

Jednym z podstawowych zadań chemii jest opracowanie procesów chemicznych pozwalających na otrzymanie nowych związków chemicznych o wymaganych właściwościach. Cel ten można zwykle osiągnąć różnymi sposobami, ale ekonomia nakazuje poszukiwania ścieżki, która jest najtańsza. Obecnie stawiane są również coraz większe wymagania w stosunku do wpływu takiego procesu na środowisko naturalne. Dlatego chemicy wciąż poszukują, również dla już opracowanych technologii chemicznych, alternatywnych metod, które byłyby tańsze i bardziej proekologiczne. Jednym ze sposobów osiągnięcia tego celu, jest zrozumienie związku pomiędzy strukturą cząsteczek chemicznych oraz mechanizmów reakcji chemicznych, w których biorą one udział.

W tym projekcie proponujemy rozwinięcie metody, która może dostarczyć nam istotnych informacji o dynamice pojedynczych cząsteczek chemicznych. Obecnie źródłem takich informacji są między innymi techniki spektroskopii wibracyjnej, takie jak technika rozpraszania Ramana. Pozycje pasm w widmach rozpraszania Ramana i ich intensywności dostarczają informacji o budowie cząsteczki. Jeśli struktura cząsteczki ulega zmianie, znajduje to bezpośrednie odzwierciedlenie w jej widmie rozpraszania Ramana, w postaci zmiany intensywności i położenia pasm. Mierząc odpowiednio często tego typu widma i obserwując jak się one zmieniają, możemy wnioskować o tym, jak przebiegają reakcje chemiczne oraz w jaki sposób cząsteczki oddziałują z otoczeniem.

Obecnie technika takich pomiarów zmian widm Ramana w czasie jest stosowana w stosunku do stosunkowo dużych ilości substancji, zawierającej ogromne ilości cząsteczek. Ponieważ w tak dużej grupie, każda cząsteczka z osobna zachowuje się odrobinę inaczej, to uzyskane w ten sposób widma pokazują jedynie obraz, który jest wynikiem uśrednienia. Więcej szczegółów może nam dostarczyć badanie każdej cząsteczki z osobna. Proponowana tutaj metodologia ma szansę dostarczyć informacji o zmianach w czasie w strukturze pojedynczej cząsteczki. W ten sposób możliwe będzie dokładniejsze zbadanie mechanizmów reakcji chemicznych, a następnie ich optymalizacja.