



OPIS ROZPRAWY DOKTORSKIEJ

Autor rozprawy doktorskiej: Natalia Tańska

Tytuł rozprawy doktorskiej w języku polskim: Oddziaływania elektronów z cząsteczkami o znaczeniu astrochemicznym

Tytuł rozprawy w języku angielskim: Electron interactions with molecules of astrochemical importance

Język rozprawy doktorskiej: polski

Promotor rozprawy doktorskiej: Paweł Możejko

Data obrony:

Słowa kluczowe rozprawy doktorskiej w języku polskim: przekrój czynny na rozpraszanie, rozpraszanie elektronów na cząsteczkach, UKRMol+, stany rezonansowe

Słowa kluczowe rozprawy doktorskiej w języku angielskim: scattering cross section, electron scattering on molecules, UKRMol+, resonant states

Streszczenie rozprawy w języku polskim: Celem pracy jest przeanalizowanie efektywności rozpraszania elektronów przez wybrane związki o znaczeniu astrochemicznym i astrobiologicznym. Za pomocą liniowej metody transmisyjnej wyznaczono doświadczalnie absolutne całkowite przekroje czynne na rozpraszanie dla trzech pochodnych węglowodorów zawierających grupę karbonylową, tj. mrówczanu metylu, kwasu octowego i aldehydu propionowego. Ponadto, z wykorzystaniem implementacji R-macierzy UKRMol+, obliczono przekroje czynne na sprzężyste rozpraszanie elektronów dla wybranych pochodnych węglowodorów i związków aromatycznych oraz scharakteryzowano szereg stanów rezonansowych, które mogą wpływać na efektywność reakcji zachodzących w przestrzeni kosmicznej.

Streszczenie rozprawy w języku angielskim: The aim of this study is to analyse the efficiency of electron scattering by selected compounds of astrochemical and astrobiological relevance. Using the linear transmission method, we experimentally determined the absolute total electron-scattering cross sections for three carbonyl-containing hydrocarbon derivatives —methyl formate, acetic acid and propionaldehyde. Furthermore, employing the UKRMol+ R-matrix implementation, we calculated electron-scattering elastic cross sections for selected hydrocarbon derivatives and aromatic compounds, and characterised a number of resonance states that may influence the efficiency of reactions occurring in space.