

# Zmiany termodynamicznych i dynamicznych własności substancji molekularnych

Ewa Juszyńska-Gałązka, Małgorzata Jasiurkowska-Delaporte, Anna Drzewicz, Aleksandra Deptuch, Marcin Piwowarczyk, Mirosław Gałązka, Wojciech Zajac  
Instytutu Fizyki Jądrowej im. H. Niewodniczańskiego PAN, Kraków

1920

1920-2020



100 LAT POLSKIEGO TOWARZYSTWA FIZYCZNEGO

2020

Substancje molekularne, w tym te o dużym znaczeniu aplikacyjnym, jak np. farmaceutyki, łączy bogactwo form (polimorfizm), jak i bogactwo struktur chemicznych (izomeria). Polimorfizm ten obejmuje m.in. mezofazy uporządkowane w mniej niż trzech wymiarach przestrzennych i fazy plastycznokrystaliczne, tj. np. fazy z zachowaną częściową swobodą orientacyjną oraz stany, gdzie ta swoboda ulega zamrożeniu. Te ostatnie, to stany szkliste faz termodynamicznych innych, niż ciecze izotropowe. Badanie takich szkieł, zarówno od strony dróg ich powstawania, jak stabilności, czy rekrytalizacji ma duże znaczenie poznawcze, a także dostarcza wiedzy potrzebnej do otrzymywania np. substancji leczniczych, których formy amorficzne lub amorfizowane nierzadko charakteryzuje lepsza przyswajalność. Wiele farmaceutyków posiada budowę chemiczną podobną do pozostających w naszym zainteresowaniu ciekłych kryształów, czy rozgałęzionych alkoholi. Badania metodami komplementarnymi, substancji molekularnych wykazują ogromny wpływ szybkości zmiany temperatury na ich własności fizykochemiczne. W szczególności zjawiska witrifikacji czy procesu zimnej krystalizacji są przedmiotem badań metodami kalorymetrycznymi i spektroskopowymi. Głównym celem jest określenie rodzaju zmian strukturalnych i dynamicznych w odpowiednich fazach termodynamicznych. Zaprezentowane zostaną wyniki badań wybranych związków z obszaru materii miękkiej, metodami eksperymentalnymi wspartymi symulacjami *ab-initio*. W tych ostatnich uwzględniono również słabe między- i wewnątrzcząsteczkowe oddziaływania niekowalencyjne, które grają istotną rolę podczas tworzenia stanów szklistych. Należą do nich np. wiązania wodorowe, których obecność w tej klasie związków jest wykrywana metodami spektroskopowymi: optycznymi (FTIR), czy neutronowymi (INS).

