

Klasyfikacja kryształów związków organicznych: kryterium krótkich kontaktów

Michał Kaźmierczak

Pomimo wielkiego znaczenia oddziaływań międzycząsteczkowych, klasyfikacja kryształów na ich podstawie ogranicza się prawie wyłącznie do jakościowych podziałów, np. na kryształy molekularne, czy jonowe. Celem tej pracy jest zaprezentowanie parametrów pozwalających na ilościowy opis kryształów w oparciu o oddziaływania międzycząsteczkowe:

1. *parametru kontaktu δ* , opisującego odległość między sferami van der Waalsa;
2. *rzędu kontaktu n* , będącego liczbą porządkową określającą pozycję danego kontaktu na liście uszeregowanej według wzrastającego parametru kontaktu δ ;

oraz zastosowanie ich do analizy statystycznej modeli struktur zdeponowanych w *Cambridge Structural Database*. Pozwoliło to uzyskać dane dotyczące najpopularniejszych typów kontaktów oraz potwierdzono istnienie nowej grupy kryształów (*luźne kryształy, ang loose crystals*). Badania te są niezwykle ważne nie tylko z krytalograficznego punktu widzenia, ale także ze względu na ich praktyczne zastosowanie. Pełniejsze zrozumienie oddziaływań międzycząsteczkowych, ich zachowania, stabilności, czy prawdopodobieństwa wystąpienia mogą znaleźć zastosowanie w tworzeniu nowych materiałów oraz walidacji modeli struktur.