



Contribution ID: 19

Type: Plakat // Poster

BADANIA ODDZIAŁYWAŃ MIĘDZY- I WEWNĄTRZCZĄSTECZKOWYCH W SOLACH IMIDAZOLIOWYCH Z HELIKOIDALNĄ SIECIĄ WIĄZAŃ WODOROWYCH

Monday, 8 September 2025 17:00 (2 hours)

Struktura helikalna stanowi jeden z najbardziej rozpowszechnionych motywów strukturalnych w biologii [1,2]. Układy o strukturze helikalnej stanowią inspirację do projektowania i wykorzystywania grup funkcyjnych w określonych miejscach w przestrzeni trójwymiarowej [1]. W wielu laboratoriach na świecie prowadzone są intensywne badania mające na celu wyjaśnienie, w jaki sposób muszą być ułożone cząsteczki w strukturze krystalicznej, aby tworzyły one strukturę helikalną [3]. Zwraca się uwagę na naturę oddziaływań w kryształach, właściwości fizyczne oraz mechaniczne, w szczególności na anizotropię i odkształcenia sprężyste. Zauważono także występowanie ujemnej rozszerzalności temperaturowej w układzie o helikalnej strukturze z wiązaniami wodorowymi w (S,S)-octa-3,5-diyn-2,7-diolu [4].

Przedmiotem badań jest grupa soli imidazoliowych z aromatycznymi kwasami karboksylowymi [5-6]. Jony w strukturze krystalicznej połączone są wiązaniami wodorowymi $N^+-H\cdots O^-$, które tworzą strukturę helikalną. Analiza tereftalanu (bis)imidazoliowego wykazała występowanie ujemnej rozszerzalności termicznej [6]. W benzoesanie imidazoliowym pokazano występowanie ujemnej rozszerzalności termicznej oraz ujemnej ściśliwości liniowej [7].

Głównym celem badań jest teoretyczna analiza zachowania się sieci wiązań wodorowych oraz oddziaływań międzycząsteczkowych w otrzymanych solach na bazie aromatycznych kwasów karboksylowych oraz cząsteczek heterocyklicznych jak imidazol czy pirazol. W ramach badań prowadzone są obliczenia teoretyczne z wykorzystaniem metod DFT oraz TD-DFT przy wykorzystaniu oprogramowania Gaussian09. Przy pomocy obliczeń DFT przeprowadzono analizę struktury oscylacyjnej. Do określenia rodzaju występujących wiązań wodorowych wykorzystano kwantową teorię atomów w cząsteczkach (QTAiM).

Wyniki otrzymane w ramach analizy numerycznej pozwoliły na głębsze zrozumienie zachowania się sieci wiązań wodorowych (np. $O-H\cdots O$, $N-H\cdots O$) oraz oddziaływań międzycząsteczkowych. Analiza ta pozwoli wyjaśnić i opisać przyczyny zachowania anomального w badanych układach. Na podstawie prowadzonych obliczeń możliwa będzie interpretacja wyników eksperymentalnych dla grupy badanych związków. Ponadto pozwoli ona na zaproponowanie nowych układów o wymaganych właściwościach fizykochemicznych.

Praca naukowa finansowana ze środków budżetowych na naukę w latach 2020-2023, jako projekt badawczy w ramach programu PRELUDIUM-18 Narodowego Centrum Nauki, nr. rej. 2019/35/N/ST5/03324. Badania zostały przeprowadzone przy wsparciu Interdyscyplinarnego Centrum Modelowania Matematycznego i Komputerowego Uniwersytetu Warszawskiego (ICM UW).

Literatura

- [1] C. Y. Tsai, E. O. Salawu, H. Li, G. Y. Lin, T. Y. Kuo, L. Voon, A. Sharma, K. D. Hu, Y. Y. Cheng, S. Sahoo, L. Stuart, C. W. Chen, Y. Y. Chang, Y. L. Lu, S. Ke, C. L. Ortiz, B. S. Fang, C. C. Wu, C. Y. Lan, H. W. Fu, L. W. Yang, Nat. Commun. 13 (2022) 1-14.
- [2] Y. Li, Z. Qian, L. Ma, S. Hu, D. Nong, C. Xu, F. Ye, Y. Lu, G. Wei, M. Li, Nat. Commun. 7 (2016) 1-9.
- [3] Z. Shahbazi, Am. J. Mech. Eng. 3 (2015) 47-54.
- [4] D. Das, T. Jacobs, L. J. Barbour, Nature Mater 9 (2010) 36-39.
- [5] S. Zięba, A. T. Dubis, A. K. Gzella, P. Ławniczak, K. Pogorzalec-Glaser, A. Łapiński, Phys. Chem. Chem.

Phys. 21 (2019) 17152-17162.

[6] S. Zięba, A. Gzella, A. T. Dubis, A. Łapiński, Cryst. Growth Des. 21 (2021) 3838-3849.

[7] S. Zięba, M. Rusek, A. Katrusiak, A. Gzella, A. T. Dubis, A. Łapiński, Sci. Rep. 13 (2023) 1-11.

Primary author: ŁAPIŃSKI, Andrzej (Instytut Fizyki Molekularnej Polskiej Akademii Nauk)

Co-authors: Dr MIZERA, Adam (Instytut Fizyki Molekularnej Polskiej Akademii Nauk); Prof. DUBIS, Alina (Wydział Chemii, Uniwersytet w Białymstoku); Dr ZIĘBA, Sylwia (Instytut Fizyki Molekularnej Polskiej Akademii Nauk)

Presenter: ŁAPIŃSKI, Andrzej (Instytut Fizyki Molekularnej Polskiej Akademii Nauk)

Session Classification: Sesja plakatowa

Track Classification: Fizyka molekularna // Molecular physics