

## SUMMARY AND PURPOSE OF THE THESIS

By self-organization of the structure, molecules with single bonds take on different rotameric forms. It is observed that rotameric freedom can be limited by non-covalent interactions, which include hydrogen bonds, mutual repulsion of free electron pairs and secondary electrostatic interactions. Additionally, taking into account the steric effects of rotating fragments, a wide spectrum of possibilities in the field of modeling the structure of molecules is obtained. It can therefore be argued that a controlled change in any of these parameters in associated molecules can qualitatively and quantitatively affect the stability of the complex they form. The purpose of the work is to prove the above thesis by comparing three publications describing the results of studies on selected derivatives of azines.

In order to better understand the main research idea, the first part of the dissertation contains a literature review of works allowing to embed the subject of the author's research in the field of supramolecular chemistry. Each of the introductory sections deals with a separate research problem, which has also been included in the author's publications.

The first of the described publications concerns derivatives of acylated diazines and the impact of the size of substituents used in them on the ability to form a complex with selected molecules. The second work, based on pyrimidine derivatives, raises the subject of competition between the formation of intra and intermolecular hydrogen bonds in response to a change in substituent in a guest molecule. The latest publication describes the results of research on the qualitative effects of association on the tautomeric equilibria of the host molecule, which shows the properties of the molecular switch.

Each publication describes a method for synthesizing subjected compounds. The research methodology was based primarily on NMR measurements and quantum-chemical calculations.

Adam Kwiatkowski

## STRESZCZENIE ROZPRAWY DOKTORSKIEJ

Na drodze samoorganizacji struktury, cząsteczki posiadające wiązania pojedyncze przyjmują różne formy rotameryczne. Obserwuje się, że swoboda rotameryczna może być ograniczana poprzez niekowalencyjne oddziaływania, do których można zaliczyć m.in. wiązania wodorowe, wzajemne odpychanie wolnych par elektronowych oraz wtórne oddziaływania elektrostatyczne. Dodatkowo, uwzględniając efekty steryczne rotujących fragmentów, otrzymuje się szerokie spektrum możliwości w zakresie modelowania struktury cząsteczek. Można zatem wysunąć tezę, że kontrolowana zmiana któregoś ze wspomnianych parametrów w cząsteczkach zasocjowanych, może jakościowo i ilościowo wpłynąć na trwałość utworzonego przez nie kompleksu. Celem pracy jest udowodnienie powyższej tezy na drodze zestawienia trzech publikacji opisujących wyniki badań wybranych pochodnych azyn.

Aby lepiej zrozumieć główną myśl badawczą, pierwsza część dysertacji zawiera literaturowy przegląd prac pozwalających osadzić przedmiot badań autora w dziedzinie chemii supramolekularnej. Każdy z podrozdziałów wstępu porusza osobny problem badawczy, który został ujęty również w publikacjach autora.

Pierwsza z opisanych publikacji dotyczy pochodnych acylowanych diazyn oraz wpływu wielkości zastosowanych w nich podstawników na zdolność do formowania kompleksu z wybranymi molekułami. Druga praca, bazując na pochodnych pirymidyny, porusza temat konkurencji pomiędzy tworzeniem wewnątrz oraz międzycząsteczkowych wiązań wodorowych w odpowiedzi na zmianę podstawnika w cząsteczce gościa. Ostatnia z publikacji opisuje wyniki badań dotyczące jakościowego wpływu asocjacji na swobodę tautomeryczną cząsteczki gospodarza, który pełni w tym układzie rolę przełącznika molekularnego.

W każdej pracy opisano metodę syntezy kluczowych związków. Metodyka badań opierała się przede wszystkim na pomiarach NMR oraz obliczeniach kwantowych.

Adam Kwiatkowski