

Szczegółowy opis mechanizmów wiązania się atomów oraz agregacji cząsteczek w większe układy molekularne jest istotny zarówno dla chemii eksperymentalnej, jak i teoretycznej. Uzyskanie tego typu informacji pozwala nie tylko zrozumieć strukturę danego układu molekularnego oraz jego stabilność, ale także, w wielu przypadkach, zaprojektować inne pochodne o określonych własnościach. Bardzo istotną grupę stanowią tzw. słabe wiązania chemiczne (od ang. non-covalent interactions), których energie dysocjacji wynoszą od kilku do kilkudziesięciu kcal/mol. Szczególnym ich przypadkiem są tzw. homopolarne wiązania dwuwodorowe typu $XH\cdots HX$ (X – różny typ atomów układu okresowego). Aktualnie ten typ oddziaływań jest słabo rozumiany w literaturze w porównaniu do innych oddziaływań i wiązań chemicznych – ponadto, są one uważane przez większość społeczności naukowej za źródło destabilizacji (tzw. odpychania sterycznego). Jako typowe przykłady można wymienić: niższą stabilność konformacji naprzemianległej etanu (względem naprzeciwległej) czy też niższą stabilność cząsteczki cis-2-butenu (gdzie dwie grupy metylowe są w bliskim sąsiedztwie powodując istnienie oddziaływania $CH\cdots HC$) względem izomeru trans-2-butenu. Wnioskujący w ostatnim czasie uzyskał, w oparciu o obliczenia kwantowo chemiczne, wstępne wyniki świadczące o tym, że homopolarne oddziaływania dwuwodorowe mogą być stabilizujące (w przeciwieństwie do aktualnie panującej opinii). Z tego powodu, w ramach niniejszego projektu planowane są systematyczne badania natury oddziaływań $XH\cdots HX$ (w oparciu o kompaktowe podejście typu „bottom-top”) w różnych układach molekularnych – począwszy od pojedynczych prostych cząsteczek organicznych (np.: rozgałęzione węglowodory vs. ich liniowe izomery), poprzez większe materiały stanowiące potencjalne źródło wodoru cząsteczkowego (borany i wodorki grup głównych i pobocznych układu okresowego), skończywszy na makrocząsteczkach (np.: agregaty typu host-guest, lipidy, proteiny). Uzyskane wyniki dostarczą nie tylko nowej wiedzy o charakterze podstawowym na temat roli HOMO-DHI i innych wiązań dla stabilności układów o różnym poziomie złożoności (co może doprowadzić do zmiany, ugruntowanej przez lata, opinii w społeczności naukowej dotyczącej destabilizującej natury oddziaływań sterycznych), ale także wniosą wkład w lepsze zrozumienie mechanizmu odwodornienia rozważanych układów molekularnych. Wyniki te z kolei, powinny być również przydatne w poszukiwaniu lepszych materiałów będących potencjalnym źródłem wodoru cząsteczkowego. Dodatkowo, uzyskane wyniki mogą wnieść wkład w lepsze zrozumienie mechanizmów np.: fałdowania się protein (poprzez identyfikację nowych i nietypowych oddziaływań) lub tworzenia się wodoru w materii międzygwiazdnej (z kationowych form węglowodorów aromatycznych).