

## **Eksperymentalne i teoretyczne badania *quasi*-aromatycznego wiązania wodorowego**

Aleksander Filarowski

Uniwersytet Wrocławski, Wydział Chemii, ul. F. Joliot-Curie 14, 50-383 Wrocław  
e-mail: [aleksander.filarowski@chem.uni.wroc.pl](mailto:aleksander.filarowski@chem.uni.wroc.pl)

Omawianie zagadnień, które są tematem mojego wystąpienia rozpocznę od przeglądu badań nad *quasi*-aromatycznym wiązaniem wodorowym. Następnie poruszę zagadnienie związane z wpływem efektów rezonansowych i sterycznych na siłę wiązania wodorowego w *orto*-hydroksyarylowych zasadach Schiffa. Badania równowagi tautomerycznej wykonane metodami spektroskopii NMR i IR, zostaną przedstawione na przykładzie rezultatów otrzymanych dla *orto*-hydroksyarylowych ketoimin, gdzie proton mostkowy został zastąpiony deuterem. Następnie chciałbym przedyskutować rezultaty wyników badań teoretycznych otrzymanych dla związków charakteryzujących się obecnością wiązania wodorowego wspomaganego rezonansem (*Resonance Assisted Hydrogen Bond* (RAHB), na przykładzie dipirometenu) i wiązania wodorowego wspomaganego obecnością ładunku (*Charge Assisted Hydrogen Bond* (CAHB), na przykładzie dipirometanu). Ciekawym aspektem prowadzonych badań, jest zjawisko wpływu dwóch konkurencyjnych rezonansów oraz efektu sterycznego na równowagę konformacyjną w *orto*-hydroksyarylowych amidach. Zostaną także przedstawione wyniki badań równowagi pomiędzy wewnątrz- i międzycząsteczkowym wiązaniem wodorowym, a także zjawisko polimorfizmu w *orto*-hydroksy acetofenonach w różnych stanach skupienia.

Synteza oraz badania nowych połączeń mocnego chromoforu BODIPY z podstawnikiem czułym na równowagę tautomeryczną (BODIPY-Schiff i BODIPY-diketon) stanowią odrębną gałąź badawczą nad układami z wiązaniem wodorowym. Chciałbym więc przedstawić wpływ oddziaływań specyficznych na barwnik fluorescencyjny BODIPY.

Zaprezentowane rezultaty badań komplementarnych, z zastosowaniem technik eksperymetalnych i obliczeniowych, pozwoliły na dokładny opis natury oddziaływań molekularnych, oraz wyjaśnienie wpływu różnych czynników (stan skupienia, efekt steryczny, równowagi tautomeryczna i konformacyjne) na właściwości fizykochemiczne układów z wewnątrzcząsteczkowym wiązaniem wodorowym.