddziaływań pomiędzy atomami złota (są to tzw. oddziaływania aurofilowe). Jednocześnie ich własności są znacząco różne zarówno od właściwości metalicznego złota lub nanocząstek czystego złota jak i samych cząsteczek organicznych. Przykładowo, można się spodziewać, że w warunkach wysokiego ciśnienia będą one zachowywać się jak układ jednowymiarowych (pół-)przewodników o jednoatomowej grubości. Co ważne, badane związki wykazują polimorfizm (wielopostaciowość) tworzonych kryształów, co oznacza, że ten sam związek może formować, w zależności od warunków krystalizacji, kryształy o różnym sposobie upakowania cząsteczek (np. idealnie proste lub wygięte 'złote druty'), a zatem i różnych właściwościach fizycznych.



O znaczeniu zjawiska polimorfizmu przekonał się dobitnie przemysł farmaceutyczny, choćby na przykładzie leku *Ritonavir*, który trzeba było wycofać, ze względu na obecność nieprzewidzianej, nierozpuszczalnej odmiany polimorficznej, nieaktywnej terapeutycznie. Odmiany polimorficzne związków badanych w tym projekcie mogą znaleźć zastosowania jako materiały do budowy sensorów oraz elementów optoelektronicznych (np.: diod OLED). Jednak także w tym obszarze możliwość przemysłowego wykorzystania zależeć będzie od opanowania technik pozyskiwania konkretnych form krystalicznych, zbadania ich stabilności, przemian i specyficznych właściwości.

Pierwszym głównym celem projektu jest kontrolowane otrzymywanie nowych form krystalicznych badanych związków, ustalenie fizycznych i chemicznych czynników wpływających na formowanie się poszczególnych odmian oraz zbadanie ich stabilności i przemian fazowych. Celem drugim jest zbadanie ich właściwości fizycznych z naciskiem na właściwości optyczne i spektroskopowe i ocena ich potencjalnej stosowalności.

W projekcie wykorzystane będą zaawansowane techniki badań struktury kryształów metodą dyfrakcji (rozpraszania) promieniowania Rentgena, w tym badania w warunkach wysokiego ciśnienia, nawet do ok. 10 GPa czyli około stu tysięcy atmosfer, przy użyciu kowadełek diamentowych oraz badania z użyciem źródeł synchrotronowych. Wykonane zostaną także badania właściwości takich jak fluorescencja UV-VIS (świecenie materiałów w zakresie widzialnym po oświetleniu promieniami UV) i widma Ramana oraz badania kalorymetryczne i przewodnictwa.

Do zrozumienia relacji pomiędzy strukturą a właściwościami oraz interpretacji wyników eksperymentów posłużą obliczenia teoretyczne, metodami DFT, tj. funkcjonału gęstości, w warunkach periodycznych, które dadzą kwantowo-mechaniczny model struktury elektronowej w tym opis struktury pasmowej i energie oddziaływań międzycząsteczkowych.

Systematyczne porównywanie właściwości fizykochemicznych kilku polimorfów tego samego związku zapewni wyjątkową okazję do określenia **wplywu upakowania cząsteczek w kryształach** na ich właściwości **niezależnie od wpływu konkretnych podstawników chemicznych**.