**Streszczenie**

Nitrozwiązki, w tym kwasy nitrobenzoesowe, stanowią bardzo ważną grupę związków chemicznych z punktu widzenia przemysłu. Wynika to stąd, iż znajdują one szerokie zastosowania przy produkcji wielu istotnych dla gospodarki materiałów, takich jak: polimery, barwniki, leki czy materiały wybuchowe. Stanowią one także intersujący obiekt badań w kontekście inżynierii krystalicznej. Jest to związane z tym, iż grupy nitrowe oddziałują z różnymi grupami funkcyjnymi poprzez oddziaływania $NO_2 \cdots X$ (gdzie X to: $NO_2$ COOH, OH $NH_2$, $CH_3$, H, π) tworząc różne syntony supramolekularne. Oddziaływania te często decydują o specyficznych właściwościach nie tylko samych kwasów nitrobenzoesowych, które występują w postaci krystalicznej, ale również wieloskładnikowych kryształów, w tym kokryształów, soli, solwatów, powstających z ich udziałem.

W niniejszej pracy przedstawione zostały wyniki badań obejmujące analizę i obliczenia teoretyczne oddziaływań międzycząsteczkowych, w szczególności powstających z udziałem grup nitrowych, w strukturach krystalicznych: (a) wieloskładnikowych kryształów z udziałem wybranych kwasów nitrobenzoesowych oraz aromatycznych zasad azotowych, zdeponowanych w bazie CSD, (b) kwasów nitrobenzoesowych podstawionych różnymi grupami funkcyjnymi ($–NO_2$, $–NH_2$, –OH oraz $-CH_3$), zdeponowanych w krystalograficznej bazie CSD oraz (c) nowo otrzymanych, wieloskładnikowych kryształów z udziałem kwasów nitrobenzoesowych oraz akrydyny/pochodnych akrydyny, tj. dwóch soli: akrydyny i kwasu 3-metylo-2-nitrobenzoesowego oraz akrydyny i kwasu 2-metylo-3-nitrobenzoesowego, soli akrydyny z kwasem 2,4-dinitrobenzoesowym (stechiometria 1:2), a także monohydratu kokryształu soli akryflawiny z kwasem 3,5-dinitrobenzoesowym (stechiometria 1:2). W ramach rozprawy doktorskiej, w strukturach analizowanych związków zidentyfikowane zostały syntony supramoleklarne, w które zaangażowane są różne grupy funkcyjne, w szczególności grupy nitrowe oraz została policzona ich energia metodami chemii kwantowej. Przeprowadzona została dyskusja otrzymanych wyników oraz zaproponowana została klasyfikacja zidentyfikowanych syntonów, w zależności od oddziaływań, w które są zaangażowane grupy nitrowe.