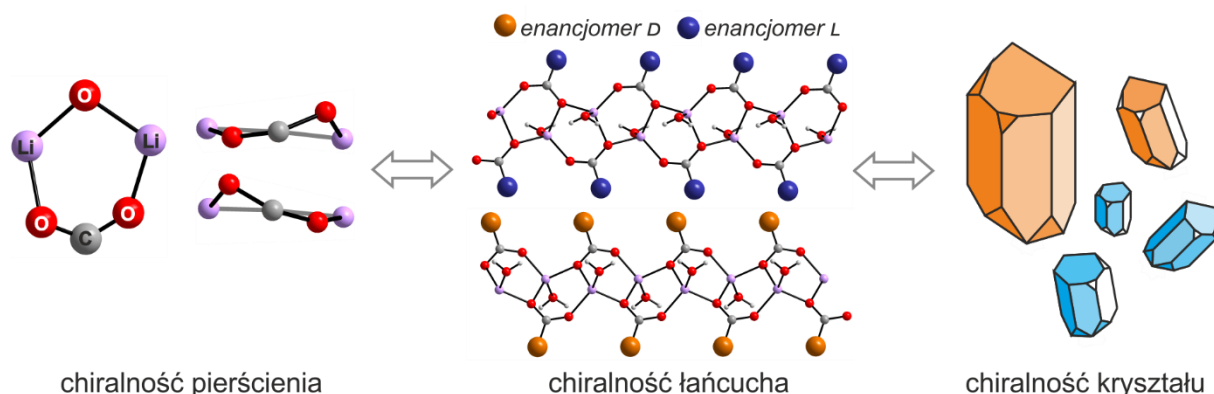


Zjawisko chiralności ma niezwykle istotne konsekwencje w otaczającym nas świecie. Często tylko jeden enancjomer danego leku wykazuje zamierzone działanie, podczas gdy drugi może być szkodliwy. Z uwagi na konieczność otrzymywania związków chemicznych o określonej chiralności, poszukuje się zarówno nowych metod syntezy jak i metod selektywnej separacji enancjomerów z mieszanin racemicznych. Najtańszym i najprostszym sposobem jest oczyszczanie przez krystalizację. Niestety, enancjomery nie wszystkich związków ulegają spontanicznemu rozdziałowi przez krystalizację, a co więcej mechanizmy stojące za tym zjawiskiem nie są w pełni poznane. Znaczną rolę we wzajemnym rozpoznawaniu się cząsteczek o określonej chiralności odgrywają oddziaływania jakie mogą się między nimi tworzyć. Do oddziaływań takich należy zaliczyć wiązania wodorowe, oddziaływania van der Waalsa czy elektrostatyczne. Nową grupą związków, w których wszystkie te rodzaje interakcji międzycząsteczkowych mogą się pojawić, są jonowe ko-kryształy, będące związkami zbudowanymi zarówno z komponentów organicznych jak i nieorganicznych. Co więcej, odpowiednio projektując układy, można otrzymywać struktury o zamierzonej architekturze molekularnej.

Zaobserwowano, że w strukturach jonowych ko-kryształów soli litowych, powtarza się motyw polimeru koordynacyjnego będącego nieskończonym łańcuchem, w którym można wyróżnić podstawowy element budulcowy jakim jest chiralny, sześcioczłonowy pierścień. Celem projektu jest analiza wpływu czynników strukturalnych na tę podstawową jednostkę strukturalną i określenie, jak owe zmiany propagowane są na wyższych poziomach budowy molekularnej a w końcu, jak wpływają na chiralność całego kryształu. Badania takie mogą być kluczowe w zrozumieniu strukturalnych mechanizmów rządzących zjawiskiem rozpoznawania się i selektywnej krystalizacji enancjomerów. Analiza taka będzie możliwa dzięki przygotowaniu spójnego, dostatecznie dużego zbioru struktur o zachowanym podstawowym motywie strukturalnym, a o modyfikowanych wybranych parametrach. Do stworzenia tej biblioteki strukturalnej wykorzystane zostaną halogenki litu oraz aminokwasy biogenne. Podstawą badań będą pomiary dyfrakcji promieniowania rentgenowskiego na monokryształach badanych związków, a następnie analiza otrzymanych danych wspomagana metodami teoretycznymi takimi jak kwantowo-chemiczne obliczenia periodyczne, czy teoria grafów.



Rysunek 1. Poziomy chiralności obserwowane w jonowych ko-kryształach soli litowych i aminokwasów.