

Streszczenie rozprawy doktorskiej pod tytułem:

## Badania oddziaływań międzymolekularnych w klastrach wody.

Autor: mgr Urszula Góra

Promotor: dr hab. Rafał Podeszwa, prof. UŚ

Przedstawiona rozprawa doktorska dotyczy badania oddziaływań międzymolekularnych w klastrach wody. Główną motywacją do przeprowadzenia prac było znalezienie najbardziej stabilnego izomeru heksameru wody.

Obliczenia energii klastrów molekularnych zazwyczaj wykonuje się wykorzystując podejście supermolekularne, które skupia się na energii całego układu. Wraz ze wzrostem wielkości molekuly takie obliczenia stają się coraz bardziej kosztowne. W przedstawionej pracy zademonstrowano alternatywną metodę obliczeniową opartą na rozwinięciu wielociałowym. Rozwinięcie to jest szybkozbieżne dla całego szeregu układów i umożliwia otrzymanie bardzo dokładnych wyników przy wykorzystaniu znacznie mniejszych zasobów obliczeniowych. Poprzez rozbicie dużych klastrów molekularnych na mniejsze podukłady oraz odpowiednie dobranie kombinacji metod obliczeniowych i baz funkcyjnych w zależności od ważkości wkładu, otrzymano wielociałowy „warstwowy protokół obliczeniowy” (SAMBA – stratified approximation many-body approach). Wykorzystując takie podejście obliczeniowe udało się uzyskać bardzo dokładne wyniki referencyjne dla izomerów heksameru wody oraz dużych klastrów tego ważnego układu, jak 16-mer i 24-mer. Takie podejście może być z powodzeniem wykorzystane również dla innych systemów.

Do precyzyjnych obliczeń własności międzycząsteczkowych niezbędny jest odpowiedni potencjał molekularny. Liczne potencjały tego typu stworzone do modelowania własności wody okazywały się za mało dokładne, głównie z powodu braku bezpośredniego uwzględnienia w nich nieaddytywnych oddziaływań trójciałowych. W związku z tym opracowano nowy trójciałowy potencjał dla wody zawierający ponadto zmodyfikowaną część dwuciałową oraz uwzględniający oddziaływania wyższych rzędów. Przy wykorzystaniu najlepszych dostępnych nam metod wykonano obliczenia dla ponad siedemdziesięciu tysięcy trymerów wody. Otrzymany potencjał był wystarczająco dokładny aby precyzyjnie przewidzieć stabilność chemiczną heksamerów oraz uzyskać bardzo dokładne wyniki dla większych klastrów wody.

Modelowanie oddziaływań wody jest przedmiotem żywego zainteresowania wielu naukowców. Inne grupy badawcze zaproponowały alternatywne rozwiązania dla przedstawionych problemów. Nasze podejście było konkurencyjne, a przedstawione prace zyskały znaczą liczbę cytowań.