

# Opracowanie i zastosowanie komputerowych metod modelowania danych do celów przetwarzania i interpretacji wieloskładnikowych widm elektronowych wybranych mieszanin organicznych

Andrzej J. Kalka

Uniwersytet Jagielloński w Krakowie

Badania prowadzone dla próbek wieloskładnikowych przy zastosowaniu metod spektroskopowych wiążą się z koniecznością zmierzania się z powszechnym i na ogół dość wymagającym problemem właściwej interpretacji złożonego sygnału pomiarowego. W klasycznym ujęciu, rozwiązanie tego problemu stanowi próba fizycznej separacji poszczególnych składników analizowanej mieszaniny, umożliwiającą uzyskanie selektywnych widm zawartych w niej substancji. Jako że rozdział ten nie zawsze pozostaje jednak możliwy do przeprowadzenia, konieczne staje się niekiedy skorzystanie ze strategii alternatywnych. Te z kolei odnaleźć można sięgając po osiągnięcia względnie nowej dziedziny chemii, jaką jest chemometria.

W ramach niniejszej pracy, rozwinięte zostanie zatem zagadnienie dotyczące możliwości zastosowania chemometrycznych metod modelowania danych spektroskopowych do celów analizy i interpretacji widm zarejestrowanych dla próbek wieloskładnikowych. Główny nacisk położony zostanie w szczególności na komputerowe techniki przeszukiwania, obróbki i separacji sygnału pomiarowego, których wykorzystanie może pozwolić na odzyskanie pojedynczych widm charakteryzujących poszczególne optycznie czynne składniki badanych próbek.

Sposób użycia i wydajność wspomnianych metod zaprezentowana zostanie w oparciu o trzy rzeczywiste problemy badawcze, związane z interpretacją kilku serii złożonych widm elektronowych zmierzonych dla niemożliwych do rozdzielenia próbek związków organicznych. Problemy te obejmują kolejno: rozpoznanie właściwości spektrotermalnych wykazywanych przez mieszaninę rotameryczną *trans*-2-styrylantracenu, zbadanie zjawiska izomerii konformacyjnej w grupie cząsteczek *n*-[*trans*-(2-naftylo)-winylo]oksazoli oraz wreszcie analizę międzycząsteczkowych kompleksów typu *charge-transfer* tworzonych przez fumaronitryl.

Celem zmierzania się z zarysowanymi wyzwaniami, dla każdego z wymienionych przypadków dobrany i szczegółowo omówiony został zbiór odpowiednich algorytmów chemometrycznych, opartych na pierwotnie znanych oraz nowych, rozwiniętych w ramach niniejszej pracy technikach komputerowego modelowania danych. Dodatkowo, celem ułatwienia interpretacji pozyskanych widm, dla analizowanych układów przeprowadzone zostały liczne teoretyczne symulacje kwantowo-chemiczne, oparte na wykorzystaniu współczesnej metodologii teorii funkcjonałów gęstości (DFT), zarys i zastosowanie której także zostały pokrótce omówione w niniejszej pracy.

W dużym uproszczeniu, niniejszą rozprawę doktorską można zatem przedstawić jako swoiste wademekum obrazujące możliwości zastosowania wybranych nowoczesnych metod komputerowych do celów usprawnienia badań prowadzonych w dziedzinie chemii.

**Słowa** *Chemometria; Modelowanie danych; Przetwarzanie sygnału pomiarowego; Analiza faktorowa;*  
**kluczowe:** *Mieszaniny widmowe; Spektroskopia UV-Vis; Teoria funkcjonałów gęstości*