

mgr Hubert Cybulski  
Wydział Chemii Uniwersytetu Warszawskiego  
Pracownia Oddziaływań Międzymolekularnych

Streszczenie rozprawy doktorskiej:

## **Właściwości molekularne jako parametr diagnostyczny oddziaływań międzymolekularnych**

Promotor: prof. dr hab. Joanna Sadlej

Charakterystyka oddziaływań międzymolekularnych to jeden z najważniejszych i najbardziej interesujących tematów zarówno chemii eksperymentalnej, jak i teoretycznej.

W niniejszej pracy doktorskiej starałem się scharakteryzować trzy klasy oddziaływań międzymolekularnych. Pierwszą rozpatrywaną grupą było wiązanie wodorowe w swojej typowej formie, tj. w małych klastrach wody. Druga grupa to atypowe wiązanie dwuwodorowe, które można zapisać jako  $D-H \cdots H-A$ , gdzie A oznacza pierwiastek mniej elektrododatni, niż wodór (np. metal przejściowy, Li, Be, B), a D jest konwencjonalnym elektroujemnym pierwiastkiem, bądź elektroujemną grupą. Trzeci układ to molekuly porfiryne i porficyne z silnym wewnątrz-molekularnym wiązaniem  $H \cdots H$ , w obrębie którego następuje przeniesienie protonu. Różnorodność rozpatrywanych systemów umożliwiła staranną analizę liczonych teoretycznie właściwości jako potencjalnych parametrów oddziaływań międzymolekularnych. Uzyskane rezultaty zostały opublikowane w sześciu artykułach.

Pierwszą grupę składającą się z trzech publikacji można potraktować jako serię komplementarnych prac, opisujących właściwości małych klastrów wody. Obliczone teoretycznie stałe ekranowania i sprzężenia magnetycznego rezonansu jądrowego (NMR) oraz intensywności ramanowskie analizowano pod względem korelacji ze strukturą klastra, a także jak otoczenie molekuly, określone jako jej liczba koordynacyjna determinuje obserwowane właściwości molekularne.

Klastry wody z licznymi wiązaniami wodorowymi stanowiły również atrakcyjny model do badania zależności geometrycznych liczonych właściwości, a także wpływu wiązań wielokrotnych na ich wartości.

Temat drugi, który stanowią badania wiązań dwuwodorowych został podjęty w dwóch kolejnych pracach. Najważniejszym celem tych prac była próba odpowiedzi na pytanie, czy istnieje wyraźna i dobrze zdefiniowana różnica między wiązaniem dwuwodorowym a konwencjonalnym wiązaniem wodorowym. Szereg dimerów z molekułą  $BeH_2$  jako akceptorem protonu został wybrany do analizy zmian różnych właściwości molekularnych wraz ze wzrastającą mocą wiązania.

Ostatni artykuł dotyczy badań układów z przeniesieniem protonu. Głównym zadaniem była analiza obliczonych stałych sprzężenia i ekranowania w funkcji postępu procesu wymiany wewnętrznych protonów w molekułach porfiryne i porficyne.