

Przemiany fazowe indukowane wzrostem ciśnienia w aryloacetylenku złota(I) z trietylofosfiną

Róża Jastrzębska

Kierownik: **dr hab. inż. Anna Makal, prof. UW**

Przemiany fazowe materiałów krystalicznych są szeroko badane ze względu na możliwość powiązania zmian strukturalnych ze zmianami właściwości fizycznych. Szczególnym przypadkiem są przejścia fazowe bez zmiany krystaliczności materiału – tzw. *single crystal to single crystal (SCSC) phase transition*. Znalezienie ugrupowań pozwalających na zaistnienie takich przemian jest kluczowe w projektowaniu materiałów o właściwościach przełączanych [1]. Taką funkcję może spełnić grupa trietylofosfinowa, która przyjmuje 7 różnych konformacji [2, 3].

W ramach pracy badałam strukturę oraz indukowane ciśnieniem przemiany fazowe w luminescencyjnym kryształ kompleksu p-metoksyfenoacetylenku złota(I) z trietylofosfiną. Scharakteryzowałam jego strukturę w warunkach atmosferycznych oraz w zakresie ciśnień do około 2,6 GPa. Odkryłam trzy indukowane wzrostem ciśnienia przemiany fazowe. Pierwsza z nich, występująca przy około 0,5 GPa, zależała jedynie od przyłożonego ciśnienia. Na pozostałe dwie przemiany, zachodzące przy około 2 GPa, miał wpływ także stopień izotropowości zastosowanego medium przenoszącego ciśnienie. Zmianom fazy krystalicznej towarzyszyły zmiany konformacyjne ugrupowania trietylofosfinowego.

W medium niehydrostatycznym nastąpił ciąg przemian fazowych z obniżeniem symetrii układu ($Pbca \rightarrow Pb2_1a \rightarrow P11a$) oraz zmianami konformacji trietylofosfiny – najpierw połowy cząsteczek o konformacji **C** na **E**, a następnie połowy cząsteczek o konformacji **E** na **D**. W medium quasi-hydrostatycznym nastąpił ciąg przemian fazowych z obniżeniem, a następnie odtworzeniem symetrii układu ($Pbca \rightarrow Pb2_1a \rightarrow Pbca$) oraz zmianą konformacji trietylofosfiny z **C** na **E** najpierw dla połowy cząsteczek, a następnie dla pozostałych.

Przeprowadzone badania potwierdzają, że grupa trietylofosfinowa może sprzyjać zachodzeniu przemian fazowych bez zmiany stopnia krystaliczności układu, co czyni ją grupą potencjalnie istotną w otrzymywaniu materiałów o właściwościach przełączanych.

Literatura:

- [1] Castro M., Falvello L. R., Forcén-Vázquez E., Guerra P., Al-Kenany N. A., Martínez G., Tomás M., Acta Crystallogr. C Struct. Chem. 2017, 73, 731-742.
- [2] Orpen A., Pringle P. G., Smith M. B., Worboys K., J. Organomet. Chem. 1998, 550, 255–266.
- [3] D. D., Haddow M. F., Orpen A. G., Watson P. J., Dalton Trans. 2009, 47, 10436.