

# ДИЗАЙН МОЛЕКУЛЯРНЫХ МАТЕРИАЛОВ: МЕЖДУ ИНЖЕНЕРИЕЙ КРИСТАЛЛОВ И СЛУЧАЙНОСТЬЮ

Федянин И.В.

*Институт элементоорганических соединений  
им. А.Н.Несмеянова РАН, Москва, Россия  
octy@xrlab.ineos.ac.ru*

Инженерия кристаллов — дизайн и синтез кристаллических структур с желаемыми свойствами путём целенаправленного управления межмолекулярными взаимодействиями. Этот зонтичный термин объединяет экспериментальные методы и подходы, призванные решить, в конечном итоге, достаточно амбициозную задачу: получение заранее требуемой кристаллической упаковки. Поскольку для конкретной молекулы при заданных условиях в лучшем случае существует лишь несколько вариантов кристаллической структуры, управление межмолекулярными взаимодействиями обычно подразумевает варьирование заместителей или использование дополнительных компонентов, слабо влияющих на свойства активного молекулярного центра. При использовании супрамолекулярных синтонов — устойчивых молекулярных ассоциатов, образующихся за счёт определённого типа взаимодействий — можно надеяться хотя бы на частичный контроль над кристаллической упаковкой.

Однако беглый просмотр специализированных журналов, имеющих термины «дизайн» и «инженерия» в названии показывает, что большая часть работ, в особенности для молекулярных кристаллов, носит описательный характер. Безусловно, систематизация и классификация межмолекулярных взаимодействий и вариантов упаковок и их связь со свойствами также важны. Однако решаема ли основная задача инженерии кристаллов и насколько она отличается от слепого поиска подходящих структур?

В докладе рассматриваются примеры различных удачных подходов к инженерии кристаллов с несколькими типами желаемых физико-химических свойств (не включающих фармакологические) для различных классов соединений.