

Z życia codziennego wiemy, że (i) lewa dłoń jest lustrzanym odbiciem prawej dłoni, a (ii) lewa rękawiczka nie pasuje na prawą dłoń. Tak więc, mimo tego, że dłonie są ściśle ze sobą powiązane to nie są takie same. Tę fascynującą własność, tzw. chiralność, mają również cząsteczki. Nie wszystkie cząsteczki różnią się od swoich lustrzanych odbić, ale często te, które różnią się nią wykazują aktywność biologiczną.

Aby zrozumieć, jak ważna jest chiralność rozważmy dwa przykłady. Pierwszym przykładem jest lek, talidomid. Jeden enancjomer talidomidu jest teratogenem (powoduje deformacje kończyn płodu), podczas gdy drugi enancjomer ma właściwości lecznicze (był pierwotnie używany jako lek na poranne mdłości u kobiet w ciąży, obecnie jest używany jako lek immunosupresyjny). Drugim przykładem jest ludzki nos, który posiada fenomenalną zdolność rozróżniania niektórych chiralnych cząsteczek. Na przykład, (*S*)-karwon jest przede wszystkim odpowiedzialny za zapach kminku, a (*R*)-karwon jest głównie odpowiedzialny za zapach mięty. Dlatego, skuteczne metody wyznaczenia chiralności mogą mieć długofalowy wpływ na kontrolę procesów przemysłowych, np. przetwórstwa żywności. Ponadto Agencja Żywności i Leków wymaga monitorowania skrętności cząsteczek leku podczas całego procesu produkcyjnego. W związku z tym badania chiralności są bardzo intensywnie rozwijającą się dziedziną nauki, szczególnie w przypadku badań biologicznych i farmaceutycznych.

Metody rutynowo stosowanych w chemii w badaniach chiralnych cząsteczek mają wspólną cechę. Wymagają one użycia drugiej chiralnej substancji w celu odróżnienia enancjomerów (tj. odbić lustrzanych) danej cząsteczki. Jednakże, jeśli z jakichś powodów nie możemy skorzystać z tych standardowych technik (na przykład, gdy zaburzenie układu biologicznego jest niepożądane) inne metody badawcze są niezbędne.

Celem tego projektu jest stworzenie nowej metody, która mogłaby być użyta do tego celu. Planuje się modyfikację powszechnie stosowanej metody określania struktury cząsteczek, jaką jest magnetyczny rezonans jądrowy (MRJ). W proponowanych doświadczeniach zostanie zastosowane dodatkowe silne pole elektryczne. Oczekuje się, że pole elektryczne będzie indukować magnetyzację jądrową o przeciwnym kierunku dla enancjomerów danej cząsteczki. Zjawisko to nie zostało jeszcze doświadczalnie zaobserwowane, w związku z tym, jednym z celów niniejszego projektu jest obserwacja po raz pierwszy sygnałów MRJ zależnych od chiralności cząsteczki.

Dedykowana sonda do eksperymentu MRJ zostanie zbudowana z wykorzystaniem symulacji komputerowych. Właściwości optymalnej próbki do eksperymentu zostaną obliczone za pomocą zaawansowanych obliczeń kwantomechanicznych. Projekt będzie realizowany we współpracy międzynarodowej z partnerami z Niemiec i Francji.