

Popularnonaukowe streszczenie projektu

Celem przedłożonego projektu badawczego jest zbadanie natury wiązania azot-tlen w grupie *N*-tlenków aromatycznych oraz możliwości tworzenia stabilnych połączeń międzycząsteczkowych z udziałem tego wiązania i różnego typu ugrupowaniami chemicznymi o charakterze kwasów Lewisa. Realizacja projektu ma na celu ustalenie syntonów molekularnych grupy *N*-tlenkowej w kryształach, charakterystykę geometryczną i energetyczną oddziaływań międzycząsteczkowych w tych syntonach oraz oszacowanie ich efektów kooperatywnych i zbadanie możliwości przeniesienia protonu przez *N*-tlenkowe wiązanie wodorowe.

Projekt, w swojej wstępnej fazie, opiera się na analizie danych bazy danych strukturalnych z Cambridge i wyników badań własnych obejmujących syntezę, krystalizację i analizę rentgenowską nowych struktur krystalicznych. Do opisu oddziaływań międzycząsteczkowych wykorzystana będzie analiza powierzchni Hirshfelda. Analiza spektroskopowa w podczerwieni substancji w stanie stałym, w porównaniu z otrzymanymi wynikami krystalograficznymi, posłuży ustaleniu charakterystycznych pasm absorpcji grupy *N*-tlenkowej oraz badaniu ich przesunięć wynikających z oddziaływań międzycząsteczkowych, stanowiąc jednocześnie narzędzie badania procesu przeniesienia protonu przez wiązania wodorowe. Wykonanie obliczeń kwantowo-chemicznych dla układów periodycznych posłuży do wyznaczania energii sieci oraz dekompozycji energii oddziaływań międzycząsteczkowych w badanych strukturach krystalicznych jak również analizy, charakterystyki i klasyfikacji oddziaływań międzycząsteczkowych grupy *N*-tlenkowej. W odniesieniu do badanych połączeń międzycząsteczkowych zostanie również przeprowadzona szczegółowa analiza zmian strukturalnych wiązania azot-tlen pod wpływem oddziaływań międzycząsteczkowych i ich opis w świetle współczesnych teorii wiązania atomowego.

Identyfikacja sił międzycząsteczkowych jest pierwszym etapem inżynierii kryształów pozwalającym na poznanie reguł samoorganizacji cząsteczek. Tematyka projektu dotyczy rozwoju wiedzy o stabilizujących oddziaływaniach międzycząsteczkowych tytułowego ugrupowania chemicznego i związana jest przede wszystkim z rozwojem badań podstawowych. W tym kontekście przedstawiony projekt jest skierowany na poszerzenie istniejącej wiedzy o oddziaływaniach międzycząsteczkowych