



Sveučilište u Zagrebu  
PRIRODOSLOVNO-MATEMATIČKI FAKULTET  
Kemijski odsjek

Božena Tokić

**MARTENZITNI PRIJELAZI DINAMIČKIH  
MOLEKULSKIH KRISTALA I NJIHOVA  
PRIMJENA**

**Kemijski seminar I**

Zagreb, 2026. godina

## Sadržaj

§ 1. UVOD.....	1
§ 2. TEORIJSKA OSNOVA I TEMELJNI POJMOVI.....	3
2.1. Fazni prijelazi u krutinama (difuzijski i nedifuzijski mehanizmi) .....	3
2.2. Karakteristike martenzitnog prijelaza.....	3
§ 3. MEHANIZMI MARTENZITNIH PRIJELAZA U MOLEKULSKIM KRISTALIMA.....	5
3.1. Strukturni mehanizam i kristalografske značajke prijelaza.....	5
3.2. Termodinamika, kinetika i mehanički odziv .....	5
3.3. Eksperimentalne metode i struktura–svojstvo korelacije .....	5
§ 4. PRIMJENE MARTENZITNIH MOLEKULSKIH KRISTALA.....	6
§ 5. AKTUALNI IZAZOVI I PERSPEKTIVE RAZVOJA .....	7
§ 6. ZAKLJUČAK .....	8
§ 7. LITERATURNI IZVORI.....	IX

## § 1. UVOD

Molekulski kristali tradicionalno se smatraju krutim i lomljivim materijalima čija je sposobnost deformacije pod djelovanjem mehaničke sile vrlo ograničena. Međutim, posljednjih godina pokazano je da određeni molekulski kristali mogu pokazivati izrazito dinamično ponašanje, reagirajući na vanjske podražaje poput temperature, svjetlosti ili mehaničkog naprezanja. Takvi materijali, poznati kao dinamički kristali, mogu prolaziti kroz kooperativne strukturne transformacije koje dovode do makroskopskih promjena oblika kristala, uključujući savijanje, uvijanje ili čak skakanje. Ova otkrića značajno su proširila tradicionalnu percepciju kristala kao neelastičnih materijala te otvorila nove mogućnosti za razvoj funkcionalnih kristalnih sustava s potencijalnom primjenom u aktuatorima, senzorima i pametnim materijalima [1].

Među različitim tipovima strukturnih transformacija u dinamičkim molekulskim kristalima, posebnu pozornost privlače martenzitni fazni prijelazi, koji se odvijaju brzo, kooperativno i bez difuzije molekula. Tijekom takvih transformacija dolazi do kolektivnog pomaka molekula i reorganizacije kristalne strukture, pri čemu kristal često zadržava dugodosežni red i kristalni integritet. Ovi prijelazi često su praćeni pojavama poput propagacije fazne fronte, nastanka novih kristalnih domena ili naglih promjena oblika kristala. Zbog svoje izrazite kooperativnosti i sposobnosti pretvorbe mikroskopskih strukturnih promjena u makroskopski mehanički odziv, martenzitni prijelazi u molekulskim kristalima danas predstavljaju jedno od ključnih područja istraživanja u razvoju dinamičkih i funkcionalnih kristalnih materijala [1].

Unatoč značajnom napretku u ovom području, još uvijek nije u potpunosti razjašnjeno koji su univerzalni strukturni čimbenici koji omogućuju martenzitne transformacije u molekulskim kristalima te kako se takvi prijelazi mogu predvidjeti i kontrolirati za dizajn funkcionalnih materijala. Stoga je razumijevanje mehanizama, strukturnih preduvjeta i eksperimentalnih obilježja martenzitnih prijelaza ključno za daljnji razvoj ovog područja.

U ovom radu prikazan je pregled martenzitnih prijelaza u dinamičkim molekulskim kristalima, s posebnim naglaskom na temeljne teorijske koncepte, strukturne mehanizme transformacije, metode

njihove eksperimentalne karakterizacije te potencijalne primjene ovih materijala u razvoju funkcionalnih kristalnih sustava.

## § 2. TEORIJSKA OSNOVA I TEMELJNI POJMOVI

Razumijevanje martenzitnih prijelaza u molekulskim kristalima zahtjeva poznavanje osnovnih koncepta faznih transformacija u krutinama. Fazni prijelazi predstavljaju promjene u strukturi i svojstvima materijala koje nastaju kao odgovor na promjene vanjskih uvjeta poput temperature, tlaka ili mehaničkog naprezanja. Ove transformacije mogu rezultirati promjenama kristalne simetrije, rasporeda atoma ili molekula unutar kristalne rešetke te često imaju značajan utjecaj na fizikalna svojstva materijala. U kontekstu kristalnih materijala, fazni prijelazi najčešće se klasificiraju prema mehanizmu kojim se odvijaju, pri čemu se razlikuju difuzijski i nedifuzijski prijelazi [1].

### 2.1. Fazni prijelazi u krutinama (difuzijski i nedifuzijski mehanizmi)

Difuzijski fazni prijelazi uključuju dugodosežno kretanje atoma ili molekula kroz kristalnu rešetku te su stoga relativno spori procesi koji zahtijevaju značajnu reorganizaciju strukture materijala. Tijekom takvih transformacija dolazi do difuzije čestica na veće udaljenosti, što omogućuje formiranje nove stabilne faze s drugačijim rasporedom u kristalnoj rešetki. Difuzijski prijelazi često su povezani s nukleacijom i rastom nove faze te se odvijaju postupno kako se nova faza širi kroz materijal. Primjeri takvih transformacija mogu se pronaći u različitim metalnim i keramičkim sustavima, gdje difuzija atoma omogućuje promjene u kemijskom sastavu ili kristalnoj strukturi.

Suprotno tome, nedifuzijski fazni prijelazi odvijaju se bez dugodosežne difuzije čestica te uključuju kooperativne i gotovo simultane pomake velikog broja atoma ili molekula unutar kristalne rešetke. Ove transformacije karakterizirane su relativno malim pomacima čestica, ali se događaju kolektivno kroz velik dio kristalne strukture. Zbog toga su takvi prijelazi često vrlo brzi i mogu rezultirati naglim promjenama fizikalnih ili mehaničkih svojstava materijala. Nedifuzijske transformacije posebno su važne u sustavima u kojima je potrebno očuvati kristalni integritet tijekom prijelaza između dviju faza, što je čest slučaj kod strukturnih transformacija u molekulskim kristalima [1].

### 2.2. Karakteristike martenzitnog prijelaza

Martenzitni prijelazi predstavljaju poseban tip nedifuzijskih faznih transformacija koje se odvijaju kooperativnim pomakom atoma ili molekula unutar kristalne rešetke. Tijekom takvog prijelaza dolazi do kolektivne reorganizacije strukture, pri čemu se formira nova faza. Transformacija se najčešće odvija

putem smične deformacije kristalne rešetke te je karakterizirana brzim promjenama strukture. U mnogim slučajevima martenzitni prijelaz započinje nukleacijom nove faze u određenoj regiji kristala, nakon čega se fazna granica propagira kroz kristal stvarajući novu strukturnu domenu [1].

U molekulskim kristalima martenzitni prijelazi često se manifestiraju kao **single-crystal-to-single-crystal (SCSC)** transformacije, ali također mogu biti popraćene nastankom domena ili **twin struktura**, što omogućuje prilagodbu kristalne rešetke nastalim deformacijama. Zbog kooperativne prirode procesa, martenzitni prijelazi često pokazuju karakteristična obilježja poput histereze, nagle promjene oblika kristala. Upravo takva sposobnost pretvorbe mikroskopskih strukturnih promjena u makroskopski mehanički odziv čini martenzitne prijelaze posebno zanimljivima u kontekstu dinamičkih molekulskih kristala i njihovih potencijalnih funkcionalnih primjena [1].

## **§ 3. MEHANIZMI MARTENZITNIH PRIJELAZA U MOLEKULSKIM KRISTALIMA**

**3.1. Strukturni mehanizam i kristalografske značajke prijelaza**

**3.2. Termodinamika, kinetika i mehanički odziv**

**3.3. Eksperimentalne metode i struktura–svojstvo korelacije**

## § 4. PRIMJENE MARTENZITNIH MOLEKULSKIH KRISTALA

Zbog sposobnosti da kooperativne strukturne promjene na molekularnoj razini pretvore u makroskopski mehanički odziv, martenzitni prijelazi u molekulkim kristalima privukli su značajan interes kao osnova za razvoj funkcionalnih materijala. Tijekom takvih transformacija kristali mogu pokazivati nagle promjene oblika, savijanje, uvijanje ili skakanje, što omogućuje njihovu primjenu kao mikroskopskih aktuatora koji pretvaraju toplinsku ili mehaničku energiju u mehanički rad [1,2]. Primjer takvog ponašanja predstavlja organski kristal heksametilbenzena, kod kojeg martenzitna transformacija dovodi do značajnih mehaničkih deformacija i generiranja sile tijekom faznog prijelaza [2]. Slični fenomeni opaženi su i u drugim organskim kristalima koji pokazuju termoodskočni efekt, pri kojem kristali tijekom transformacije naglo mijenjaju oblik ili se pomiču uslijed oslobađanja mehaničke energije [3].

Osim aktuatora, martenzitni molekulkim kristali pokazuju potencijal i u razvoju mehaničkih i termičkih senzora, jer fazna transformacija može uzrokovati nagle promjene optičkih, električnih ili mehaničkih svojstava materijala. U nekim sustavima ovi prijelazi povezani su i s pojavom feroelastičnosti ili feroelektričnosti, što otvara mogućnost razvoja pametnih memorijskih materijala i prekidača [1,4]. Ipak, njihova šira primjena još je ograničena izazovima poput stabilnosti tijekom ponovljenih ciklusa transformacije i integracije kristala u funkcionalne uređaje [1].

Unatoč značajnom potencijalu ovih materijala, njihova šira primjena još uvijek je ograničena nizom znanstvenih i tehnoloških izazova, te zahtijeva bolje razumijevanje temeljnih mehanizama transformacije i kontrolu njihovih strukturnih čimbenika.

## § 5. AKTUALNI IZAZOVI I PERSPEKTIVE RAZVOJA

Unatoč značajnom napretku u istraživanju martenzitnih prijelaza u molekulskim kristalima, razvoj ovih materijala kao funkcionalnih sustava i dalje je suočen s nekoliko važnih izazova. Jedan od ključnih problema predstavlja nedostatak pouzdanih kriterija za prediktivni dizajn kristala koji pokazuju martenzitne transformacije. Iako su identificirani određeni strukturni čimbenici koji pogoduju takvim prijelazima, poput slabih intermolekulskih interakcija i mogućnosti kooperativnih pomaka molekula, još uvijek nije moguće sa sigurnošću predvidjeti hoće li određeni kristal pokazivati martenzitni karakter transformacije [1].

Dodatni izazovi uključuju kontrolu nukleacije i propagacije fazne fronte, kao i stabilnost kristala tijekom ponovljenih ciklusa faznih transformacija. U mnogim slučajevima ponovljeni prijelazi dovode do akumulacije defekata ili pucanja kristala, što ograničava njihovu dugoročnu primjenu [1,2]. Također, većina istraživanja provodi se na pojedinačnim kristalima mikrometarskih dimenzija, pa integracija ovih materijala u funkcionalne uređaje predstavlja dodatni izazov [3].

Unatoč tim ograničenjima, martenzitni molekularni kristali predstavljaju vrlo perspektivno područje istraživanja. Daljnji napredak u razumijevanju struktura–svojstvo odnosa, kao i razvoj metoda kristalnog inženjerstva i računalnog modeliranja, mogao bi omogućiti racionalni dizajn novih dinamičkih kristalnih materijala s kontroliranim funkcionalnim svojstvima [1].

## § 6. ZAKLJUČAK

## § 7. LITERATURNI IZVORI