Streszczenie

W niniejszej pracy alkohole alifatyczne od n-oktanolu do n-dodekanolu badane były różnymi technikami pomiarowymi i obliczeniowymi. Głównym celem było zbadanie i opisanie przedtopnienia związków z tej grupy, a także stworzenie szczegółowego opisu dla poszczególnych jego etapów. Dodatkowo, zbadane obliczeniowo zostały właściwości związane z wiązaniem wodorowym i oddziaływaniami międzyłańcuchowymi w fazie ciekłej, oraz ich wpływ na stabilizację układu. Aby zbadać makroskopowe efekty różnych etapów przedtopnienia zastosowano metodę nieliniowego efektu dielektrycznego (NDE) dla n-oktanolu, n-nonanolu, n-dekanolu, n-undekanolu i n-dodekanolu. Spektroskopia w podczerwieni (IR) zastosowana została, aby zbadać wpływ przedtopnienia na grupy OH i łańcuchy alifatyczne w n-oktanolu, n-nonanolu i n-dekanolu. W tym celu zastosowane zostały pasma markerowe opisane wcześniej w literaturze, a także zaproponowano nowe. Dla n-oktanolu i n-dekanolu zauważono, że przed przejściem fazowym ciało stałe-ciecz układ przechodzi przez dwa stany przedprzejściowe: tworzenie stanu rotacyjnego i przedtopnienie powierzchniowe. Pozostałe badane związki wykazywały wyłącznie pojawianie się przedtopnienia powierzchniowego. Do badań *in silico* wybrany został n-oktanol. W celu dokładnego opisu stanu rotacyjnego wykonane zostały symulacje metodą klasycznej dynamiki molekularnej (MD), a do opisu ruchu protonu w grupach hydroksylowych - dynamiką molekularną Cara-Parrinello (CPMD) i dynamiką molekularną z całkowaniem po trajektoriach (PIMD). Zaobserwowano wysoką zbieżność zaproponowanego wcześniej mechanizmu stanu rotacyjnego z obliczeniami. Zaproponowano również wytłumaczenie nietypowego kształtu drgań rozciągających OH w ciele stałym. Powodem tego jest przeskok pojedynczych protonów z liniowego łańcucha wiązań wodorowych pomiędzy warstwy kryształu. Szczegółowo opisano wiązania wodorowe i stabilizację łańcuchów na gruncie statycznych i dynamicznych metod obliczeniowych, które porównane zostały z eksperymentalnymi wynikami spektroskopii w podczerwieni. Opis ten wykonany został zarówno dla n-oktanolu, jak i deuterowanego n-oktanolu.