

**Od teorii do eksperymentu - czyli wpływ reorganizacji
wewnątrz- i międzycząsteczkowej na właściwości
cząsteczek w mikro- i makroskali**



Wrocław 2021

Plan obrad

**9.00-9.15 – oficjalne otwarcie seminarium- Pan Dziekan Wydziału Chemii UWr.
dr hab. Sławomir Berski Prof. UWr.**

9.15-9.45. – wykład 1 - Prof. dr hab. Adam Jezierski (Uniwersytet Wrocławski)

Tytuł wykładu: „Fascynująca chemia gleby”

9.45-10.15 – wykład 2 – Prof. dr hab. inż. Marcin Łukaszewicz (Uniwersytet Wrocławski)

Tytuł wykładu: „Przyszłość zielonej chemii”.

10.15-10.30 – wykład 3 – mgr Kamil Wojtkowiak (Uniwersytet Wrocławski)

Tytuł wykładu: „Algorytmy rozpoznawania struktury drugorzędowej – od diagramu Ramachandrana do białkowych pól siłowych”.

10.30-11.00 – przerwa kawowa

**11.00-11.30 – wykład 4 – dr hab. inż. Paula Gawryszewska-Wilczyńska Prof. UWr.
(Uniwersytet Wrocławski)**

Tytuł wykładu: „Modyfikacje struktury a wydajność kwantowa emisji w chelatach lantanowców”.

11.30-12.00 – wykład 5 – dr hab. inż. Elżbieta Wojaczyńska Prof. PWr. (Politechnika Wrocławska)

Tytuł wykładu: „Synteza asymetryczna – o spotkaniach eksperymentatorów z teoretykami”.

12.00-12.30 – wykład 6 – dr hab. inż. Agnieszka Adamczyk-Woźniak Prof. PW (Politechnika Warszawska)

Tytuł wykładu: „Wpływ grupy formylowej na strukturę i aktywność mikrobiologiczną związków fenylboronowych”.

12.30 – 12.45 – wykład 7 – mgr Michał Pocheć (Uniwersytet Wrocławski)

Tytuł wykładu: „Badanie zjawiska przedtopnienia w alkoholach metodą Nieliniowego Efektu Dielektrycznego”

12.45-14.00 – przerwa obiadowa

14.00-14.30 – wykład 8 – Prof. dr hab. Anna Trzeciak (Uniwersytet Wrocławski)

Tytuł wykładu: „Jak zaprojektować dobry katalizator?”

14.30-15.00 – wykład 9 – dr hab. Maciej Witwicki (Uniwersytet Wrocławski)

Tytuł wykładu: „Badania właściwości magnetycznych rodników z wykorzystaniem spektroskopii EPR oraz modelowania molekularnego”.

15.00-15.30 – wykład 10 – dr hab. inż. Bartłomiej Szyja Prof. PWr (Politechnika Wrocławska)

Tytuł wykładu: „Kierowanie syntezą hierarchicznych zeolitów na przykładzie nanowarstwowego MFI i nanoigieł MEL”.

15.30-15.45 – wykład 11 – mgr Agnieszka Staśkiewicz (Politechnika Wrocławska)

Tytuł wykładu: „Projektowanie i synteza cyklicznych analogów oksytocyny”.

15.45-16.15 – przerwa kawowa

16.15-16.45 – wykład 12 – dr n. med. Maciej Szymczak (Uniwersytet Medyczny)

Tytuł wykładu: „Jak dożyć 100 lat”.

16.45-17.15 – wykład 13 – dr Przemysław Dopieralski (Uniwersytet Wrocławski)

Tytuł wykładu: „Badania dynamiką molekularną ab initio wpływu oddziaływań międzycząsteczkowych na indukowaną mechaniczną siłą rozciągającą reaktywność disiarczków”.

17.15-17.30 – wykład 14 – dr Andrii Shyichuk (Uniwersytet Wrocławski)

Tytuł wykładu: „Pułapki elektronowe w $\text{Lu}_2\text{O}_3\text{:Hf}$ ”.

17.30-17.45 – wykład 15 – mgr Beata Kizior (Politechnika Wrocławska)

Tytuł wykładu: „Mikrosolwatacja histydyny - badanie oddziaływań międzycząsteczkowych z wykorzystaniem metod AIM i SAPT”.

17.45-18.00 – przerwa kawowa

18.00-19.00 – Warsztaty Dokowania Molekularnego: lic. Kamil Raczyński

Kurs Dockingu (dokowanie ligand-białko)

19.00 – zamknięcie obrad i podsumowanie spotkania

Fascynująca chemia gleby

Adam Jezierski

adam.jezierski@chem.uni.wroc.pl

Uniwersytet Wrocławski, Wydział Chemii, ul. F. Joliot-Curie 14, 50383 Wrocław

Abstrakt

To see a World in a grain of sand... (William Blake)

Zobaczyć Świat w ziarenku piasku...

Gleba jest wieloskładnikowym, wielofazowym układem mineralno-organicznym, działającym z niezbędnym udziałem żywych organizmów. Ocenia się, że ilość związków węgla w glebie kilkakrotnie przewyższa zarówno ilość związków węgla w atmosferze, jak i węgla zawartego w organizmach żywych. Gleba jest istotnym składnikiem ekosystemów, zarówno naturalnych, jak i powstałych z udziałem człowieka. Od tysiącleci ludzkość starała się wpłynąć na urodzajność gleb stosując nawożenie oraz różne mechaniczne sposoby uprawy. Skutki były różne – również negatywne. Wymienić można zbyt obfite stosowanie nawozów sztucznych (przede wszystkim azotanów), likwidację górnej, najbardziej urodzajnej warstwy gleby poprzez rabunkową eksploatację i wypalanie resztek suchych roślin, skażenie gleb pestycydami i metalami ciężkimi. Początki racjonalnej chemii gleby sięgają pierwszych lat XIX wieku. Zaczęto badać skład pierwiastkowy, kwasowość roztworów glebowych, przemiany materiału organicznego w glebach. Zwrócono uwagę na fundamentalny fakt, że proces glebotwórczy wymaga zarówno tworzenia nowych substancji organicznych, jak i równoległego wietrzenia materiału skalnego, przy czym oba te procesy zdają wspomagać się wzajemnie. Jakób Natanson w podręczniku chemii organicznej z 1857 roku pisze o „materii próchnowej”, „kwasach ulminowym, huminowym i geinowym”, a także o „najciemniejszych w kolorze huminie i ulminie” [1]. Wiek XX dostarczył nowych narzędzi badawczych; chemia, a właściwie fizykochemia gleby stała się „fascynująca” – jak w tytule, z kilku powodów: 1. Powstawanie glebowej materii organicznej, a zwłaszcza aktywnego kompleksu organiczno-ilastego jest procesem, na który można wpływać, a budowa tego kompleksu jest niezwykle interesująca (w aspekcie strukturalnym) i ma podstawowe znaczenie dla prawidłowego działania gleby; 2. Zanieczyszczenie gleb i ich degradacja (m.in. erozja) na wielu obszarach świata doprowadziły do katastrofalnych skutków, zarówno ekologicznych, jak i ekonomicznych. Pojawiły się jednak możliwości ratowania zagrożonych ekosystemów, wymagające najwyższej próby warsztatu naukowego i technologicznego, działań

skomplikowanych, trudnych i kosztownych; 3. Wiek XXI stawia szereg nowych wyzwań – ograniczenia stosowania nawozów sztucznych, co można osiągnąć np. przez kontrolowane wbudowanie organicznych związków azotu w strukturę kwasów huminowych; intensywne, ale nie rabunkowe, wykorzystanie stale malejących zasobów urodzajnych gleb niezbędnych do wyżywienia rosnącej ludności świata, uczynienia z gleb uprawnych systemów w pełni odnawialnych.

Oto kilka wybranych przykładów możliwości rozwiązania wskazanych wyżej problemów:

Ad 1. W naturalnej syntezie związków huminowych istotną rolę odgrywają wolne rodniki, zwłaszcza typu semichinonowego. Istnieje szereg czynników wpływających na stężenie i aktywność tych rodników, m.in. pH oraz oddziaływania z jonami metali o właściwościach red-ox; laboratoryjnym sposobem obserwacji tych efektów jest kontrolowany proces kompostowania [2, 3]. Jednym ze sposobów opisu skomplikowanej struktury związków huminowych jest geometria fraktalna [4].

Ad 2. Substancje huminowe działają jak ligandy wielokoordynacyjne w stosunku do metali ciężkich [3]; możliwa jest dezaktywacja toksycznych pestycydów wiązanych przez te substancje o specyficznej, możliwej do regulowania, strukturze [5].

Ad 3. W struktury substancji huminowych mogą włączać się organiczne związki azotu, np. aminokwasy [6, 7], co sprzyja żyzności gleby i nie powoduje konieczności użycia nadmiernych ilości nawozów sztucznych.

Literatura:

- [1] Jakób Natanson, Krótki rys chemii organicznej ze szczególnym względem na rolnictwo, technologię i medycynę, Warszawa 1857.
- [2] Jezierski, A.; Czechowski, F.; Jerzykiewicz, M.; Chen, Y.; Drozd, J. *Spectrochim. Acta A* 2000, 56, 379-385.
- [3] Jerzykiewicz, M.; Jezierski, A.; Czechowski, F.; Drozd, J. *Organic Geochem.* 2002, 33, 265-268.
- [4] Soil Physical Chemistry, D. L. Sparks, Ed., CRC Press, 1998, 306-310.
- [5] Soil Pollution – Processes and Dynamics, B. Yaron, R. Calvet, R. Prost, Eds., Springer, 1996.
- [6] Szajdak, L.; Jezierski, A.; Cabrera, M.L. *Organic Geochem.* 2003, 34, 393-700.
- [7] Szajdak, L.W.; Jezierski, A.; Wegner, K.; Meysner, T.; Szczepański, M. *Molecules* 2020, 25, 2587-2614.

Przyszłość zielonej chemii

Marcin Łukaszewicz

marcin.lukaszewicz@uwr.edu.pl

Uniwersytet Wrocławski, Wydział Biotechnologii, ul. F. Joliot-Curie 14a, 50-383 Wrocław

Abstrakt

Złoża ropy naftowej i gazu ziemnego na ziemi są ograniczone, dlatego też technologie oparte na odnawialnych surowcach wyznaczają podstawę przyszłości przemysłu. Holistyczna koncepcja biorafinerii (fermentacja biomasy roślinnej z udziałem mikroorganizmów) o zamkniętym obiegu (*zero waste*) prowadzi do otrzymywania wielofunkcyjnych związków o wysokiej wartości użytkowej. Izolacja odpowiednich szczepów z gatunku *Bacillus subtilis*, pozwala na otrzymywanie produktów o zróżnicowanych właściwościach, biopolimery: lewan (polifruktan), kwas poli- γ -glutaminowy oraz substancję amfifilową: surfaktynę. Surfaktyna to lipopeptyd składający się z pierścienia aminokwasowego oraz kwasów tłuszczowych. Biorąc pod uwagę ilość aminokwasów białkowych, ich konfigurację, konformację, a także ilość atomów węgla i rozgałęzienie łańcucha sprawia, że uzyskujemy grupę związków mogących różnić się profilem działania i zastosowaniem. Biopolimery natomiast różnią się masą cząsteczkową, stopniem rozgałęzienia, rozkładem masy, krytycznym stężeniem agregacyjnym. Zróżnicowana architektura strukturalna prowadzi do tworzenia się agregatów - nośników (*soft nanoparticles*) o unikalnych właściwościach, mających zdolność do enkapsulowania i transportowania leków czy substancji aktywnych do miejsc docelowych. Zrozumienie związku między strukturą chemiczną, tworzeniem agregatów a ich właściwościami przyczynia się do określenia wzajemnych korelacji. Nanonośniki są coraz częściej elementem formułacji kosmetycznych i farmaceutycznych. Substancje aktywne docierają do określonego miejsca w formie niezmienionej dzięki czemu ich właściwości są zachowane. Mocna rozwinięta powierzchnia agregatów sprzyja zwiększonej aktywności, co często wykorzystywane jest w nowoczesnych terapiach leczniczych. Komórki rakowe charakteryzuje większą ilość domen lipidowych, odpowiednia struktura może prowadzić do ich zaburzenia, a tym samym do śmierci komórki nowotworowej.

Algorytmy rozpoznawania struktury drugorzędowej – od diagramu Ramachandrana do białkowych pól siłowych

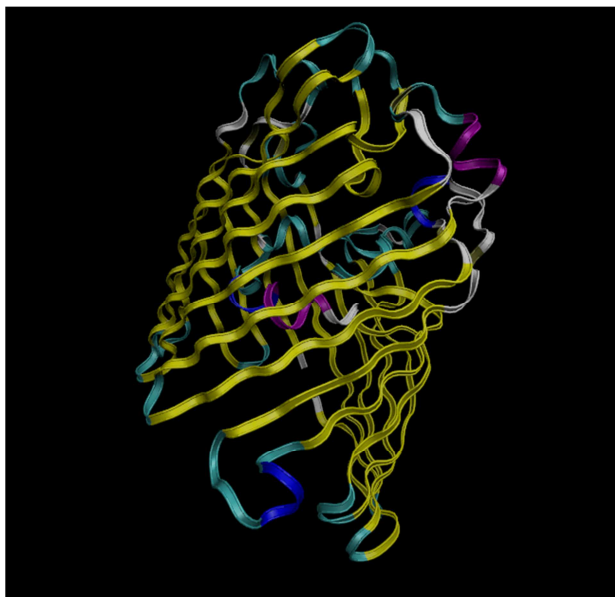
Kamil Wojtkowiak

kamil.wojtkowiak@chem.uni.wroc.pl

Uniwersytet Wrocławski, Wydział Chemii, ul. F. Joliot-Curie 14, 50-383 Wrocław, Polska

Abstrakt

Odpowiednie przypisanie struktury drugorzędowej fragmentom białka stanowi kluczowy krok, ażeby prawidłowo rozpoznać jego strukturę trzeciorzędową. Z kolei znajomość struktury trzeciorzędowej pozwala na rozpoczęcie badań dotyczących sposobów oddziaływania na takie białko, np.: projektowanie leków. Łańcuch aminokwasowy tworzący (razem z niebiałkowymi kofaktorami) białko jest z formalnego punktu widzenia długą cząsteczką (polipeptydem) o bardzo skomplikowanej konformacji. Mianem *struktury drugorzędowej* określa się lokalną konformację nici polipeptydowej. Konformację szkieletu białka, czyli ciągu atomów $\dots\text{-N-C}\alpha\text{-C(=O)-N-C}\alpha\text{-C(=O)-N-C}\alpha\text{-C(=O)-}\dots$, można zdefiniować za pomocą tylko trzech kątów torsyjnych dla każdego aminokwasu: ω , ϕ oraz ψ , obejmujących odpowiednio następujące tetrazy atomów: $\omega(\text{C}\alpha_{i-1}\text{-C}_{i-1}\text{-N-C}\alpha_i)$, $\phi(\text{C}_{i-1}\text{-N-C}\alpha_i\text{-C}_i)$, $\psi(\text{N-C}\alpha_i\text{-C}_i\text{-N}_{i+1})$. Z uwagi na rezonansowe usztywnienie wiązania peptydowego kąt ω jest zwykle bliski 180° , więc do opisu konformacji wystarczą po dwa parametry dla każdej reszty aminokwasowej. Oznaczenie ich w kartezjańskim układzie współrzędnych (ϕ, ψ) to idea oryginalnych diagramów Ramachandrana [1], powszechnie używanych do dziś np.: dla szybkiej oceny jakości rentgenograficznej struktury białkowej, lub do poprawy działania klasycznych pól siłowych (CHARMM – CMAP). Jednak istnieją też bardziej zaawansowane algorytmy przypisania struktury drugorzędowej, które opierają się na innych parametrach, takie jak: metoda DSSP [2] bazująca na sieci wiązań wodorowych tworzonych przez łańcuch główny oraz nowsza metoda, tzw. STRIDE [3], która do przypisywania struktury drugorzędowej wykorzystuje kryterium wiązań wodorowych, jak i wartości kątów torsyjnych przyjmowanych przez rdzeń białkowy. Prezentacja przedstawi te algorytmy na przykładach kilku literaturowych struktur i przybliży różne sposoby ich wykorzystania do np. wizualizacji dużych białek.



Rysunek 1. Struktura drugorzędowa poriny z bakterii *E.coli* (opracowanie własne na podstawie depozycji PDB o kodzie 4XXJ).



Rysunek 2. Struktura drugorzędowa bakteriorodopsyny z *Halobacterium Salinarum* (opracowanie własne na podstawie depozycji PDB o kodzie 2ZFG).

Literatura:

- [1] Ramachandran, G.N.; Ramakrishnan, C.; Sasisekharan, V. Stereochemistry of polypeptide chain configurations. *J. Mol. Biol.* 1963, 7, 95–99.
- [2] Kabsch W.; Sander, C. Dictionary of protein secondary structure: pattern recognition of hydrogen-bonded and geometrical features. *Biopolymers* 1983, 22, 2577–2637.
- [3] Frishman, D.; Argos, P. Knowledge-based protein secondary structure assignment. *Proteins* 1995, 23, 566–579.

Modyfikacje struktury a wydajność kwantowa emisji w chelatach lantanowców

Yen H. Pham^a, Ewa Kasprzycka^a, Viktor A. Trush^b, Albano N. Carneiro^c, Maria Korabik^a, Oscar L. Malta^d, Vladimir M. Amirkhanov^b, Paula Gawryszewska^{*a}

^a Faculty of Chemistry, University of Wrocław, 14 F. Joliot-Curie Str., 50-383 Wrocław, Poland. E-mail: paula.gawryszewska@chem.uni.wroc.pl.

^b Department of Chemistry, Kyiv National Taras Shevchenko University, Volodymyrska str. 64, Kyiv 01601, Ukraine.

^c Physics Department and CICECO-Aveiro Institute of Materials, University of Aveiro, Campus Universitário de Santiago, 3810-193 Aveiro, Portugal.

^d Departamento de Química Fundamental, Universidade Federal de Pernambuco, Cidade Universitária, 50740-560 Recife, Brazil.

Związki koordynacyjne lantanowców (Ln^{3+}) znajdują się w centrum zainteresowania ze względu na interesujące właściwości luminescencyjne, takie jak wąskie pasma emisyjne, długie czasy zaniku luminescencji (rzędu mikro- i milisekund) oraz duże przesunięcie Richardсона. Właściwości te umożliwiają wykorzystanie luminoforów Ln^{3+} w różnych dziedzinach jako znaczniki i sondy luminescencyjne, materiały laserowe czy warstwy emitujące. To powoduje, że wciąż poszukiwane są nowe fotostabilne związki lantanowców o dużej wydajności kwantowej emisji.

Luminescencja jonów Ln^{3+} wymaga jednak sensybilizowania, ze względu na małą wartość ich molowych współczynników absorpcji. Do wzmacniania luminescencji Ln^{3+} wykorzystuje się tzw. efekt anteny, który polega na niepromienistym wewnątrz-molekularnym transferze energii wzbudzenia od ligandów organicznych do jonu Ln^{3+} . Sensybilizacja luminescencji jest procesem złożonym, jednak odpowiednie zaprojektowanie i modyfikacje struktury liganda są kluczowe przy optymalizacji właściwości fotofizycznych chelatów Ln^{3+} .

Podczas wykładu zaprezentowane zostanie czy nieznaczne zmiany strukturalne mogą powodować duże zmiany właściwości luminescencyjnych oraz jak odpowiednie zaprojektowanie struktury ligandów i wykorzystanie inżynierii krystalicznej doprowadziło do otrzymania serii związków Ln^{3+} o najwyższych wydajnościach kwantowych emisji i właściwościach nanomagnesów molekularnych.

Synteza asymetryczna – o spotkaniach eksperymentatorów z teoretykami

Elżbieta Wojaczyńska

elzbieta.wojaczynska@pwr.edu.pl

*Politechnika Wrocławska, Wydział Chemiczny, Katedra Chemii Fizycznej i Kwantowej
Wybrzeże Wyspiańskiego 27, 50-370 Wrocław, Polska*

Abstrakt

Współczesne metody syntezy organicznej bardzo często wykorzystują reakcje stereoselektywne, pozwalające w skuteczny sposób otrzymać produkt o określonej stereochemii, nierzadko wykazujący pożądaną aktywność biologiczną. W syntezie asymetrycznej wykorzystuje się reakcje tworzenia wiązań węgiel-węgiel lub węgiel-heteroatom z transferem chiralności od reagentów, chiralnych pomocników lub katalizatorów, a procedury takie stosowane są zarówno na skalę laboratoryjną, jak i w przemyśle (produkcja farmaceutyków, kosmetyków, środków ochrony roślin itp.).

W naszym laboratorium sięgamy po reakcje stereoselektywne, syntezując nowe połączenia heterocykliczne, które mogą znaleźć zastosowanie w roli ligandów lub katalizatorów dla syntezy asymetrycznej. Są one także testowane pod kątem aktywności antyproliferacyjnej, antybakteryjnej i antywirusowej. Przy określaniu struktury tych związków, a także mechanizmu ich preferencyjnego powstawania w postaci nieracemicznej, czy nawet czystej enancjomerycznie, czasem współpracujemy ze specjalistami z zakresu chemii teoretycznej. Przykłady efektów takiego współdziałania zostaną przedstawione podczas wykładu.

Wpływ grupy formylowej na strukturę i aktywność mikrobiologiczną związków fenyloboronowych

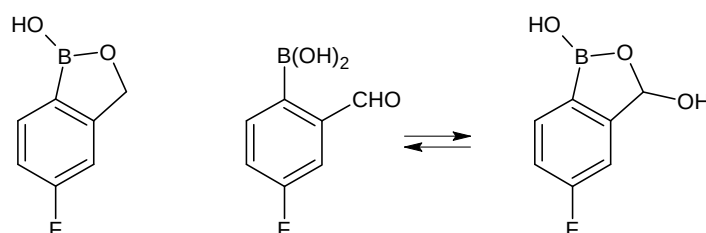
Agnieszka Adamczyk-Woźniak

agnieszka@ch.pw.edu.pl

Politechnika Warszawska, Wydział Chemiczny, ul. S. Noakowskiego 3, 00-664 Warszawa

Abstrakt

Wprowadzenie grupy formylowej do związków fenyloboronowych wiąże się nie tylko ze wzrostem ich użyteczności syntetycznej, ale również ze zmianą struktury w fazie stałej oraz aktywnością mikrobiologiczną. Szczególne znaczenie ma obecność podstawnika formylowego w bezpośrednim sąsiedztwie atomu boru. Takie położenie grupy formylowej decyduje m.in. o możliwości wystąpienia oddziaływań wewnątrzcząsteczkowych, które prowadzą do cyklicznej formy tautomerycznej (Rysunek 1). Izomery cykliczne tych związków stanowią analogi zatwierdzonych w ostatnich latach przez amerykańską FDA (*Food and Drug Administration*) leków przeciwgrzybiczych i przeciwzapalnych o strukturze benzoksaboroli. W ostatnim czasie otrzymano szereg nowych związków fenyloboronowych, zawierających podstawniki formylowe. Struktury związków w cieple stałym określono techniką dyfrakcji promieni rentgenowskich, natomiast badania w roztworze prowadzono przy wykorzystaniu techniki NMR. Określono również wpływ obecności i położenia podstawnika formylowego na aktywność mikrobiologiczną związków fenyloboronowych [1-3].



Rysunek 1. Lek przeciwgrzybiczy (Tavaborol) oraz równowaga tautomeryczna jego analogu.

Podziękowania:

Prace były finansowane w ramach grantu NCN numer 2016/23/B/ST5/02847.

Literatura:

- [1] Adamczyk-Woźniak, A.; Gozdzalik, J. T.; Wieczorek, D.; Madura, I. D.; Kaczorowska, E.; Brzezińska, E.; Sporyński, A.; Lipok, J. Synthesis, Properties and Antimicrobial Activity of 5-Trifluoromethyl-2-formylphenylboronic Acid. *Molecules* 2020, 25, a799.
- [2] Borys, K. M.; Wieczorek, D.; Pecura, K.; Lipok, J.; Adamczyk-Woźniak, A. Antifungal activity and tautomeric cyclization equilibria of formylphenylboronic acids. *Bioorg. Chem.* 2019, 91, a103081.

[3] Wieczorek, D.; Kaczorowska, E.; Wiśniewska, M.; Madura, I. D.; Leśniak, M.; Lipok, J.; Adamczyk-Woźniak A. Synthesis and Influence of 3-Amino Benzoxaboroles Structure on Their Activity against *Candida albicans*. *Molecules* 2020, 55, a5999.

Badanie zjawiska przedtopnienia w alkoholach metodą Nieliniowego Efektu Dielektrycznego

Michał Pocheć, Kazimierz Orzechowski

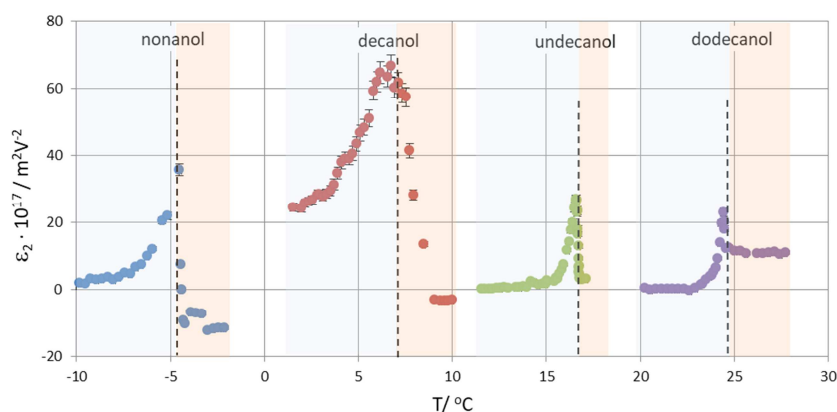
michal.pochec@chem.uni.wroc.pl

Uniwersytet Wrocławski, Wydział Chemii, ul. F. Joliot-Curie 14, 50-383 Wrocław, Polska

Abstrakt

Badania zjawisk zachodzących w temperaturowym sąsiedztwie przejścia fazowego ciało stałe – ciecz swoją genezę mają już w XIX wieku, kiedy to Michael Faraday prowadził eksperymenty dotyczące topnienia lodu [1]. Pomimo upływu ponad wieku od publikacji jego wyników, teoria zjawisk przedtopnieniowych wciąż ewoluuje, również dzięki zastosowaniu różnych metod pomiarowych. Zaliczyć do nich można m.in. metody spektroskopowe: IR, NMR; elipsometrię, a także badania teoretyczne. Nowatorskie zastosowanie metody Nieliniowego Efektu Dielektrycznego (NDE), który opiera się na badaniu zmian w przenikalności dielektrycznej względem silnego pola elektrycznego, pozwala na czuły pomiar, z wysoką rozdzielczością względem temperatury [2].

Do badań z zastosowaniem techniki Nieliniowego Efektu Dielektrycznego wybrana została grupa 4 alkoholi o długościach łańcuchów od 9 do 12 węgli. Pozwoliło to na uwzględnienie efektów pochodzących zarówno od grup wodorotlenowych, przejawiających silną tendencję do tworzenia wiązań wodorowych, jak i łańcuchów alifatycznych.



Rysunek 1. Zmiany inkrementu dielektrycznego w funkcji temperatury dla badanych alkoholi [2].

W wynikach badań widać wyraźną różnicę pomiędzy zachowaniem dekanolu a pozostałych alkoholi. Niewielki wzrost inkrementu dielektrycznego w przypadku tych trzech związków zaczyna się nie dalej niż 4-5 °C od temperatury topnienia (T_m), podczas gdy w dekanolu, dla podobnej odległości od temperatury topnienia, jest on już wyraźnie wysoki. Dodatkowo, pomimo że w fazie ciekłej w okolicy T_m inkrement dielektryczny może być zarówno ujemny (nonanol, dekanol), jak i dodatni (undekanol, dodekanol), wszystkie alkohole wykazują silny dodatni inkrement NDE w bliskiej odległości od T_m w fazie stałej. Sugeruje to występowanie wspólnego dla wszystkich związków sposobu przedtopnienia, najprawdopodobniej związanego z tworzeniem się warstewki quasi-cieczy na powierzchni, co prowadzi do wystąpienia efektu Maxwella-Wagnera. Dekanol wykazuje dodatkowo zmiany w szerszym zakresie temperatur, co sugeruje występowanie stanu rotacyjnego [3].

Literatura:

- [1] Faraday, M. *Athenaeum* 1850, 1181, 640–641.
- [2] Pocheć, M.; Niu, H.; Ren, L.; Bai, S.; Orzechowski, K. *J. Phys. Chem. C* 2020, 124, 21013-21017.
- [3]. Zerbi, G.; Conti, G.; Minoni, G.; Pison, S.; Bigotto, A. *J. Phys. Chem.* 1987, 91, 2386–2393.

Jak zaprojektować dobry katalizator?

Anna Trzeciak

anna.trzeciak@chem.uni.wroc.pl

Uniwersytet Wrocławski, Wydział Chemii, ul. F. Joliot-Curie 14, 50-383 Wrocław, Polska

Abstrakt

Katalizatory oparte na związkach metali przejściowych znajdują coraz więcej zastosowań w syntezie organicznej, zarówno w skali niskotonażowej jak i wielkotonażowej. W małej skali wytwarza się farmaceutyki i inne związki biologicznie czynne o dużej wartości. W większej skali produkowane są niektóre rozpuszczalniki, alkohole czy aldehydy. We wszystkich tych procesach dobry katalizator powinien charakteryzować się wysoką aktywnością i selektywnością, czyli umożliwiać otrzymanie pożądanego produktu z wysoką wydajnością w możliwie krótkim czasie.

Proces hydroformylacji, czyli konwersji olefin do aldehydów w reakcji z CO i H₂ jest dobrym przykładem technologii wielokrotnie ulepszanej w celu poprawy nie tylko efektywności reakcji ale także warunków jej prowadzenia. Obecnie, w przemyśle prowadzi się proces hydroformylacji pod ciśnieniem ok. 10 bar w temperaturze 80 °C, podczas gdy pierwsze rozwiązania wymagały ponad 200 bar i ok. 200 °C.

Badania procesu hydroformylacji prowadzone na Wydziale Chemii UWr. Doprowadziły do lepszego zrozumienia mechanizmu działania katalizatorów rodowych. W szczególności wykazano wpływ właściwości elektronowych i sterycznych ligandów fosforowych, koniecznych składników układu katalitycznego. Na tej podstawie przewidziano, że dobrych wyników można się spodziewać stosując tris-pirolilofosfinę jako ligand modyfikujący. Co ciekawe, fosfiny z grupami pirolilowymi rzeczywiście okazały się bardzo dobrze w selektywnej hydroformylacji różnych substratów nienasyconych. Ponadto, zauważono, że użycie wody jako środowiska reakcji dodatkowo poprawia regioselektywność i umożliwia otrzymanie pożądanego aldehydu liniowego w znacznym nadmiarze. Co ciekawe, w połączeniu z hydrofobowym ligandem chiralnym, woda powodowała istotny wzrost enancjoselektywności w hydroformylacji prochiralnych substratów.

Wybrane przykłady pokazują, że zaprojektowanie dobrego katalizatora zawierającego metal przejściowy jako centrum aktywne wymaga właściwego doboru ligandów w pierwszej sferze koordynacyjnej. Równie ważne jest jednak uwzględnienie oddziaływań dalszego zasięgu, w

tym efektów rozpuszczalnikowych. Podstawą tego projektowania jest analiza wielu wyników zgromadzonych w zaplanowanych i przypadkowych eksperymentach.

Literatura:

- [1] Alsalahi, W.; Trzeciak, A.M. Rhodium-catalyzed hydroformylation under green conditions: Aqueous/organic/biphasic, “on water”, solventless and Rh nanoparticles based systems. *Coord. Chem. Rev.* 2021, 430, 213732.
- [2] Alsalahi, W.; Grzybek, R.; Trzeciak, A.M. N-pyrrolylphosphines as ligands for highly regioselective rhodium-catalyzed 1-butene hydroformylation: effect of water on the reaction selectivity. *Catal. Sci. Technol.* 2017, 7, 3097-3103.
- [3] Alsalahi, W.; Tylus, W.; Trzeciak, A.M. Green synthesis of rhodium nanoparticles that are catalytically active in benzene hydrogenation and 1-hexene hydroformylation. *ChemCatChem* 2018, 10, 2051-2058.

Badania właściwości magnetycznych rodników z wykorzystaniem spektroskopii EPR oraz modelowania molekularnego

Maciej Witwicki

maciej.witwicki@chem.uni.wroc.pl

Uniwersytet Wrocławski, Wydział Chemii, ul. F. Joliot-Curie 14, 50-383 Wrocław, Polska

Abstrakt

Opis i interpretację oddziaływań magnetycznych, w tym widm EPR z nich wynikających, można uprościć poprzez zastąpienie pełnego (relatywistycznego) hamiltonianu przez fenomenologiczny hamiltonian spinowy $\hat{H}_S$:

$$\hat{H}_S = \hat{H}_{HDV} + \hat{H}_{ZE} + \hat{H}_{ZFS} + \hat{H}_{HFS} + \hat{H}_{NQ} + \hat{H}_{ZN},^1$$

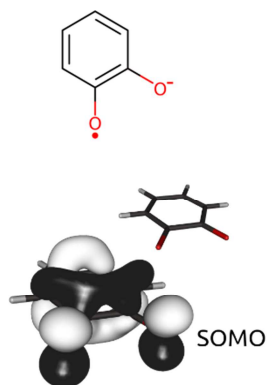
$$\hat{H}_S = \overbrace{-2 \hat{S}_a^T J_{ab} \hat{S}_b}^{\hat{H}_{HDV}} + \overbrace{\beta_e \mathbf{B}_0^T g \hat{S}}^{\hat{H}_{ZE}} + \overbrace{\hat{S}^T \mathbf{D} \hat{S}}^{\hat{H}_{ZFS}} + \overbrace{\hat{S}^T \mathbf{A} \hat{I}}^{\hat{H}_{HFS}} + \overbrace{\hat{I}^T \mathbf{Q} \hat{I}}^{\hat{H}_{NQ}} + \overbrace{\beta_n \mathbf{B}_0^T g_n \hat{I}}^{\hat{H}_{ZN}},$$

składający się z członów zawierających operatory spinowych momentów pędu ($\hat{S}$ i $\hat{I}$) i parametry związane z właściwościami danego układu [1]. Dynamiczny rozwój metod chemii kwantowej sprawia, że badania spektroskopowe EPR pozwalające wyznaczyć parametry hamiltonianu spinowego coraz częściej wzbogacane są o modelowanie molekularne [2]. Takie połączenie eksperymentu i badań teoretycznych jest szczególnie użyteczne, jeśli parametry hamiltonianu spinowego wyznaczone zostały dla centrów spinowych, których struktura jest trudna do jednoznacznego określenia eksperymentalnego (np. skomplikowane układy naturalne).

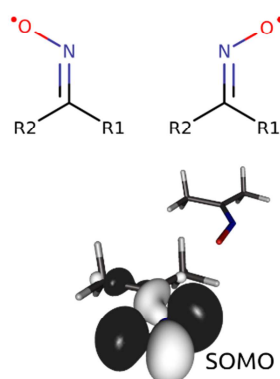
W czasie wykładu przedstawione zostaną badania oddziaływań magnetycznych wykonane dla kilku grup rodników (Rysunek 1) z zastosowaniem metod eksperymentalnych oraz teoretycznych (DFT i *ab initio*). Analizowany będzie wpływ otoczenia chemicznego (wiązania wodorowe, koordynacja jonu metalu) oraz dynamiki konformacyjnej na obserwowane oddziaływanie zeemanowskie ($\hat{H}_{ZE}$) oraz nadsubtelne ($\hat{H}_{HFS}$). Ponadto przedstawiona będzie identyfikacja struktury molekularnej i elektronowej centrów semichinonowych oddziałujących z kationami metali.

¹ $\hat{H}_{HDV}$ – izotropowe oddziaływanie wymienne (Heisenberg–Dirac–van Vleck); $\hat{H}_{ZE}$ – oddziaływanie zeemanowskie elektronowe; $\hat{H}_{ZFS}$ – oddziaływanie subtelne (rozszczipienie w zerowym polu); $\hat{H}_{HFS}$ – oddziaływanie nadsubtelne; $\hat{H}_{NQ}$ – oddziaływanie kwadrupolowe; $\hat{H}_{ZN}$ – oddziaływanie zeemanowskie jądrowe

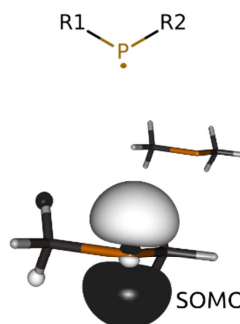
Rodniki
o-semichinonowe



Rodniki
iminoksyłowe



Rodniki
fosfinyłowe



Rysunek 1. Struktury trzech głównych grup rodników, których właściwości będą omówione na wykładzie.

Podziękowania:

Autor dziękuje Narodowemu Centrum Nauki za wsparcie finansowe badań (nr rej. 2018/02/X/ST5/01186); National High Magnetic Field Laboratory (Florida State University, Tallahassee) za pomiary EPR w wysokich częstościach; oraz Wrocławskiemu Centrum Sieciowo-Superkomputerowemu (WCSS) za czas obliczeniowy, udostępnione licencje oraz wszelką pomoc w realizacji projektu (grant nr 47).

Literatura:

- [1] Bertrand, P. Electron Paramagnetic Resonance Spectroscopy. Springer Nature Switzerland AG, 2020.
- [2] Neese, F. Quantum Chemistry and EPR Parameters, rozdział w: Goldfarb, D.; Stoll, S. EPR Spectroscopy: Fundamentals and Methods. John Wiley & Sons, 2018.

Kierowanie syntezą hierarchicznych zeolitów na przykładzie nanowarstwowego MFI i nanoigieł MEL

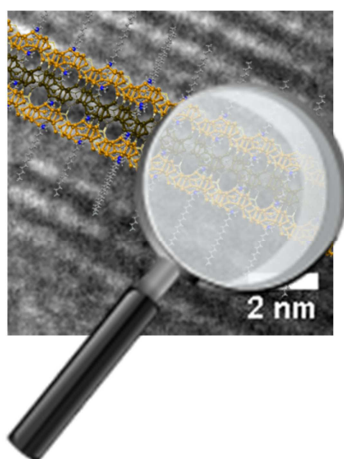
Bartłomiej M. Szyja

b.m.szyja@pwr.edu.pl

*Katedra Chemii i Technologii Paliw, Politechnika Wrocławska,
ul. Gdańska 7/9, 50-344 Wrocław*

Abstrakt

Hierarchiczne materiały o strukturze zeolitów są cenione w przemyśle z uwagi na ich właściwości katalityczne wynikające z mikroporowatej struktury krystalicznej, a jednocześnie dzięki obecności mezoporów, umożliwiającą łatwy transport reagentów w ziarnie katalizatora [1]. Niniejsza praca jest poświęcona analizie zjawisk odpowiedzialnych za sterowanie syntezą tych materiałów, w szczególności do selektywnego otrzymywania struktur krystalicznych o sieci MFI oraz MEL, należących do rodziny o nazwie pentasil. W pracy opisane są wyniki modelowania molekularnego, mające na celu określenie energii oddziaływania templatów z oligomerami SiO_2 , która jest uważana za główny czynnik wpływający na selektywność syntezy. Otrzymane wyniki zostały następnie skonfrontowane i zweryfikowane eksperymentalnie, w celu dokładnego zrozumienia badanego zjawiska. Wyniki są spójne z hipotezą badawczą z Leuven [2], która zakłada mechanizm syntezy poprzez aglomerację prekursorów.



Rysunek 1. Model obliczeniowy nałożony 1:1 na obraz TEM nanowarstewki MFI.

Literatura:

[1] Zhu, X.; Goesten, M.G.; Koekkoek, A.J.J.; Mezari, B.; Kosinov, N.; Filonenko, G.; Friedrich, H.; Rohling, R.; Szyja, B.M.; Gascon, J.; Kapteijn, F.; Hensen, E.J.M. Establishing hierarchy: the chain of events leading to the formation of silicalite-1 nanosheets. *Chem. Sci.* 2016, 7, 6506-6513.

[2] Kirschhock, C.E.A.; Buschmann, V.; Kremer, S.; Ravishankar, R.; Houssin, C.J.Y.; Mojet, B.L.; van Santen, R.A.; Grobet, P.J.; Jacobs, P.A.; Martens, J.A. Zeosil Nanoslabs: Building Blocks in $n\text{Pr}_4\text{N}^+$ -Mediated Synthesis of MFI Zeolite. *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2001, 40, 2637-2640

Projektowanie i synteza cyklicznych analogów oksytocyny

**Agnieszka Staśkiewicz^{1,2}, Lorenzo Macchia², Francesca Nuti²,
Michał Jewgiński¹, Michael Chorev³, Paolo Rovero⁴,
Anna Maria Papini², Rafał Latajka¹**

agnieszka.staskiewicz@pwr.edu.pl

¹Wydział Chemiczny, Katedra Chemii Bioorganicznej, Politechnika Wrocławska, Wybrzeże Wyspiańskiego 27, 50-370 Wrocław, Polska;

²PeptLab, Department of Chemistry, University of Florence, Via della Lastruccia 13, 50019 Sesto Fiorentino, Italy;

³Laboratory for Translational Research, Department of Medicine, Brigham & Women's Hospital, Harvard Medical School, 75 Francis Street, Boston, 02115 MA, U.S.A.;

⁴PeptLab, Department of NEUROFARBA, University of Florence, Via U. Schiff 6, 50019 Sesto Fiorentino, Italy.

Abstrakt

Oksytocyna to endogenny hormon wykazujący wiele działań biologicznych. Wytwarzana jest w podwzgórzu i wydzielana do krwiobiegu przez tylną przysadkę mózgową. Przedstawiona sekwencja: [Cys-Tyr-Ile-Gln-Asn-Cys]-Pro-Leu-Gly-NH₂ sugeruje, iż wspomniany hormon zawiera w swojej budowie mostek disiarczkowy, który odpowiada za stabilizację struktury. Obecne w peptydzie charakterystyczne układy β -zgięć są punktem wyjścia dla wielu rozważań obejmujących właściwości biologiczne naturalnych peptydów, a zwłaszcza ich syntetycznych odpowiedników. Mając to na uwadze, chcielibyśmy przedstawić sposób syntezy oraz optymalizacji struktury oksytocyny do łańcucha bocznego 4,1- i 1,4-dipodstawionego ugrupowania [1,2,3]-triazolilowego. Celem prowadzonych badań jest analiza zamiany mostka disiarczkowego pomiędzy resztami Cys¹ i Cys⁶ w natywnym hormonie przez pierścień triazolowy przy pomocy cykloaddycji Huisgena (CuAAC) katalizowanej jonami miedzi [1, 2].

Podziękowania:

Praca doktorska jest realizowana w ramach projektu pn. „BioTechNan – Program Interdyscyplinarnych Środowiskowych Studiów Doktoranckich KNOW z obszaru Biotechnologii i Nanotechnologii” współfinansowanego z Europejskiego Funduszu Społecznego. Modelowanie molekularne wykonano we Wrocławskim Centrum Sieciowo-Superkomputerowym (grant nr 197). Syntezy zostały przeprowadzane w PeptLab@UNIFI, częściowo przy wsparciu Fondazione Ente Cassa di Risparmio di Firenze (grant nr 2014.0306).

Literatura:

- [1] Holland-Nell, K.; Meldal, M. Maintaining biological activity by using triazoles as disulfide bond mimetics. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2011, 50(22), 5204-5206.
- [2] Testa, C.; Papini, A.M.; Chorev, M.; Rovero, P. Copper-Catalyzed Azide-Alkyne Cycloaddition (CuAAC)-Mediated Macrocyclization of Peptides: Impact on Conformation and Biological Activity. *Curr. Top. Med. Chem.* 2018, 18(7), 591-610.

Jak dożyć 100 lat

Maciej Szymczak

maciej.szymczak@umed.edu.pl

*Katedra i Klinika Nefrologii i Medycyny Transplantacyjnej,
Uniwersytet Medyczny we Wrocławiu,
ul. Borowska 213, 50-556 Wrocław, Polska*

Abstrakt

Długowieczność jest marzeniem większości ludzi. Nie wszystkim nam jednak jest dana. Na naszą długość życia możemy częściowo wpływać poprzez nasze zachowania. Niebagatelny wpływ na nasze zdrowie ma również środowisko, w którym żyjemy. Istnieją miejsca na świecie, gdzie ludzie generalnie żyją dłużej.

Któż zna odpowiedź na to pytanie – Jak dożyć 100 lat?

Stulatkowie.

Niestety większość z nich nie ma już siły, żeby pisać o tym książki, czy robić na ten temat wykłady.

Dlatego czasem warto, aby ktoś młodszy zebrał ich myśli i je podsumował.

Badania dynamiką molekularną ab initio wpływu oddziaływań międzycząsteczkowych na indukowaną mechaniczną siłą rozciągającą reaktywność disiarczków

Przemysław Dopieralski

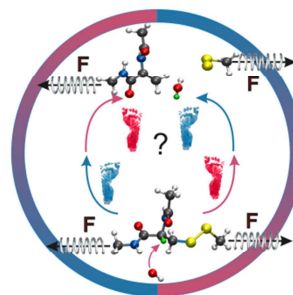
przemyslaw.dopieralski@chem.uni.wroc.pl

Uniwersytet Wrocławski, Wydział Chemii, ul. F. Joliot-Curie 14, 50-383 Wrocław, Polska

Abstrakt

Rozszyfrowanie odpowiedzi mostków dwusiarczkowych na wpływ niedużych zewnętrznych sił rozciągających jest obecnie bardzo interesujące z wielu powodów: wiadomo, że mostki dwusiarczkowe służą nie tylko jako chemicznie obojętne zszywki molekularne, które stabilizują struktury białkowe, ale funkcjonują one również jako dwusiarczkowe przełączniki redoks (inaczej disulfidy katalityczne lub allosteryczne), aby przejąć znaczące funkcje w chemicznej regulacji aktywności enzymu poprzez zrywanie i tworzenie kowalencyjnych wiązań siarka-siarka (S-S).

W czasie wykładu omówione zostaną badania obliczeniowe dotyczące mechanizmów reakcji rozpadu mostków disiarczkowych w roztworze wodnym - między innymi omówiona zostanie hydroliza zasadowa, kwaśna hydroliza, α -eliminacja, β -eliminacja, substytucja na α -węglu czy też zwykłe reakcje zrywania wiązań S-S oraz C-S. W szczególności badane będzie jaki wpływ ma mechaniczna rozciągająca siła na termiczny mechanizm badanych reakcji w świetle kontrowersyjnych wyników eksperymentalnych.



Podziękowania:

Autor dziękuje Narodowemu Centrum Nauki (NCN: 2020/37/B/ST4/00423) za wsparcie finansowe oraz Wrocławskiemu Centrum Sieciowo-Superkomputerowemu (WCSS) za czas obliczeniowy.

Pułapki elektronowe w $\text{Lu}_2\text{O}_3\text{:Hf}$

Andrii Shyichuk, Eugeniusz Zych

andrii.shyichuk@chem.uni.wroc.pl

Uniwersytet Wrocławski, Wydział Chemii, F. Joliot-Curie 14, 50-383 Wrocław

Abstrakt

Geometrie badanych układów były tworzone poprzez wprowadzenie domieszki Hf do komórki podstawowej tlenku lutetu o układzie regularnym. Wymiar komórki to 10.4 Å (80 atomów, 16 jednostek Lu_2O_3). Badania obliczeniowe składały się z dwóch kroków. W pierwszym kroku, geometrie komórek były optymalizowane za pomocą metod teorii funkcjonału gęstości z płaską falą (*plane-wave density functional theory*), z wykorzystaniem funkcjonału LDA bez +U. Używano oprogramowania Quantum Espresso [1] oraz pseudopotencjałów typu *ultrasoft* [2]. W drugim kroku, energie oraz gęstości stanów dla zoptymalizowanych geometrii były liczone za pomocą oprogramowania Elk [3] (*full-potential augmented plane wave*) oraz funkcjonału meta-GGA RPP [4]. Z otrzymanych wykresów gęstości stanów (tzn. z położeń pasm związanych z defektami oraz pasma przewodnictwa) były oszacowane głębokości pułapek elektronowych. Szczegóły wyboru metod obliczeniowych wraz z odpowiednią dyskusją są podane w [5].

Z eksperymentów termoluminescencyjnych, głębokość pułapek w $\text{Lu}_2\text{O}_3\text{:Ln,Hf}$ wynosi około 0.7-0.8 oraz 1.3-1.4 eV [6]. Oddzielne atomy Hf w miejscach krystalograficznych Lu o symetrii punktowej C_{3i} w Lu_2O_3 działają jako średniej głębokości pułapki elektronowe (~0.8 eV). Podobnie działają też pary atomów Hf położone w sąsiednich pozycjach C_{3i} . Jeżeli dwa atomy Hf znajdują się w sąsiednich pozycjach lutetu o symetriach C_{3i} i C_2 , oraz towarzyszy im tlen międzywęzłowy w pozycji sąsiedniej do obydwu atomów domieszki ($\text{Lu}_2\text{O}_3\text{:Hf}_{C_{3i}}^{\times}, \text{Hf}_{C_{3i}}^{\bullet}, \text{O}_i''$) - głębokość pułapki wynosi 1.1 eV. Bez atomu międzywęzłowego głębokość pułapki wynosi 1.4 eV (jeżeli spułapkowany jest jeden elektron, $\text{Lu}_2\text{O}_3\text{:Hf}_{3i}^{\times}, \text{Hf}_{C_2}^{\bullet}$) lub 1.1-1.2 eV (jeżeli spułapkowane są dwa elektrony, $\text{Lu}_2\text{O}_3\text{:Hf}_{3i}^{\times}, \text{Hf}_{C_2}^{\times}$). Atomy domieszki mogą się znajdować również w lukach kationowych, z towarzyszącymi im tlenami w pozycjach międzywęzłowych (inaczej mówiąc, dodatkowa jednostka HfO_2 w komórce Lu_2O_3). W takich układach głębokość pułapki może wynosić, w zależności od symetrii lokalnej lub względnych położeń Hf oraz O_i , 1.4-1.6 eV.

Podziękowania:

Badania finansowane z NCN, projekty 2014/13/B/ST5/01535 oraz 2017/26/D/ST3/00599. Podziękowania dla Kevina Garrity z National Institute of Standards and Technology (NIST, USA) za nadany pseudopotencjał Lu^{3+} . Podziękowania dla Wrocławskiego Centrum Sieciowo-Superkomputerowego za udzieloną moc obliczeniową.

Literatura:

- [1] Giannozzi, P.; Andreussi, O.; Brumme, T.; Bunau, O.; Buongiorno Nardelli, M.; Calandra, M. et al., Advanced capabilities for materials modelling with Quantum ESPRESSO. *J. Phys. Condens. Matter.* 2017, 29, 465901.
- [2] Garrity, K.F.; Bennett, J.W.; Rabe, K.M.; Vanderbilt, D. Pseudopotentials for high-throughput DFT calculations. *Comput. Mater. Sci.* 2014, 81, 446–452.
- [3] elk.sourceforge.net
- [4] Räsänen, E.; Pittalis, S.; Proetto, C.R. Universal correction for the Becke-Johnson exchange potential. *J. Chem. Phys.* 2010, 132, 044112.
- [5] Shyichuk, A.; Zych, E.; Dopant-related electron trap states in $\text{Lu}_2\text{O}_3\text{:Ta}$. *J. Lumin.* 2019, 214 116583.
- [6] Sójka, M.; Kulesza, D.; Bolek, P.; Trojan-Piegza, J.; Zych, E. Tracing mechanism of optically and thermally stimulated luminescence in $\text{Lu}_2\text{O}_3\text{:Tb,M}$ (M = Hf, Zr, Ti) ceramic storage phosphors. *J. Rare Earths* 2019, 37, 1170–1175.

Mikrosolvatacja histydyny - badanie oddziaływań międzycząsteczkowych z wykorzystaniem metod AIM i SAPT

Beata Kizior^{1,2}, Jarosław J. Panek², Aneta Jezierska²

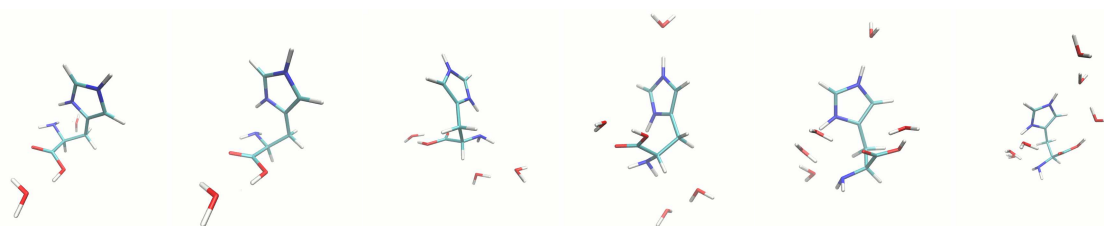
beata.kizior@pwr.edu.pl

¹Politechnika Wrocławska, Katedra Chemii i Technologii Paliw, Wydział Chemiczny, ul. Gdańska 7/9 50-344 Wrocław, Polska

²Uniwersytet Wrocławski, Wydział Chemii, ul. F. Joliot-Curie 14, 50-383 Wrocław, Polska

Abstrakt

Histydyna jest interesującym aminokwasem, gdyż posiada różne formy tautomeryczne [1]. Głównym celem było zbadanie histydyny w trzech stanach protonowania (HIP, HIE i HID) oraz w modelach mikrosolvacyjnych (1-6 cząsteczek wody), jak pokazano na Rysunku 1 [2]. Symulacje wykonano w fazie gazowej oraz z uwzględnieniem ciągłego modelu rozpuszczalnikowego (model PCM), w którym woda pełniła rolę rozpuszczalnika [3]. Zastosowano w obliczeniach teorię funkcjonału gęstości (DFT) [4]. Analiza parametrów metrycznych ujawniła obecność wewnątrz- i międzycząsteczkowych wiązań wodorowych w badanych kompleksach. Do określenia wpływu solwatacji na zmiany ładunku w histydynie wykorzystano teorię Atomów w Molekułach (AIM) [5]. Do zbadania dekompozycji energii w modelach mikrosolvacyjnych, zastosowano metodę SAPT [6].



Rysunek 1. Modele mikrosolvacyjne histydyny (forma HIP) w otoczeniu rozpuszczalnika (1-6 cząsteczek wody).

Podziękowania:

Autorzy dziękują Wrocławskiemu Centrum Sieciowo-Superkomputerowemu (WCSS) za czas obliczeniowy i wszelką pomoc w trakcie realizacji projektu.

Literatura:

- [1] Li, S.; Hong, M. Protonation, Tautomerization, and Rotameric Structure of Histidine: A Comprehensive Study by Magic-Angle-Spinning Solid-State NMR. *J. Am. Chem. Soc.* 2011, 133, 1534-1544.
- [2] Kizior, B.; Panek, J.J.; Jezierska, A. Microsolvation of Histidine—A Theoretical Study of Intermolecular Interactions Based on AIM and SAPT Approaches. *Symmetry* 2020, 12, 1153.
- [3] Barone, V.; Cossi, M. Quantum Calculation of Molecular Energies and Energy Gradients in Solution by a Conductor Solvent Model. *J. Phys. Chem. A* 1998, 102, 1995–2001.
- [4] Hohenberg, P.; Kohn, W. Inhomogeneous Electron Gas. *Phys. Rev.* 1964, 136, B864–B871.

- [5] Bader, R.F.W. *Atoms in molecules: a quantum theory*. Oxford University Press, Oxford, 1990.
- [6] Jeziorski, B.; Moszyński, R.; Szalewicz, K. Perturbation Theory Approach to Intermolecular Potential Energy Surfaces of van der Waals Complexes. *Chem. Rev.* 1994, 7, 1887–1930.

Warsztaty Dokowania Molekularnego (dokowanie ligand-białko)

Kamil Raczyński

raczynski@o2.pl

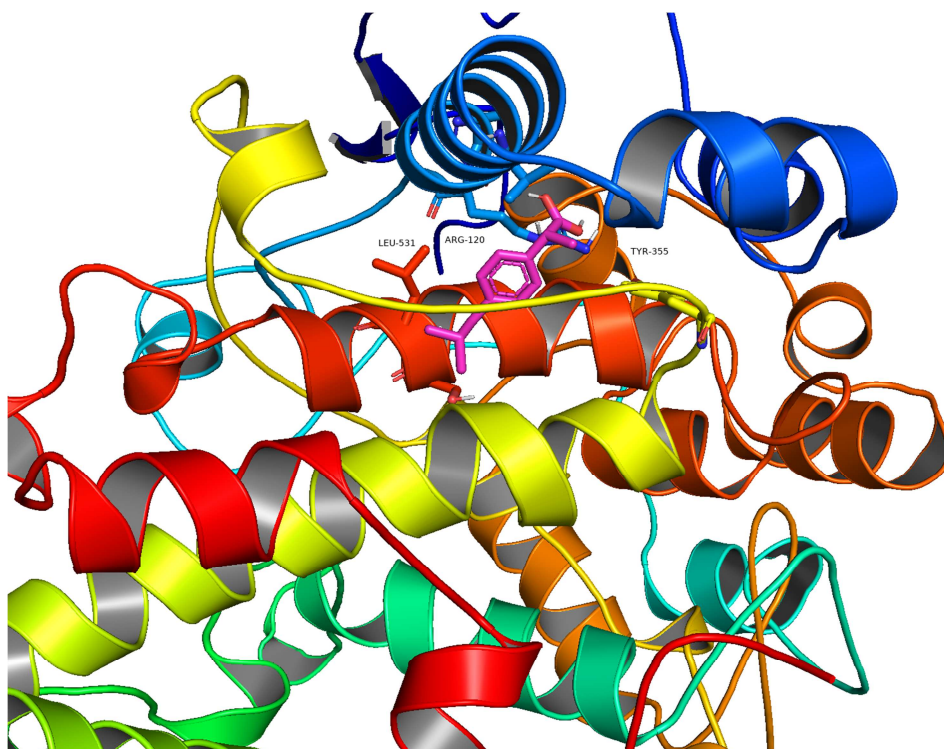
Uniwersytet Wrocławski, Wydział Chemii, ul. F. Joliot-Curie 14, 50-383 Wrocław, Polska

Abstrakt

Dokowanie molekularne to metoda polegająca na wyszukiwaniu najkorzystniejszego, a więc odznaczającego się najniższą energią miejsca wiązania się liganda z receptorem. Znalezienie minimum globalnego dla kompleksu ligand-receptor jest możliwe, dzięki wykorzystaniu algorytmów przeszukiwania, m.in. algorytmów genetycznych, a także, dzięki funkcji oceniającej, której zadaniem jest zaproponowanie odpowiedniej konfiguracji układu ligand-receptor. Metoda ta jest szeroko wykorzystywana m.in. do:

- projektowania nowych potencjalnych leków działających jako inhibitory,
- badania mechanizmu działania znanych leków,
- przeszukiwaniu baz danych, w celu znalezienia ligandów oddziałujących z danym receptorem. [1, 2]

Podczas warsztatów przedstawiony zostanie proces dokowania ibuprofenu należącego do grupy niesteroidowych leków przeciwzapalnych (NLPZ) w jednej z izoform cyklooksygenazy, a dokładnie cyklooksygenazie-2 (COX2), ulegającej aktywacji pod wpływem czynników związanych ze stanami zapalnymi w organizmie. Przygotowane warsztaty mają na celu pokazanie od strony praktycznej w jaki sposób zadokować ligand w miejscu aktywnym enzymu, a także jak zwizualizować otrzymane wyniki. Do tego celu zostaną użyte takie programy jak: AutoDock, AutoGrid, Pymol jak i pakiet MGLTools.



Rysunek 1. Wyniki dokowania ibuprofenu w COX2.

Literatura:

- [1] Brooijmans, N.; Kuntz, I. D. Molecular recognition and docking algorithms. *Annu. Rev. Biophys. Biomol. Struct.* 2003, 32, 335-373
- [2] Guedes, I. A.; de Magalhães, C. S.; Dardenne, L. E. Receptor-ligand molecular docking. *Biophys. Rev.* 2014, 6, 75-87.

Podziękowania:

Państwu Wykładowcom bardzo dziękujemy za przygotowanie abstraktów i uświetnienie naszego Seminarium/Webinarium.

Panu Kamilowi Raczyńskiemu dziękujemy za przygotowanie Logo w wersji 3D, które ozdobiło okładkę Książki Abstraktów.

Panu Dziekanowi Wydziału Chemii Uniwersytetu Wrocławskiego, dr hab. Sławomirowi Berskiemu, Prof. UWr, oraz Pani Prodziekan Wydziału Chemii Uniwersytetu Wrocławskiego ds. Innowacji i Rozwoju, prof. dr hab. Jolancie Ejfler, dziękujemy za wsparcie i pomoc w organizacji Seminarium/Webinarium.