

## STRESZCZENIE

Intensywna emisja związków fluorowców do atmosfery ziemskiej jest jedną z głównych przyczyn postępującej degradacji środowiska naturalnego. Wśród tych związków szczególną rolę odgrywają chlorowcopochodne *n*-alkanów. Jest to spowodowane wielkoskalową produkcją tych substancji w procesach przemysłowych oraz ich wysoką reaktywnością chemiczną.

Dezaktywacja chloroalkanów w atmosferze ziemskiej jest przedmiotem coraz intensywniejszych badań różnych gałęzi chemii środowiska. Obecnie najlepiej zapowiadającą się metodą neutralizacji tych związków jest ich utlenianie w reakcjach rodnikowych z użyciem atomów chloru. Procesy te, w swej najistotniejszej części sprowadzają się do usunięcia atomu wodoru z cząsteczek chloroalkanu. Reakcje tego typu charakteryzują się znacznie większą szybkością aniżeli te, w których rolę utleniacza pełni np. rodnik hydroksylowy.

W pierwszej części niniejszej rozprawy przedstawiono wyniki badań teoretycznych dotyczących mechanizmu, termodynamiki oraz kinetyki rodnikowych reakcji usunięcia atomu wodoru oraz deuteru z czterech wybranych chloroalkanów tj. chloroetanu, 1,2-dichloroetanu, 2-chloropropanu i 1-chloropropanu. Przebieg modelowych procesów przeprowadzono w symulowanej próżni przy zastosowaniu zaawansowanych metod chemii kwantowej.

Wiązanie halogenowe (XB) jest jednym z trzech głównych specyficznych oddziaływań niewiążących. Pomimo jego niezaprzeczalnie wielkiego znaczenia w przyrodzie, zwłaszcza w prawidłowym funkcjonowaniu układów biologicznych jest ono najmniej zbadanym oddziaływaniem tego typu.

Druga część rozprawy dotyczyła teoretycznych badań natury oddziaływania poprzez wiązanie halogenowe, głównie z punktu widzenia jego energii. Uzyskane wyniki zostały opisane w czwartej publikacji załączonej do niniejszego przewodnika. Przedmiotem badań było sześć modelowych kompleksów o liniowej strukturze i wzorze  $O\equiv C\cdots X-Y$ .  $X-Y$  oznacza odpowiednio:  $Br-Br$ ,  $Cl-Cl$ ,  $F-F$ ,  $Br-Cl$ ,  $Br-F$  i  $Cl-F$ . W dodatku charakteryzuje je wyraźne XB. Układy otrzymane w wyniku optymalizacji struktury geometrycznej poddano procedurze rozkładu energii oddziaływania metodą LMOEDA (ang. localised molecular orbital energy decomposition). Pozwala ona na wyodrębnienie i pełną analizę wszystkich składowych całkowitej energii oddziaływania.