

Natura ma niesamowitą zdolność tworzenia ogromnej liczby interesujących i złożonych cząsteczek. Wśród takich dzieł natury znajdują się terpeny – unikalne związki wytwarzane przez wiele roślin, które często wykazują ważną aktywność biologiczną i mogą mieć ogromny wpływ na zdrowie i samopoczucie, np. poprzez zabijanie niepożądanych bakterii, zmniejszanie stanów zapalnych w organizmie, a nawet hamowanie powstawania nowotworów. Jednym z takich terpenów, który budzi szczególne zainteresowanie, jest borneol, mała, ale znacząca cząsteczka obecna w wielu olejkach eterycznych. Powodem szczególnego zainteresowania borneolem jest to, że występuje on w czterech formach znanych jako stereoizomery, z których każda może wykazywać różne zachowania i interakcje w systemach biologicznych, wywierając różnego rodzaju wpływ na zdrowie i fizjologię.

Głównym celem tego projektu jest szczegółowe zrozumienie złożonych interakcji między czterema różnymi formami borneolu a cyklodekstrynami, naturalnie występującymi substancjami zbudowanymi z cząsteczek glukozy, połączonymi ze sobą w kształt ściętego stożka. Cyklodekstryny mają szczególną właściwość „gospodarowania” lub wychwytywania innych cząsteczek w swoich centralnych wnękach, podobnie jak rękawiczka, w której znajduje się dłoń. Cząsteczki te są już wykorzystywane w wielu gałęziach przemysłu, takich jak medycyna, kosmetyka i przemysł spożywczy, w celu znacznego zwiększenia rozpuszczalności, stabilności i skutecznego dostarczania składników aktywnych, a tym samym poprawy ich ogólnej skuteczności.

Aby dokładnie zbadać te fascynujące interakcje, wykorzystam technikę spektroskopii NMR, wysoce zaawansowane i potężne narzędzie analityczne, które pozwala nam dokładnie przyjrzeć się zachowaniu cząsteczek i ich ruchom w różnych roztworach. Moje eksperymenty będą polegały na ilościowym określeniu siły oddziaływań wiązania borneolu z kilkoma rodzajami cyklodekstryn, a także na ustaleniu szybkości, z jaką te konkretne cząsteczki wiążą się ze sobą. Biorąc pod uwagę, że cyklodekstryny posiadają niezwykłą zdolność rozróżniania różnych stereoizomerów, przeprowadzę również dogłębne badania w celu ustalenia, czy niektóre formy lub warianty borneolu wykazują większy stopień selektywnego wiązania w porównaniu z innymi.

Oprócz eksperymentów wykorzystam modelowanie komputerowe do obliczenia trójwymiarowych struktur borneoli i symulacji sposobu, w jaki są one włączane do cyklodekstryn (dokowanie molekularne). Symulacje będą uzupełniać wyniki eksperymentów i dadzą pełniejszy obraz tego, jak powstają kompleksy.

Jest to ważny projekt, który w elegancki sposób łączy najnowocześniejsze techniki eksperymentalne z najnowocześniejszymi technikami obliczeniowymi w celu lepszego zrozumienia sposobu, w jaki cząsteczki pochodzenia roślinnego oddziałują na siebie w pobliżu naturalnych cukrów-gospodarzy. Dane uzyskane w wyniku tych badań mogą pomóc w tworzeniu znacznie skuteczniejszych systemów dostarczania leków, a nawet przyczynić się do opracowania nowych materiałów.