

Inżynieria kryształów jest gwałtownie rozwijającą się dziedziną chemii. Ma zastosowanie w takich obszarach jak technologia materiałowa, biologia molekularna czy farmaceutyka. Prowadzi to do wzrostu zainteresowania w projektowaniu i otrzymywaniu kryształów oraz zrozumienia w jaki sposób następuje ich upakowanie. Badania skupiają się nad przewidywaniem różnych motywów wiązań wodorowych (homosyntonów i heterosyntonów) pojawiających się w kryształach. Małe cząsteczki takie jak aminopirydyny czy aminopirymidyny posiadające atom azotu  $N_{py}$  oraz grupy aminowe mogą stanowić dla nas model dla zrozumienia rozpoznania molekularnego na przykład zasad pirymidynowych i purynowych. Heterosynton  $R_2^2(8)$  tworzony pomiędzy grupą aminową a karboksylową jest dobrze poznanym motywem występującym w wielu kryształach i wykorzystywanym przy projektowaniu nowych kompleksów.

W mojej pracy prezentuje badania poświęcone sieciom wiązań wodorowych obserwowanych w kryształach kwasów sulfonowych (kwas 5-sulfoizoftalowy (5SIP) i kwas L-cysteinowy (CSA)) z różnymi aminami aromatycznymi (aminopirydyny, aminopirymidyny, amino-1,3,5-triazyny oraz zasady pirymidynowe i purynowe). Na podstawie pomiarów rentgenograficznych stwierdziłam, że piętnaście nowych struktur charakteryzuje się jednoskośnym, trójskośnym bądź rombowym układem przestrzennym. Ponadto zostały dla nich wykonane pomiary spektroskopowe (IR, Raman) oraz analiza ich organizacji molekularnej. Przebrałam możliwości tworzenia się heterosyntonu  $N-H\cdots O/O-H\cdots N$  z udziałem grupy sulfonowej i karboksylowej, interesowało mnie również jak zmiana pozycji grupy aminowej w stosunku do atomu  $N_{py}$  wpłynie na sieć wiązań wodorowych. Wzrastająca liczba atomów azotu oraz grup aminowych ma olbrzymi wpływ na organizację molekularną. W przypadku mniejszych cząsteczek amin kwas 5SIP oraz CSA tworzą homomotywy układające się w jednowymiarowe taśmy lub łańcuchy, natomiast sytuacja zmienia się gdy pojawiają się bardziej rozbudowane aminy. Ponadto, ponieważ rozpuszczalnikiem była woda, zaobserwowałam również motywy budowane z udziałem tej właśnie cząsteczki.

Poza tym zaobserwowałam, że warunki krystalizacji takie jak temperatura, rozpuszczalnik, rodzaj i stechiometria substratów oraz metoda przeprowadzenia syntezy ma wyraźny wpływ na otrzymywanie nowych trójwymiarowych struktur. Moje badania poszerzają wiedzę na temat możliwości tworzenia struktur organicznych dla kwasu 5-sulfoizoftalowego oraz L-cysteinowego z aminami aromatycznymi.