

Wykorzystanie teorii funkcjonału gęstości i teorii odpowiedzi w modelowaniu widma dichroizmu magneto-chiralnego fenyloalaniny

Mikołaj Piekarek

Kierownik: **dr Janusz Cukras**

Już w XIX w. zaobserwowano, że niektóre ośrodki skręcają płaszczyznę światła spolaryzowanego, a inne wykazują ten efekt po umieszczeniu ich w zewnętrznym polu magnetycznym [1]. Pierwszy z efektów wiąże się z obecnością ośrodka chiralnego, natomiast drugi z obecnością pola magnetycznego. Rozwój mechaniki kwantowej pozwolił na podanie powiązań pomiędzy obecnością tych czynników i efektami optycznymi na poziomie opisu struktury elektronowej cząsteczek. Z czasem zaczęto rozważania nad zjawiskiem, w którym obecne byłyby oba te czynniki, ale użyte światło byłoby niespolaryzowane. Zjawisko nazwano dichroizmem magneto-chiralnym. Pod koniec XX w. udało się opisać to zjawisko teoretycznie i przeprowadzono eksperyment, w którym je zaobserwowano [2]. Ze względu na trudności eksperymentalne, zarówno ze strony przygotowania badanego materiału jak i samego pomiaru, raporty odnośnie tego efektu i możliwości jego zastosowania są ograniczone do kilku publikacji [3].

W tej pracy pokazano jak narzędzia chemii teoretycznej i obliczeniowej pełnią funkcję wspomagającą dla eksperymentu, to jest wskazanie układów, w których efekt będzie wyraźnie obserwowany i wymodelowanie widma, które będzie odniesieniem dla eksperymentu. Celem pracy jest stworzenie protokołu obliczeniowego, który będzie się charakteryzował prostotą użycia i będzie wymagał zasobów obliczeniowych nieprzekraczających możliwości użytkowników. Ze względu na obserwowaną czystość enancjomeryczną aminokwasów, ich powszechność w układach biologicznych i stosunkowo prostą strukturę zdecydowano się na wymodelowanie widma dichroizmu magneto-chiralnego dla fenyloalaniny. Pierwszym etapem jest znalezienie konformerów, które dają niezaniechany wkład do widma. W tym celu znaleziono ogólnodostępne biblioteki cząsteczek i zoptymalizowano ich geometrię. Następnie wymodelowano widmo. Ze względu na stopień skomplikowania formalizmu obliczeniowego przedyskutowano możliwość podzielenia widma na mniejsze zakresy, a także użycie teorii funkcjonału gęstości, jako niedrożej metody uwzględniającej korelację elektronową. Przedyskutowano również wielkość bazy funkcyjnej, która pozwoli na otrzymanie jakościowo dobrych wyników, a jednocześnie nie zwiększy znacznie zasobów obliczeniowych.

Literatura:

- [1] G. H. Wagnire, On Chirality and the Universal Asymmetry, Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim, Germany, 2007.
- [2] G. L. J. A. Rikken, E. Raupach, Nature 1997, 390, 493–494.
- [3] G. Kopnov, G. L. J. A. Rikken, Rev. Sci. Instrum. 2014, 85, 053106.