

2019  
6-7 KWIETNIA

SYMPOZJUM  
MŁODYCH  
NAUKOWCÓW  
WYDZIAŁU FIZYKI UW



## Porównanie struktury krystalicznej dwóch pochodnych rodnika TEMPO (rodnik 2,2,6,6-tetrametylopiperydyno-1-oksylowy)

*Katarzyna Polak<sup>1</sup>, Agata Wróbel<sup>1</sup>, Damian Trzybiński<sup>1</sup>, Elżbieta Megiel<sup>1</sup>, Krzysztof Woźniak<sup>1</sup>*

*<sup>1</sup>Wydział Chemii, Centrum Nauk Biologiczno-Chemicznych, Uniwersytet Warszawski*

Rodnik 2,2,6,6-tetrametylopiperydyno-1-oksylowy (zwyczajowo nazywany TEMPO) oraz jego pochodne stanowią interesującą grupę związków organicznych, posiadających szeroki wachlarz zastosowań. Są one wykorzystywane m.in. w syntezie organicznej jako katalizatory [1], czy utleniacze alkoholi [2]. Ponadto, posiadają one właściwości magnetyczne – zarówno ferro- jak i antyferromagnetyczne w niskich temperaturach [3] oraz z uwagi na ciekawą budowę chemiczną oraz cechy strukturalne mogą one także stanowić ciekawy obiekt badań krystalograficznych.

Niniejsza praca dotyczy struktury krystalicznej dwóch nowych pochodnych rodnika TEMPO, mianowicie: bis-nadsiarczku propionianu rodnika 2,2,6,6-tetrametylo-4-hydroksopiperidynylooksylogowego (DISSPK) oraz tereftalanu dirodnika 2,2,6,6-tetrametylo-4-hydroksopiperidynylooksylogowego (DITTE). Związek DISSPK został wykrystalizowany z acetonitrylu, natomiast DITTE z chloroformu. Okazało się, że kryształy obu analizowanych połączeń miały jakość odpowiednią do przeprowadzenia rentgenowskiej analizy strukturalnej monokryształów. Pomiary dyfrakcyjne zostały wykonane za pomocą dyfraktometru Agilent Technologies SuperNova Dual Source, z wykorzystaniem promieniowania CuK $\alpha$  w temperaturze 100 K.

Przeprowadzone badania krystalograficzne pozwoliły na jednoznaczne ustalenie tożsamości obu układów oraz na szczegółowy opis ich struktury krystalicznej. Związki, mimo stosunkowo podobnej budowy chemicznej, wykazują istotne różnice w sposobie, w jakim upakowują się w sieci krystalicznej oraz w schemacie występujących oddziaływań międzycząsteczkowych, co zostanie szczegółowo przedstawione w niniejszej prezentacji. Ponadto, pokazane zostaną także wyniki analizy powierzchni Hirshfelda dla obu układów. Analiza tego rodzaju pozwala na uzyskanie dodatkowych informacji na temat poszczególnych typów kontaktów międzyatomowych występujących w kryształach.

[1] Soegiarto, A. C., Yan, W., Kent, A. D. & Ward, M. D. (2011). *J. Mater. Chem.* 21, 2204–2219.

[2] Gheorghe, A., Matsuno, A. & Reiser, O. (2006). *Adv. Synth. Catal.* 348, 1016–1020.

[3] Togashi, K., Imachi, R., Tomioka, K., Tsuboi, H., Ishida, T., Nogami, T., Takeda, N. & Ishikawa, M. (1996). *Bull. Chem. Soc. Jpn.* 69, 2821–2830.