mgr inż. Aleksandra Woszczyk

Indukowanie i wzmacnianie segregacji w chiralnych warstwach zaadsorbowanych

Streszczenie pracy doktorskiej napisanej w Zakładzie Chemii Teoretycznej pod kierunkiem dr hab. Pawła Szabelskiego, prof. nadzw. UMCS

Spontaniczna samoorganizacja cząsteczek w warstwach zaadsorbowanych na granicy gaz/ciało stałe i ciecz/ciało stałe jest obiecującą metodą otrzymywania powierzchni nanostrukturalnych o zadanych właściwościach fizykochemicznych. W warunkach laboratoryjnych trudno jest zazwyczaj przewidzieć jakie warunki muszą być spełnione w celu otrzymania warstwy o zadanej morfologii, a w przypadku wielu współistniejących struktur powierzchniowych niemożliwym jest wcześniejsze ocenienie, która ze struktur będzie przeważać w układzie. Trudność ta powoduje, że w praktyce w celu uzyskania warstwy o założonych parametrach konieczna jest synteza kilku potencjalnych cząsteczek organicznych, mająca na celu wyłonienie z nich tej, która uformuje zadaną strukturę. Podobny problem dotyczy mieszania i segregacji w warstwach zbudowanych z dwóch lub więcej składników. W zależności od rozmiaru i kształtu cząsteczek obserwuje się tu tworzenie struktur o mieszanym składzie lub spontaniczną segregację cząsteczek o odmiennych właściwościach. Segregacja w warstwach zaadsorbowanych jest procesem zachodzącym także w przypadku cząsteczek chiralnych i prochiralnych, które w odpowiednich warunkach tworzą powierzchniowe domeny będące swoimi lustrzanymi odbiciami.

Niniejsza rozprawa doktorska dotyczy teoretycznego opisu formowania chiralnych monowarstw cząsteczkowych zaadsorbowanych na powierzchniach ciał stałych. Główny cel badań, których wyniki przedstawiono w dysertacji, obejmuje określenie wpływu czynników takich, jak: geometria cząsteczki, wielkość oddziaływań międzycząsteczkowych, obecność kierunkowych pól zewnętrznych, chiralność molekuły czy temperatura na morfologię otrzymywanych warstw molekularnych. Do realizacji wyznaczonego zadania wykorzystano technikę symulacji komputerowych za pomocą metody Monte Carlo.

Rozprawa podzielona jest na dwie części: literaturową oraz dyskusję wyników. W części literaturowej scharakteryzowano chiralne warstwy zaadsorbowane,

przedstawiono sposoby otrzymywania związków enancjomerycznie czystych, z uwzględnieniem najważniejszych metod laboratoryjnych stosowanych do rozdziału mieszanin racemicznych, a także opisano eksperymentalne i teoretyczne techniki badania chiralnych warstw zaadsorbowanych.

Dyskusję wyników rozpoczyna opis zastosowanego modelu symulacji Monte Carlo wraz z jego wariantami, zaś kolejne rozdziały dysertacji obejmują analizę uzyskanych wyników. Na podstawie przeprowadzonych symulacji MC wykazano, iż rozdział chiralny w gęstych warstwach zaadsorbowanych można uzyskać poprzez ograniczenie swobody orientacyjnej cząsteczek, przy czym możliwość jego wywołania zależy silnie od geometrii cząsteczki, szczególnie od jej kształtu i proporcji budowy. Ponadto wykazano, że separację enancjomerów można uzyskać przy użyciu czynników zewnętrznych, którym jest np. kierunkowe pole magnetyczne lub elektryczne i ustalono wartość energii oddziaływania molekuła – pole niezbędną do uzyskania rozdziału enancjomerów. Wykonane symulacje MC potwierdziły również możliwość wywołania spontanicznej separacji enancjomerów przy pomocy czynników zależnych tylko od oddziaływań międzycząsteczkowych, wykazując tym samym, że rozdział chiralny w warstwach zaadsorbowanych można uzyskać wykorzystując jedynie właściwości samej cząsteczki.

Przedstawione w rozprawie rozważania teoretyczne mogą być pomocne w rozwoju nowych technik eksperymentalnych, w których czynniki zewnętrzne wykorzystuje się do wywołania kontrolowanej segregacji powierzchniowej w warstwach zaadsorbowanych. Ponadto, zaproponowany prosty model siatkowy symulacji MC pozwala przewidzieć strukturę warstw zaadsorbowanych zbudowanych z prochiralnych cząsteczek o zróżnicowanym kształcie i dostarcza wstępnych informacji na temat doboru cząsteczki-budulca mogącej utworzyć homochiralne domeny.