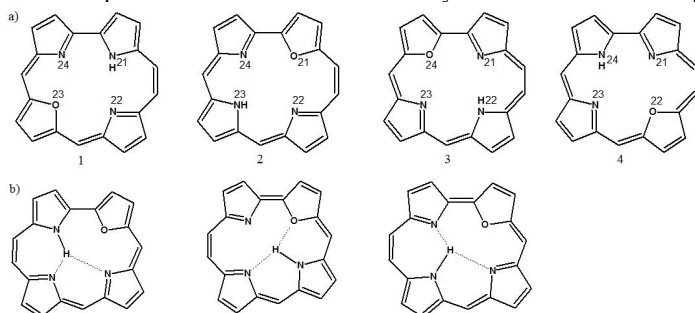


Wiązanie wodorowe jest oddziaływaniem występującym powszechnie w przyrodzie. Odpowiedzialne jest między innymi za tworzenie się struktur przestrzennych białek i kwasów nukleinowych. Bierze także udział w procesach przeniesienia protonu, będących najbardziej elementarnymi aktami reakcyjnymi o kluczowym znaczeniu w chemii, fizyce i biologii. Dokładne poznanie fizykochemii wiązania wodorowego pozwoli lepiej zrozumieć wiele złożonych procesów, takich jak zmiany konformacji biomolekuł, czy procesy samoorganizacji cząsteczek.

W badaniach nad wiązaniami wodorowymi często stosowane są prostsze niż występujące w naturze układy modelowe. Jednym z przykładów takich układów są porfiryny i ich analogi. Cechą charakterystyczną tej grupy związków jest występowanie wewnątrz cząsteczki wiązania wodorowego, którego parametry, takie jak odległość między donor-akceptorem i kąt wiązania mogą być stosunkowo łatwo zmieniane. Dzięki tej plastyczności cząsteczek porfirynoidy są bogatym źródłem informacji na temat natury wiązania wodorowego.

Proponowane w niniejszym projekcie struktury są tlenowymi analogami hemiporfirycenu (Rys.1a). Formalnie każda z czterech możliwych jednotlenowych analogów można przedstawić w postaci trzech różnych tautomerów z atomem wodoru przypisanym do jednego z trzech pozostałych atomów azotu (Rys.1b). Celem projektu jest opracowanie metody syntezy tlenowych analogów hemiporfirycenu, identyfikacja metodami eksperymentalnymi, przy wsparciu metod obliczeniowych, równowagowych form tautomerycznych oraz przeprowadzenie dyskusji nad zależnościami równowag tautomerycznych od kątów i energii wiązań wodorowych N-H-N. Przewiduje się, że proponowane struktury pozwolą rozszerzyć wiedzę na temat wiązania wodorowego, w szczególności w słabo poznanym aspekcie zależności jego energii od kątów N-H-N, a w przyszłości będzie stanowił podstawę w badaniach nad kinetykami i mechanizmami procesów transportu protonu w układach o niskiej symetrii.



Rys.1. a) Jednotlenowe analogi hemiporfirycenu. b) Możliwe formy tautomeryczne na przykładzie 24-oksahemiporfirycenu 3.