

Wrocław, 10 lipiec 2018r.

STRESZCZENIE ROZPRAWY DOKTORSKIEJ

Imię i nazwisko autora pracy: mgr Katarzyna Pawlus-Skowron

Imię i nazwisko promotora pracy: dr hab. Mariusz K. Marchewka

Tytuł rozprawy: „Badania wiązań wodorowych metodami spektroskopii oscylacyjnej w świetle spolaryzowanym na zorientowanych próbkach monokrystalicznych wybranych związków organicznych”

Celem niniejszej rozprawy było możliwie jak najdokładniejsze scharakteryzowanie wiązań wodorowych występujących w kryształach: [fumaranu bis(2-aminopirydyny)] kwas fumarowy (1:1)¹, bis(4-hydroksybenzenosulfonianu) piperazyny² oraz jednowodnego wodorarsenianu (V) piperazyny³. W tym celu wykorzystano metody spektroskopii oscylacyjnej w świetle spolaryzowanym na zorientowanych próbkach monokrystalicznych oraz metody chemii kwantowej, jakimi są metody oparte na teorii funkcjonału gęstości (DFT – *ang. Density Functional Theory*).

Wykonane zostały komplety widm w świetle spolaryzowanym w podczerwieni (widma dla składowych głównych x, y, z oraz w kierunkach 30, 60, 120 i 150° od x) oraz Ramana (widma odpowiadające wszystkim składowym tensora polaryzowalności). W przypadku widm w podczerwieni zastosowana została metoda refleksyjna pomiaru, a następnie przeprowadzono transformację Kramersa – Kröniga. Intensywności pasm w widmach w podczerwieni porównane zostały z wynikami obliczeń kierunków wektorów dipolowego momentu przejścia. Dodatkowo wykonane zostały widma proszkowe dla wszystkich badanych kryształów.

Struktury krystaliczne wybranych związków znane były w literaturze, na ich podstawie przeprowadzone zostały obliczenia kwantowo – mechaniczne, metodą B3LYP6-311++G(d,p). Obejmowały one optymalizację geometrii pojedynczej cząsteczki, wysymulowanie widm oscylacyjnych, a następnie wykonanie obliczeń rozkładu energii potencjalnej (PED – *ang. Potential Energy Distribution*) i przypisania pasm. Przypisania pasm w widmach teoretycznych porównane zostały z przypisaniami pasm w widmach eksperymentalnych. Dodatkowo przeprowadzono optymalizację geometrii agregatu kilku cząsteczek oraz wykonanie analizy NBO (*ang. Natural Bond Orbitals*), w celu wyznaczenia energii stabilizacji wiązań wodorowych w omawianych związkach. Porównane zostały wyniki pomiarów eksperymentalnych z obliczeniami teoretycznymi. W niniejszej rozprawie skupiono się na analizie wiązań wodorowych, dlatego też do opisu tworzonych przez nie w strukturach krystalicznych motywów zastosowano teorię grafów.

¹ A. Ballabh, D. R. Trivedi, P. Dastidar, E. Suresh, Cryst. Eng. Comm, 4(24) (2002) 135 – 142; S. Dong, Y. Tao, X. Shen, Z. Pan, Acta Cryst. C, C69 (2013) 896 – 900

² M. K. Marchewka, A. Pietraszko, Spectrochim. Acta, Part A, 69 (2008) 312-318

³ H. S. Wilkinson, W. T. A. Harrison, Acta Crystallogr., Sect E, E63 (2007) m905-m907