

ANALIZA SPEKTROSKOPOWA SUPRAMOLEKULARNYCH AGREGATÓW KSANTOFILI

Celem projektu jest opisanie i zrozumienie podstaw nowego zjawiska optycznego związanego ze wzmocnieniem intensywności rozpraszania ramanowskiego światła o polaryzacji kołowej, spowodowanego agregacją chiralnych karotenoidów. Przedmiotem badań jest seria chiralnych ksantofili (tlenowe pochodne karotenów), różniących się strukturą chemiczną (ilością sprzężonych wiązań podwójnych, ilością centrów chiralności i symetrią). Ksantofile ze względu na swoją budowę chemiczną mają silne właściwości przeciwutleniające, a co się z tym wiąże pełnią rolę ochronną przeciw chorobom układu sercowo-naczyniowego, układu odpornościowego, jak również przeciwko stanom zapalnym i chorobom neurodegeneracyjnym. Biodostępność i aktywność przeciwutleniająca ksantofili zależy może od formy występowania (monomery, agregaty), dlatego badania procesów agregacji są niezwykle ważne.

Planowane badania obejmować będą analizę spektroskopową wybranych chiralnych ksantofili (np. neoksantyna, fukoksantyna, zeaksantyna, ansteraksantyna) zarówno w postaci monomerycznej jak również w postaci helikalnych, supramolekularnych agregatów. Struktura monomerów ksantofili badana będzie w fazie stałej oraz w roztworach różnych rozpuszczalników organicznych, natomiast agregaty syntezowane i badane będą w roztworach zawierających wodę oraz rozpuszczalniki organiczne w różnych stosunkach objętościowych. Podyktowane jest to faktem, iż agregacja ksantofili (związków nierozpuszczalnych w wodzie) następuje w środowisku wodno-organicznym. Zbadany zostanie również wpływ czynników strukturalnych oraz środowiska na proces agregacji, strukturę produktu końcowego oraz parametry otrzymanych widm.

Narzędziem badań będzie szereg metod spektroskopowych zarówno tych standardowych tj. spektroskopia w podczerwieni IR, spektroskopia absorpcyjna UV-Vis czy spektroskopia ramanowska, oraz ich chiralnych odpowiedników: wibracyjny dichroizm kołowy (VCD), elektronowy dichroizm kołowy (ECD) i Ramanowska Aktywność Optyczna (ROA). Pomiar spektroskopowe wzbogacone zostaną obliczenia teoretycznymi, które pozwolą na dokładniejszą analizę otrzymanych widm. Dodatkowo, jak się okazuje, agregacja powoduje silne wzmocnienie sygnału rezonansowego ROA, co umożliwia badanie układów chiralnych w bardzo niskim stężeniu, a w konsekwencji może w przyszłości zrewolucjonizować badania nad chiralnością i strukturą związków biologicznie aktywnych.

Zbadanie wpływu czynników związanych z procesem agregacji jak i wpływu parametrów strukturalnych monomerów i otoczenia na strukturę agregatów ksantofili pozwolą na szersze zrozumienie tego zjawiska zarówno w układach modelowych jak i w przyrodzie. Otrzymane wyniki dla układów modelowych mogą zostać ekstrapolowane na układy biologiczne. Otrzymane wyniki wypłyną również na rozwój Ramanowskiej Aktywności Optycznej – techniki młodej ale z dużym potencjałem; a przede wszystkim pozwolą na rozwinięcie i zrozumienie efektów wzmocnienia rezonansowego ROA wywołanego agregacją.