

Modelowanie dichroizmu magnetyczno-chiralnego uwodnionej proliny

Maksymilian Mucha

Kierownik: dr Janusz Cukras

Wśród słabo rozpoznawanych w świecie naukowym i wciąż intensywnie badanych zjawisk fizykochemicznych wskazać można tzw. dichroizm magnetyczno-chiralny (MChD — *magneto-chiral dichroism*). Rozumiany jako wielkość fizyczna, jest on równy niewielkiej zmianie we współczynniku absorpcji światła o dowolnej polaryzacji (również niespolaryzowanego), które pada na złożony z chiralnych cząsteczek ośrodek, gdy pojawia się zewnętrzne pole magnetyczne o indukcji równoległej do wektora propagacji światła. Zmiana ta ma tę samą wartość, lecz przeciwny znak, gdy pole magnetyczne i światło są antyrównoległe albo ośrodek złożony jest z przeciwnego enancjomeru. Ze względu na charakterystykę zjawiska, umożliwiającego rozróżnienie enancjomerów na podstawie ich interakcji ze światłem niespolaryzowanym, jest ono szczególnie interesujące jako potencjalne wyjaśnienie homochiralności. Własność ta, inaczej zwana czystością enancjomeryczną, cechuje wiele występujących w naturze związków (np. praktycznie wszystkie naturalne monosacharydy posiadają konfigurację względną D) i, choć znana jest od lat, nie posiada jednoznacznego wyjaśnienia, co daje dodatkową motywację do głębszej analizy MChD.

Projekt oparty jest na wcześniejszej pracy, której celem było sprawdzenie, czy prolina ma wykrywalne eksperymentalnie sygnały MChD oraz zbadanie wpływu użytego funkcjonału — B3LYP, CAMB3LYP — na uzyskane wyniki. Wymodelowano cztery najtrwalsze konformacje cząsteczki proliny w programie Avogadro i dla każdej z nich, po optymalizacji geometrii, osobno obliczono widma MChD dla obu funkcjonałów w programie DALTON. Korzystając z rozkładu Boltzmann, ustalono, że dwie z konformacji występują w równowagowej próbce w pomijalnym stopniu i dla dwóch pozostałych obliczono, odpowiednio uśrednione (z uwzględnieniem ułamków molowych), widma MChD. Wyniki potwierdziły, że prolina posiada przekraczający limit detekcji sygnał MChD, ponadto zauważono, że widma obliczone w funkcjonale B3LYP przesunięte są w kierunku fal dłuższych względem widm w funkcjonale CAMB3LYP. Celem niniejszego projektu jest rozszerzenie wyżej omówionej pracy tak, by modelowany układ był zbliżony do rzeczywistego, np. poprzez uwzględnienie efektów rozpuszczalnikowych lub wykonanie obliczeń dla uwodnionej proliny.

Literatura:

- [1] Barron, Laurence D. *Molecular Light Scattering and Optical Activity*. Cambridge University Press, 2009.
- [2] Barron, L. D., and J. Vrbancich. "Magneto-chiral birefringence and dichroism." *Molecular Physics* 51.3 (1984): 715-730.
- [3] Cukras, Janusz, et al. "A complex-polarization-propagator protocol for magneto-chiral axial dichroism and birefringence dispersion." *Physical Chemistry Chemical Physics* 18.19 (2016): 13267-13279.