

Do wiata oddziaływa mi dzy- i wewn trzmolekularnych wprowadziłem niedawno nowe oddziaływanie, które mo e by opisane symbolem $X +H \cdots Y$ i które zostało nazwane wi zaniem wodorowym typu charge-inverted (ang. charge-inverted hydrogen bond, CIHB), z uwagi na odwrócon sytuacj (polaryzacj) w mostku $H \cdots Y$, w porównaniu do tej, która ma miejsce w przypadku klasycznych wi za wodorowych. Na podstawie formalnych definicji ró nych oddziaływa z wodorowym atomem wodoru (wi zanie diwodorowe, wodorokowe wi zanie wodorowe, wi zanie typu agostic) oraz na podstawie oblicze z wykorzystaniem metod QTAIM i HVPT pokazałem ostatnio, e CIHB istotnie stanowi nowy typ oddziaływania. Planuje si dalsze badania nad powodem ró nicy mi dzy CIHB a wi zaniem typu agostic. Póki co opisane zostały cztery dimery $R3XH \cdots YZ3$, gdzie $R=Z=H$ oraz $X=Si, Ge$ i $Y=Al, Ga$. Celem projektu jest znaczne zwi ksenie liczby znanych układów CIHB o układy z innymi, wybranymi, atomami X i Y oraz z pewnymi podstawnikami R i Z, innymi ni H. Badania te maj na celu zach cenie eksperymentalistów do do wiadczonego potwierdzenia istnienia CIHB. W celu zainspirowania potencjalnych innych naukowców do poszukiwania CIHB planuje si tak e dokładne obliczenia (state-of-the-art) ró nych eksperymentalnie mierzalnych parametrów strukturalnych i spektroskopowych dotycz cych CIHB. Niniejszy projekt ma tak e na celu znaczne rozszerzenie zakresu informacji dotycz cych ró nych układów z CIHB.

Z uwagi na to, e wi zania wodorowe typu charge-inverted (CIHB) zostały wprowadzone do wiata oddziaływa stosunkowo niedawno, ka de dalsze badania w tym kierunku, jako zawieraj ce nowe elementy poznawcze, b d pionierskie w skali wiatowej i zostan wykonane po raz pierwszy. Proponowane badania powinny znacznie rozszerzy zakres wiedzy dotycz cej natury samego wi zania, jak i wła ciwo ci układów z tego typu oddziaływaniem. Jednocze nie wzrost ilo ci zbadanych teoretycznie układów z CIHB oraz wyznaczenie dokładnych warto ci ró nego rodzaju eksperymentalnie mierzalnych wielko ci strukturalnych i spektroskopowych powinien zach ci inne grupy badawcze do pracy nad poszukiwaniem, a nast pnie do wiadczonego potwierdzeniem istnienia tego typu oddziaływania. Zdobyta wiedza mo e znacznie ułatwi pozyskiwanie danych eksperymentalnych dotycz cych układów z CIHB w fazie gazowej oraz w matrycach gazów szlachetnych a badanie wpływu rodzaju X, Y, R i Z na sił kompleksu mo e mie spore znaczenie w in ynierii materiałowej. Dalsze badania nad ró nicami mi dzy CIHB i wi zaniem typu agostic mo e pomóc we wła ciwej klasyfikacji oddziaływa i by mo e przyni si do zwi ksenia autonomii CIHB.

Obliczenia zostan wykonane w ramach przybli e DFT, MP2 oraz CCSD(T). W przypadku DFT planuje si zastosowanie kilku funkcjonałów g sto ci, w tym tak e najnowszych, posiadaj cych poprawk na oddziaływania dyspersyjne, które mog by istotne w przypadku układów z du ymi podstawnikami organicznymi. Do oblicze planuje si wykorzysta pakiet obliczeniowy Gaussian09. Bardziej szczegółowe badania dotycz ce struktury elektronowej maj zosta wykonane przy u yciu programów AIMAll i NBO6.0.