

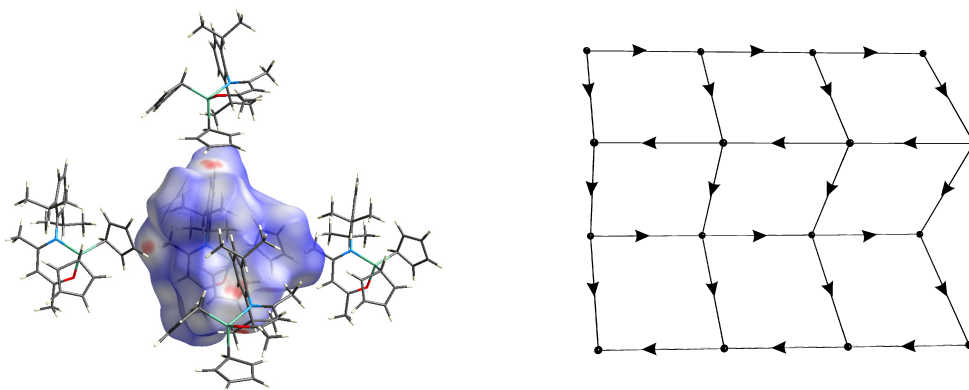
HIERARCHICZNA BUDOWA KRYSZTAŁÓW MOLEKULARNYCH

Izabela D. Madura

Katedra Chemii Nieorganicznej i Technologii Ciała Stałego, Wydział Chemiczny PW

Uporządkowanie przestrzenne cząsteczek w kryształach molekularnych zależy jest od właściwości drobin budujących kryształ, a w szczególności od charakteru oddziaływań występujących pomiędzy nimi. Jeżeli jedynymi oddziaływaniami porządkującymi cząsteczki w kryształach molekularnych są izotropowe oddziaływania van der Waalsa, to obserwuje się tworzenie struktur bliskich strukturze najgęstszego upakowania. Pojawienie się oddziaływań kierunkowych prowadzi, zgodnie z zasadami przedstawionymi przez Kitaigorodskiego,[1] do złamania symetrii struktury najgęstszego upakowania i tworzenia struktur o budowie hierarchicznej.

W trakcie wykładu zostaną omówione konsekwencje występowania oddziaływań międzycząsteczkowych i ich wpływ na sposób organizacji cząsteczek w kryształach. Szczególna uwaga zostanie poświęcona identyfikacji i analizie kierunkowości słabych oddziaływań intermolekularnych. Na podstawie wybranych prac własnych omówiona zostanie rola tych oddziaływań w generowaniu i organizacji kolejnych poziomów hierarchicznej architektury kryształów. Wybrane przykłady posłużą do ilustracji wykorzystywanych w kryształach metod analizy struktur uzyskanych z pomiarów dyfrakcji rentgenowskiej na monokryształach. Omówione zostaną między innymi analiza powierzchni Hirshfelda i analiza topologiczna.



Podczas wykładu zostaną również przedstawione zastosowania proponowanego sposobu analizy struktur kryształów molekularnych. Wykazana zostanie przydatność hierarchizacji poziomów strukturalnych do poszukiwania równoważnych strukturalnie syntonów supramolekularnych oraz do przewidywania nowych odmian polimorficznych.

[1] Kitaigorodsky A.I. *Molecular Crystals and Molecules*, New-York, Academic Press, 1973.