

Głównym celem poznawczym rozprawy doktorskiej pt. „BADANIA ODDZIAŁYWAŃ POCHODNYCH BENZOESANU METYLU I BIFENYLU Z WYBRANYMI ZŁOŻONYMI MAKROCZĄSTECZKAMI CHEMICZNYMI I BIOLOGICZNYMI” było zrozumienie mechanizmów oddziaływań pomiędzy cząsteczkami wykazującymi fotoindukowane wewnątrzcząsteczkowe przeniesienie ładunku (elektronu i/lub protonu) a wybranymi nośnikami makrocyklicznymi oraz wyjaśnienie mechanizmów oddziaływań pomiędzy dwoma pochodnymi benzoesu metylu a białkami pochodzenia zwierzęcego (BSA).

Analiza danych doświadczalnych uzyskanych przy użyciu metod stacjonarnej i rozdzielonej w czasie spektroskopii oraz spektroskopii magnetycznego rezonansu jądrowego pozwoliła uzyskać informacje na temat możliwych ścieżek dezaktywacji elektronowo wzbudzonych molekuł wewnątrz wybranych nośników supramolekularnych oraz określić wpływ geometrii, zarówno cząsteczek „gościa”, jak i „gospodarza” na trwałość powstałych kompleksów. Ustalono również stechiometrię badanych kompleksów inkluzyjnych, ich stałe tworzenia oraz określono orientację molekuly wewnątrz nośnika makrocyklicznego.

Z czysto naukowego punktu widzenia, niezmiernie ciekawym było poznanie i wyjaśnienie wpływu struktury przestrzennej różnych nośników makrocyklicznych (cyklodekstryny (CD), kukurbit[7]uryly (CB[7]) oraz sulfonowe kaliks[6]areny (SCA[6])) na zjawisko fotoindukowanego wewnątrzcząsteczkowego przeniesienia protonu i elektronu, jak również zrozumienie, jaką rolę w procesie kompleksowania pełnią międzycząsteczkowe oddziaływania uniwersalne (dipol-dipolowe) i specyficzne (międzycząsteczkowe wiązania wodorowe).

Analiza zależnych od czasu widm fluorescencji zarejestrowanych z wykorzystaniem kamery smugowej dostarczyła również bardzo cennych informacji na temat relaksacji cząsteczek ośrodka wokół badanego związku luminezującego będącego w stanie wzbudzonym. W wodnych roztworach zawierających SCA[6] i CB[7] proces relaksacji solwatacyjnej okazał się co najmniej o dwa (SCA[6]) lub trzy (CB[7]) rzędy wolniejszy od sytuacji, gdy molekula luminezująca znajduje się w ośrodku jednorodnym (czysty rozpuszczalnik). Stwierdzono również, że średni czas relaksacji solwatacyjnej w układzie molekula-białko jest o około rząd wielkości dłuższy niż w układzie z nośnikami makrocyklicznymi (CB[7] i SCA[6]).

Badania oddziaływań pochodnej bifenyli - związku donorowo-akceptorowego, który dzięki możliwości rotacji wokół pojedynczego wiązania między donorem i akceptorem tworzy już w stanie podstawowym układ spektralnie niejednorodny - z γ -cyklodekstrynami wykazały, że w obu badanych środowiskach (DMSO i DMSO-woda) w obecności γ -CD powstają w stanie wzbudzonym stabilne kompleksy o stechiometrii 1:1, przy czym wartości stałych równowagowych zależą zarówno od stężenia molekuly, jak i długości fali światła wzbudzającego.

Jako, że badanie oddziaływań leków z różnymi biomolekułami cieszy się nieustannie zainteresowaniem wśród wielu grup farmaceutów, biochemików czy medyków, w niniejszej pracy starano się również zrozumieć procesy oddziaływania pomiędzy dwoma pochodnymi benzoesu metylu a trzema kluczowymi aminokwasami (tryptofan (Trp), tyrozyna (Tyr) oraz fenyloalanina (Phe)) oraz albuminą surowiczą wołową (BSA). Analiza ilościowa danych spektroskopowych wykazała, że zarówno w przypadku układów I-Trp, II-Trp, jak i I-BSA, II-BSA powstają kompleksy, które charakteryzują się stechiometrią 1:1. Co więcej, w specyficzne oddziaływanie między II i Trp oraz II i BSA zaangażowane są grupy OH i/lub $-\text{COOCH}_3$ molekuly

II (brak możliwości zajścia procesu fotoindukowanego wewnątrzcząsteczkowego przeniesienia protonu).