

Badanie miar chiralności przy pomocy sztucznie indukowanej chiralności w atomie helu

Jakub Szewczyk

Kierownik: **prof. Magdalena Pecul-Kudelska**

Opiekun: **dr Janusz Cukras**

Chiralność zwykle rozumie się jako właściwość binarną: cząsteczka może być chiralna albo nie. Równocześnie w spektroskopii dichroizmów, w przypadku indukowania chiralności w samoistnie niechiralnych układach, mówi się o zależności siły sygnału od bliskości centrum chiralnego i od właściwości tego centrum chiralnego^[1].

Można wyobrazić sobie eksperyment myślowy, w którym do niechiralnej cząsteczki zbliżamy z nieskończoności chiralny układ ładunków punktowych, indukując w tej cząsteczce chiralność w coraz większym stopniu. W takiej cząsteczce sygnały spektroskopowe, istniejące tylko dla układów chiralnych (spektroskopia dichroizmu^[2]), powinny zależeć od odległości tego układu ładunków, ponieważ indukujemy chiralność w tej cząsteczce w coraz większym stopniu.

Podobnie, taka siła sygnału spektroskopowego będzie się zmieniać wraz ze zmianą położenia jednego z ładunków w układzie, co odpowiada zmianie konfiguracji centrum chiralnego.

Przedmiotem niniejszych badań jest sprawdzenie, czy dostępne w literaturze parametry opisujące stopień chiralności korelują ze zmianami tych właściwości spektroskopowych poprzez komputerowe modelowanie układów molekularnych. Jest to istotne ze względu na stworzenie możliwości projektowania materiałów z silnymi sygnałami w spektroskopii dichroizmu, co stanowi obecnie wyzwanie.

Dla potwierdzenia powyższych hipotez przeprowadzono obliczenia w programie Dalton. Wymodelowano za pomocą teorii odpowiedzi widmo elektronowego dichroizmu kołowego atomu helu z indukowaną chiralnością przy pomocy trzech punktowych ładunków.

[1] M. Atzori et al., Validation of microscopic magnetochiral dichroism theory, *Sci. Adv.* 7
[2] M. Atzori, G. L. J. A. Rikken, C. Train, Magneto-Chiral Dichroism: A Playground for
Molecular Chemists, *Chem. Eur. J.* 2020, 26, 9784.

