

Doctoral dissertation topic: "Interplay of intermolecular interactions in the construction of supramolecular aggregates with special regard to halogen bonding."

PhD project entitled "Interplay of intermolecular interactions in the construction of supramolecular aggregates with special regard to halogen bonding" has explored the subject of interplay of the intermolecular interactions in the construction of new supramolecular aggregates characterized by complicated structures taking advantage from rational design. This topic was undertaken in order to the design and the synthesis of a new binary or tertiary complexes. Their self-assembly modes were investigated with the use of crystallographic analysis. The aim of the first part of this dissertation has been to map out the methodology for the formation of tertiary polypseudorotaxanes self-assembled by halogen bonding. Permethylylated pillar[5]arene has been used as a wheel molecule tapped on the halogen bonded supramolecular polymeric axis. Another part of the project has consisted of the design of supramolecular aggregates demonstrating attractive honeycomb-like structure with use of halogen or hydrogen bonds. The preparation and crystal structure determination of some (6,3) templated complexes obtained from co-crystallization of the tritopic linkers: 2,4,6-tri(4-pyridyl)-1,3,5-triazine and cyclic triimidazole has been reported. The approach for the constructing of hexagonal crystallines by effective transferring of the D_{3h} symmetry of molecular building blocks to supramolecular symmetry of crystals has been used. Next part describes the exploitation of unused thus far *N*-nitrosamine group for participation in halogen bonding with commonly used donors. Last part of this PhD project includes the research of the ability of benzo-2,1,3-chalcogenadiazoles to act as supramolecular tecton. It has been demonstrated that the cyclic $[Se-N]_2$ supramolecular synthon based on secondary binding interactions is typically responsible for self-array mode of benzo-2,1,3-selenadiazoles in solid state. Moreover, diazole ring has been simultaneously involved in another type of interaction for example hydrogen or halogen bonding taking advantage from the presence of lone pair found with nitrogen atom not engaged in dimer formation.

mgr inż. Katarzyna Eichstaedt

Streszczenie rozprawy pt. „Zastosowanie oddziaływań międzycząsteczkowych, ze szczególnym uwzględnieniem wiązań halogenowych, w konstruowaniu struktur ponadcząsteczkowych.”

Praca doktorska pt. „Zastosowanie oddziaływań międzycząsteczkowych, ze szczególnym uwzględnieniem wiązań halogenowych, w konstruowaniu struktur ponadcząsteczkowych” porusza problematykę projektowania i uzyskiwania uporządkowanych faz stałych. Pierwsza część badań obejmuje formowanie skomplikowanych układów typu polipseudorotaksanów z wykorzystaniem cząsteczki pillar[5]arenu stanowiącej obręcz pseudorotaksanu. Oś konstruowanych systemów zbudowana została z polimerycznych nici stabilizowanych silnymi wiązaniami halogenowymi. Kolejne etapy prac skupiły się wokół otrzymywania układów heksagonalnych o strukturze plastra miodu agregowanych na drodze wiązań halogenowych i wodorowych. Wykorzystana strategia polegała na przeniesieniu symetrii cząsteczkowej 2,4,6-tris(4-pirydylo)-1,3,5-triazyny oraz cyklicznego triimidazolu na symetrię kryształu. Niektóre z uzyskanych w tym obszarze struktur wykazują niezwykle rzadko spotykany porowaty charakter. Dalsze prace poświęcone były uzyskiwaniu dwuskładnikowych supermolekuł z wykorzystaniem nieeksploatowanej w tym kierunku grupy *N*-nitrozoaminowej jako akceptora wiązań halogenowych. Celem ostatniej serii eksperymentów było wykorzystanie cząsteczek o rdzeniu benzo-2,1,3-selenadiazolowym do formowania układów ponadcząsteczkowych. Przeprowadzone badania opierały się na zastosowaniu wolnej pary elektronowej atomu azotu nie biorącego udziału w cyklicznym syntonie $[Se-N]_2$ do współuczestniczenia w międzycząsteczkowych wiązańach halogenowych lub wodorowych. Dodatkowo rozwinięty został wątek samoasocjacji soli *N*-metylobenzo-2,1,3-chalkogenadiazoli. Badania polegały na analizie konkurencyjności syntonów $[E-N]_2$ oraz $[E \cdots X^-]_2$.