

# **Temat: „Właściwości fizyczne l-alaniny jako elementu biosensora promieniowania jonizującego”.**

**Autor: Grzegorz Cieřlik**

## **Streszczenie**

W pracy badano l-alaninę w postaci krystalicznej oraz w roztworze wodnym, która stanowiła element czynny biosensora (bioczujnika) promieniowania jonizującego. Uzyskane wyniki pomiarów widm EPR dla postaci krystalicznej oraz widm  $^1\text{H}$  NMR dla roztworu wodnego, uprzednio poddanych działaniu promieniowania jonizującego wskazują, iż l-alanina jest dobrym detektorem promieniowania jonizującego, ze względu na powstałe produkty jonizacji. Zastosowana w pracy metoda  $^1\text{H}$  NMR do analizy napromienionych wodnych roztworów l-alaniny, wykazała występowanie kwasu pirogronowego jako produktu radiolizy. Ponadto eksperyment ten wnosi informacje o modelowym środowisku komórkowym poddanym działaniu promieniowania jonizującego. Zagadnienie to jest szczególnie ważne z punktu widzenia fizjologii organizmu ludzkiego leczonego radioterapią onkologiczną lub narażonego na promieniowanie jonizujące np. wśród pracowników instalacji jądrowych, personelu medycznego czy astronautów.

Z punktu widzenia zastosowań l-alaniny na potrzeby detekcji i pomiaru dawki promieniowania jonizującego, zasadnym jest scharakteryzowanie właściwości fizycznych, takich jak struktura geometryczna i właściwości spektroskopowe molekuł. W tym celu zastosowano złożone modele molekularne: ONIOM, CPCM i IEF-PCM oraz zaawansowane matematycznie metody obliczeniowe chemii kwantowej: HF, DFT i MP2, w połączeniu z dedykowanymi do tego typu obliczeń bazami funkcji: 6-31++g(d,p), aug-cc-pVTZ-J, pcJ-n, EPR-III, IGLO-III. Uzyskane wyniki obliczeń stanowią uzupełnienie dotychczasowej wiedzy w dziedzinie spektroskopii EPR rodników l-alaniny oraz pozwalają na symulację widm i opis fizycznych przyczyn ich powstawania dla poszczególnych struktur rodników R1, R2, R3 l-alaniny, co nie jest możliwe w przypadku eksperymentu ze względu na polimorfizm rodnikowy w objętości czynnej biosensora alaninowego. Również wyniki obliczeń dla modeli molekularnych l-alaniny i kwasu pirogronowego w roztworze wodnym stanowią uzupełnienie dotychczasowej wiedzy oraz potwierdzają zgodność zastosowanych modeli i metod obliczeniowych, z danymi uzyskanymi doświadczalnie na podstawie widm  $^1\text{H}$  NMR. Rozszerzeniem badań są symulacje widm  $^1\text{H}$  NMR, które pozwalają na opis fizycznych przyczyn powstawania widma doświadczalnego oraz obliczenia parametrów spektroskopowych niemożliwych do wyznaczenia doświadczalnie.

