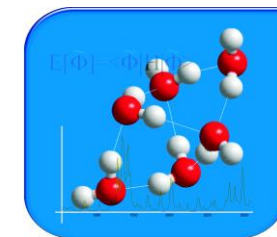


Klaster typu HXeY...HX, gdzie X, Y = F, Cl, Br, I

Dyplomant: Bartosz Dzieciot

Promotor: dr Janusz Cukras

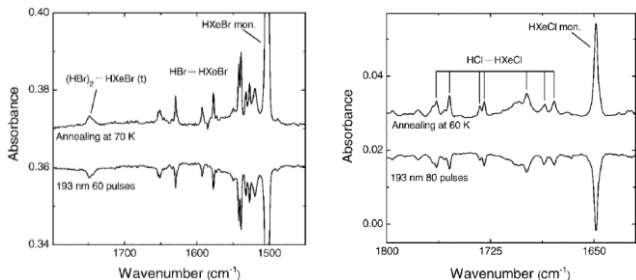


Cele pracy

1. Teoretyczne zbadanie możliwości tworzenia przez związki typu HXeY klasterów z halogenowodorami na drodze optymalizacji geometrii.
2. Teoretyczne zbadanie natury oddziaływań w uzyskanych geometriach przy użyciu metody SAPT.
3. Zbadanie zależności między naturą oddziaływań w klasterach a halogenami tworzącymi klaster.
4. Porównanie natury oddziaływań w geometriach różnych typów.
5. Zbadanie występowania w uzyskanych strukturach zjawiska przesunięcia ku fioletowi lub czerwieni częstości drgań normalnych.

Optymalizacja geometrii

- algorytm, manipulując współrzędnymi atomów, poszukuje minimum na krzywej energii potencjalnej
- po optymalizacji geometrii należy sprawdzić częstości drgań normalnych
- wykorzystana metoda: MP2



Widma w podczerwieni uzyskane przez A. Lignella i innych [1]

Zjawisko przesunięcia ku fioletowi częstości drgań normalnych

- zjawisko polega na skróceniu długości wiązania, z czym wiąże się jego wzmocnienie, a zatem zwiększenie częstości (przesunięcie ku fioletowi, ang. *blueshift*) drgań normalnych
- zjawisko to jest znacznie radsze niż zjawisko odwrotne – przesunięcie ku czerwieni (ang. *redshift*)
- dotychczas opisano w literaturze wiele klasterów pokrewnych do omawianych, w których zachodzi zjawisko przesunięcia ku fioletowi drgań normalnych wiązania H—Ng

Wnioski

- optymalizacja geometrii wskazuje, że klaster typu HXeY...HX są grupą zawierającą 5 różnych geometrycznie typów
- różne typy struktur są stabilizowane różnymi rodzajami oddziaływań, takie różnice występują też pomiędzy strukturami zawierającymi różne pierwiastki
- we wszystkich badanych strukturach zachodzi zjawisko przesunięcia ku fioletowi drgań normalnych wiązania H—Xe

Składowe energie całkowitej w metodzie SAPT

- energia elektrostatyczna:

$$E_{\text{elst}} = E_{\text{elst}}^{(10)}$$

- energia wymienna:

$$E_{\text{exch}} = E_{\text{exch}}^{(10)}$$

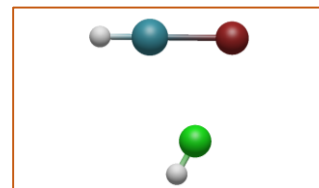
- energia indukcyjna:

$$E_{\text{ind}} = E_{\text{ind,r}}^{(20)} + E_{\text{exch-ind,r}}^{(20)} + \delta E_{\text{int,resp}}^{\text{HF}}$$

- energia dyspersyjna:

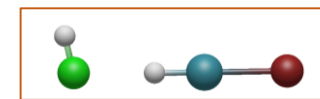
$$E_{\text{disp}} = E_{\text{disp}}^{(20)} + E_{\text{exch-disp}}^{(20)}$$

Typy uzyskanych struktur



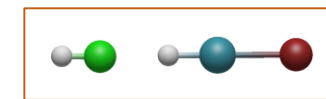
Typ 1

- stabilizacja elektrostatyczna i dyspersyjna
- niski udział energii indukcyjnej



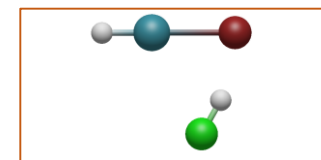
Typ 2

- najwyższe energie całkowite
- stabilizacja wszystkimi rodzajami energii



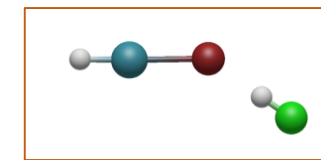
Typ 2a

- wariant typu 2
- jedynie struktury zawierające fluor



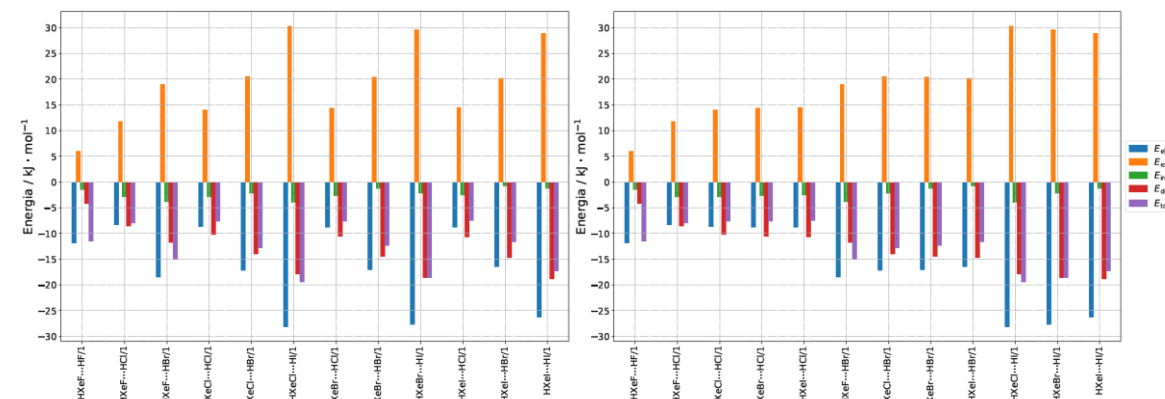
Typ 3

- najniższe energie całkowite
- najwyższy udział energii indukcyjnej



Typ 3a

- wariant typu 3
- jedynie struktury zawierające fluor



Przykładowe wykresy przedstawiające składowe energie SAPT dla geometrii typu 1