

Dwutlenek węgla w próżni spektrometru

27 sierpnia 2017

Czy uda się wygiąć w łuk cząsteczkę dwutlenku węgla przy pomocy atomów metali, tak aby przekształcić ją w coś chemicznie użytecznego? I jak wpłynąć na gaz, by chętniej ulegał przemianom chemicznym? Badania nad CO₂, a także analizę struktury białek – takich jak enzymy trawienne trzustki, umożliwia technika analityczna zwana spektrometrią mas.

„Techniki spektrometrii mas pozwalają analizować strukturę związków organicznych i badać ich reaktywność w fazie gazowej” – tłumaczy dr Kacper Błaziak z Instytutu Chemii Organicznej PAN, tegoroczny laureat stypendium START Fundacji na rzecz Nauki Polskiej.

Badacz wykorzystuje metody chemii kwantowej, żeby zrozumieć mechanizm przebiegu reakcji chemicznych. Ich zrozumienie jest ważne dla procesu syntezy organicznej nowych substancji chemicznych. Aby otrzymywać nowe struktury, które mogą mieć pozytywny wpływ na nasze zdrowie, naukowcy muszą znać mechanizmy ich powstawania. Badania podstawowe pozwalają zrozumieć, jak poszczególne cząsteczki będą się zachowywać w połączeniu z innymi reagentami. Pozwoli to kontrolować ich zachowanie i wpływać na przebieg zdarzeń chemicznych w kolbie laboratoryjnej. Dzięki uzyskanej wiedzy można efektywnie i w sposób przewidywalny otrzymywać substancje o potencjalnej aktywności.

We współpracy z dr. Anetą Jezierską i dr. Jarosławem Pankiem z Uniwersytetu Wrocławskiego stypendysta FNP prowadzi badania nad strukturami, zawierającymi liczne wewnątrzcząsteczkowe wiązania wodorowe. Taką budowę ma na przykład trypsyna – enzym trawienny trzustki. W jednym ze wspólnych projektów z prof. Renato Zenobim z Politechniki w Zurychu, polscy naukowcy będą

analizować na drodze symulacji komputerowych właściwości oraz struktury białek o skomplikowanej budowie.

„Techniki eksperymentalne spektrometrii mas pozwalają przenieść wybrane białka ze środowiska wodnego w próżnię spektrometru. Izolowane cząsteczki znajdujące się w fazie gazowej można więc analizować z punktu widzenia ich masy, budowy i reaktywności. Wszystkie informacje zebrane w wyniku pomiarów są porównywane z modelami teoretycznymi tworzonymi w oparciu o zaawansowane symulacje chemii kwantowej. W wyniku tych badań możliwe staje się dokładne poznanie kształtu oraz parametrów fizykochemicznych bio-molekuł, co znacznie przybliży nas do zrozumienia ich złożonej funkcji jaką pełnią w organizmach żywych” – mówi dr Błaziak.

Stypendysta przebywa na stażu na Uniwersytecie w Oslo w Norwegii. W ramach prowadzonego tam projektu naukowego zajmuje się badaniami dotyczącymi cząsteczki dwutlenku węgla – wszechobecnego związku, który stał się poważnym wyzwaniem naukowców z całego świata na przestrzeni ostatniej dekady.

„W próżni spektrometru wywołuje zderzenia pomiędzy cząsteczkami dwutlenku węgla a anionami metali takimi jak: tytan, żelazo, cynk, miedź itp. Próbuje znaleźć odpowiedź na pytanie, które z katalitycznych centrów metalicznych najefektywniej aktywuje liniowe CO₂. Atomy metali potrafią wygiąć cząsteczkę w łuk, a tym samym zwiększyć jej potencjał reakcyjny. Chcemy zrozumieć na poziomie molekularnym, analizując strukturę elektronową atomów, ich zachowanie w trakcie reakcji chemicznych. A w przyszłości – przedstawić potencjalne sposoby przekształcenia dwutlenku węgla w inne złożone struktury chemiczne – bardziej użyteczne z punktu widzenia naszych codziennych potrzeb” – zapowiada dr Błaziak.

Jak zaznacza badacz, podobne eksperymenty można prowadzić w Polsce, nie brakuje infrastruktury badawczej, spektrometrów, wiedzy, doświadczenia i zasobów komputerowych do symulacji zaobserwowanych przemian chemicznych. Staż jednak jest dla

niego bardzo ważny, ponieważ pozwala poznać inną myśl naukową, nowe sposoby pracy, umożliwia kontakt z ludźmi o innej kulturze, doświadczeniu i światopoglądzie, także – naukowym.

Autorstwo: Karolina Duszczyk

Źródło: NaukawPolsce.pl