

W kierunku lepszego zrozumienia widm NIR (popularnonaukowe streszczenie projektu badawczego)

Nawet widma NIR prostych związków są skomplikowane, zwłaszcza w porównaniu do widm MIR czy Ramana. W zakresie NIR występuje wiele pasm pochodzących od nadtonów oraz drgań kombinacyjnych. Pasma te znacznie nakładają się na siebie, wskutek czego obwiednie spektralne posiadają złożoną strukturę. Z tego powodu identyfikacja pasm, a zwłaszcza ich poprawne przypisanie jest zadaniem niezwykle trudnym. Klasyczne metody analizy widm NIR posiadają ograniczoną przydatność gdyż nie są w stanie wytłumaczyć wszystkich obserwowanych cech spektralnych. Dotychczasowa analiza widm NIR koncentrowała się głównie na przypisaniu pasm w oparciu o znajomość ich położenia. Pozostałe parametry spektralne pasm nadtonów i drgań kombinacyjnych, takie jak intensywność czy szerokość połówkowa nie były przedmiotem systematycznych badań. Jak do tej pory, nie zidentyfikowano pasm nadtonów wielu drgań o dużym znaczeniu dla biospektroskopii takich jak $C=N$ czy $C\equiv N$. Powyższe fakty świadczą o tym, że pełne zrozumienie widm NIR wymaga jeszcze wielu badań a realizacja tego projektu pozwoliłaby na znaczny postęp w tej dziedzinie.

Celem proponowanego projektu jest lepsze zrozumienie widm NIR nie tylko tych związków, które będą przedmiotem bezpośrednich badań ale także otrzymanie ogólniejszej wiedzy o tym zakresie spektralnym i prawidłowościach w nim rządzących. W proponowanym projekcie po raz pierwszy w sposób kompleksowy dokonamy analizy wszystkich parametrów spektralnych pasm nadtonów oraz drgań kombinacyjnych. Zamierzamy również dokonać identyfikacji nowych pasm, o których jeszcze brak doniesień literaturowych. Aby otrzymane wyniki miały charakter jak najbardziej ogólny, planujemy przebadać szereg związków o różnej strukturze i z różnymi grupami funkcyjnymi, w tym wiele pochodnych deuterowanych. Widma NIR, MIR i Ramana zostaną zmierzone zarówno dla czystych substancji jak i rozcieńczonych roztworów. Dla wybranych związków wykonamy również pomiary w funkcji stężenia. Pomiary te będą źródłem informacji o oddziaływaniach międzycząsteczkowych. Z widm eksperymentalnych zostaną wyznaczone parametry spektralne takie jak położenie, intensywność czy szerokość połówkowa dla pasm przejść podstawowych, nadtonów oraz drgań kombinacyjnych. Parametry te będą przedmiotem szczegółowej analizy. Stosując zaawansowane metody chemii kwantowej obliczymy anharmoniczne widma oscylacyjne dla wszystkich badanych związków oraz dokonamy teoretycznej rekonstrukcji widm NIR. Porównanie widm eksperymentalnych oraz teoretycznych powinno dostarczyć wielu istotnych informacji o strukturze i oddziaływaniach a także o anharmoniczności i sprzężeniach pomiędzy różnymi drganiami. Realizacja proponowanego projektu pozwoli na lepsze zrozumienie widm NIR, co w przyszłości może zaowocować nowymi aplikacjami w dziedzinie chemii fizycznej czy analitycznej.