THÔNG TIN TÓM TẮT VỀ NHỮNG KẾT LUẬN MỚI CỦA LUẬN ÁN TIẾN SĨ

Tên đề tài: ***Nghiên cứu lý thuyết liên kết hydro X–H···O/N (X = C, N) bằng phương pháp hóa học lượng tử***
Chuyên ngành: **Hóa lí thuyết và Hóa lí**
Mã số: **62.44.01.19**
Nghiên cứu sinh: **Nguyễn Thị Thu Trang**
Cán bộ hướng dẫn: **PGS.TS. Nguyễn Tiến Trung** và **PGS.TS. Trần Thành Huế**
Cơ sở đào tạo: Trường Đại học Sư phạm Hà Nội

Những kết luận mới của luận án

❖ Đã cung cấp thêm cơ sở khoa học để giúp hiểu rõ bản chất và phân loại liên kết hydro chuyển dời đỏ và xanh với sự tham gia của liên kết cộng hóa trị C/N–H, đó là mức độ rút ngắn liên kết và tăng tần số dao động hóa trị của liên kết C–H tham gia vào liên kết hydro C–H···O/N tỉ lệ nghịch với độ phân cực của liên kết C–H và độ bazơ pha khí của nguyên tử O/N trong monome ban đầu. Mức độ chuyển dời xanh giảm theo chiều C_{sp3}–H > C_{sp2}–H > C_{sp}–H, khi liên kết C-H tham gia vào C–H···O/N. Sự chuyển dời đỏ của liên kết hydro O–H···O/N, N–H···N/O và C–H···O/N do bản chất tĩnh điện và mức độ chuyển dời đỏ tỉ lệ thuận với độ phân cực liên kết O/N/C–H và độ bazơ của nguyên tử O/N trong monome ban đầu.

❖ Độ bền các liên kết hydro C–H···O/N và N–H···O/N đã được so sánh, định lượng một cách hệ thống và tương đối đầy đủ, đặc biệt trong hệ tương tác của các bazơ nitơ. Cụ thể, liên kết hydro C–H···O/N thuộc loại yếu với năng lượng bền hóa khoảng 3-11 $kJ.mol^{-1}$ và N–H···O/N thuộc loại trung bình với năng lượng bền hóa khoảng 14-50 $kJ.mol^{-1}$. Đáng chú ý, liên kết hydro chuyển dời đỏ C_{sp}–H···O với năng lượng bền hóa lên tới 21 $kJ.mol^{-1}$, thuộc loại liên kết hydro trung bình, được phát hiện trong hệ phức tương tác của các carbonyl và cyanide. Như vậy, nhìn chung liên kết hydro N–H···O/N bền hơn so với liên kết hydro C–H···O/N.

❖ Đã phát hiện các liên kết hydro chuyển dời xanh C–H···O/N và chuyển dời đỏ O–H···O/N, N–H···O/N và C–H···O/N trong các hệ phức nghiên cứu. Đáng chú ý, phát hiện lần đầu tiên sự đóng góp của tương tác π···π* đến độ bền các phức tương tác giữa các phân tử với CO_2. Hơn nữa, liên kết hydro chuyển dời xanh C–H···O trong phức giữa methanol và ethanol với CO_2 còn được phát hiện và- chưa được công bố trước đây.

❖ Kết quả phân tích SAPT2+ cho thấy hợp phần năng lượng tĩnh điện đóng vai trò quyết định, hai hợp phần năng lượng cảm ứng, phân tán đóng vai trò tương đương nhau và cùng đóng góp chính vào độ bền liên kết hydro và độ bền phức.

Người hướng dẫn **Đại diện tập thể hướng dẫn** (Kí và ghi rõ họ tên)	**Nghiên cứu sinh** (Kí và ghi rõ họ tên)

Nguyễn Thị Thu Trang

SUMMARY OF NEW CONCLUSIONS OF PhD THESIS

Title: ***A theoretical study of the X–H···O/N (X = C, N) hydrogen bonds using quantum chemical method***
Speciality: **Theoretical and Physical Chemistry**
Classification: **62.44.01.19**
Name of PhD Student: **Nguyen Thi Thu Trang**
Advisors: **Assoc. Prof. Dr. Nguyen Tien Trung** and **Assoc. Prof. Dr. Tran Thanh Hue**
Institution: Hanoi National University of Education

New conclusions

❖ Having provided the supplemental understandings of the origin and classification of red- or blue-shifting hydrogen bonds with C/N–H proton donors. The obtained results show that the decreasing magnitude of the C–H bond length and the increase of its stretching frequency involved in the C–H···O/N hydrogen bonds are inversely proportional to the polarization of the C–H bond and the gas phase basicity of the O/N atom in the isolated monomer. The stretching frequency blue shift of C–H bond involved in the C–H···O/N hydrogen bonds decreases in the order of C_{sp3}–H > C_{sp2}–H > C_{sp}–H. The O–H···O/N, N–H···N/O and C–H···O/N red-shifting hydrogen bonds are caused by attractive electrostatic force, and the red shifts are directly proportional to the polarity of the O/N/C–H covalent bonds and gas phase basicity of the O/N atoms in isolated monomers.

❖ The stability of the N/C–H···O/N hydrogen bonds was estimated quantitatively thoroughly, especially in the complexes of nucleobases. The C–H···O/N hydrogen bonds are weak hydrogen bonds with the individual energies in the range from 3 to 11 kJ.mol^{-1}, whereas the N–H···O/N ones belong to medium hydrogen bond with the binding energies ranging from 14 to 50 kJ.mol^{-1}. Remarkably, the C_{sp}–H···O red-shifting hydrogen bond, which is also classified as medium hydrogen bond with its binding energy up to 21 kJ.mol^{-1}, is found in the complexes of carbonyls and cyanides. As a result, the N–H···O/N hydrogen bonds are more stable than the C–H···O/N ones.

❖ The C–H···O/N blue-shifting hydrogen bonds, and the O–H···O/N, N–H···O/N and C–H···O/N red-shifting hydrogen bonds are found in the systems investigated. Notably, the $\pi\cdots\pi^*$ interaction contributing to stability of the complexes between CO_2-philic compounds and CO_2 is observed for the first time. Moreover, the C–H···O blue-shifting hydrogen bond has been detected in the complexes formed by inteactions of methanol and ethanol with CO_2, which has not been reported in the literatures.

❖ The results of the SAPT2+ analysis indicate that a dominant role of the electrostatic energy term along with an addition of the dispersion and induction energy components contributes to stabilization of hydrogen bond and complex.

Advisor(s) **PhD Student**

Nguyen Thi Thu Trang