

Mgr Iwona Kosendiak

Tytuł pracy: Konformacje i fotochemia kwasu glikolowego i jego kompleksów. Badania spektroskopowe i teoretyczne.

Promotor: Prof. dr hab. Maria Wierzejewska

Promotor pomocniczy: Dr Justyna Krupa

Streszczenie pracy

Obiektem badań przeprowadzonych w ramach niniejszej pracy był kwas glikolowy (GA), jego dimery oraz kompleksy molekularne z diazotem. Kwas glikolowy został zidentyfikowany jako zanieczyszczenie troposfery pochodzenia naturalnego i przemysłowego. Z tego względu postanowiono przebadać możliwość tworzenia agregatów GA oraz jego oddziaływań z azotem stanowiącym główny składnik powietrza. Ważnym celem było określenie wpływu promieniowania elektromagnetycznego, odpowiadającego różnym zakresom widmowym, na kwas i jego kompleksy. Idea rozprawy wywodzi się z chemii atmosfery jednak zaprezentowane prace badawcze zaliczają się do badań podstawowych.

Badania eksperymentalne przeprowadzono w warunkach izolacji niskotemperaturowej sprzężonej ze spektroskopią FTIR na Wydziale Chemii Uniwersytetu Wrocławskiego lub sprzężonej ze spektroskopią Ramana w Department of Chemistry and Nanoscience Center Uniwersytetu Jyväskylä w Finlandii. Jako gazów matrycowych użyto argonu, argonu domieszkowanego azotem w stosunku $N_2:Ar$ 1:4000 a także azotu. Do badań nad dimerami kwasu glikolowego izolowanego w matrycy argonowej oraz do badań nad kompleksami z azotem wykorzystano zjawiska termiczne występujące w procesach podgrzewania matryc. Do wywołania procesów fotochemicznych użyto monochromatycznego promieniowania z zakresów bliskiej podczerwieni (NIR), światła widzialnego (VIS) a także ultrafioletu (UV).

Stanowiące wsparcie dla interpretacji wyników eksperymentalnych badania teoretyczne przeprowadzono na poziomach teorii DFT oraz MP2 z wykorzystaniem różnych baz funkcyjnych. Badania te dostarczyły cennych informacji strukturalnych i spektroskopowych o badanych układach. Wyniki obliczeń AIM umożliwiły określenie typów oddziaływań takich jak wiązania wodorowe czy oddziaływania van der Waalsa, występujące pomiędzy badanymi cząsteczkami.

Zoptymalizowano struktury dimerów GA oraz określono oddziaływania występujące pomiędzy cząsteczkami kwasu. Zidentyfikowano trzy struktury dimerów w widmach FTIR przy użyciu argonu jako gazu matrycowego.

Uzyskano i przeanalizowano widma Ramana kwasu glikolowego izolowanego w matrycy argonowej. Określono procesy izomeryzacji GA w matrycy argonowej zachodzące pod wpływem promieniowania z zakresu światła widzialnego przy użyciu spektroskopii Ramana jako systemu detekcji.

Zoptymalizowano struktury kompleksów kwasu glikolowego z diazotem oraz określono występujące w nich oddziaływania. Przy pomocy spektroskopii FTIR zidentyfikowano struktury kompleksów $\text{GA}\cdots\text{N}_2$, przebadano wpływ efektów termicznych oraz wpływ promieniowania z zakresu NIR i UV na kompleksy. Wykonano i przeanalizowano widma Ramana kompleksów $\text{GA}\cdots\text{N}_2$, a także przy użyciu tej spektroskopii określono wpływ promieniowania z zakresu światła widzialnego na kompleksy.

Zaobserwowano i opisano fotoizomeryzację i fotodekompozycję przy wzbudzeniu promieniowaniem UV kwasu glikolowego izolowanego w matrycy argonowej i azotowej. Produkty fotolizy zidentyfikowano w postaci kompleksów molekularnych aldehydu z wodą, tlenkiem i dwutlenkiem węgla oraz kompleksu wody z tlenkiem węgla.