

## **BADANIA SPEKTROSKOPOWE CHIRALNYCH KSANTOFILI ORAZ ICH SUPRAMOLEKULARNYCH AGREGATÓW**

Głównym celem naukowym prowadzonych badań jest analiza spektroskopowa chiralnych ksantofili oraz ich agregatów, przy zastosowaniu różnych metod spektroskopowych w tym ramanowskiej aktywność optycznej ze wzmocnieniem rezonansowym (RROA), oraz na zgłębieniu stosunkowo niedawno odkrytego, nowego efektu rezonansowego wzmocnienia sygnału ROA indukowanego agregacją ksantofili (AIRROA – ang. *Aggregated-Induced Resonance Raman Optical Activity*). Efekt AIRROA daje nadzieję na pomiary ROA związków chiralnych o niewielkim stężeniu, kilka rzędów wielkości niższym niż w przypadku konwencjonalnej spektroskopii ROA bez wzmocnienia rezonansowego.

Przedmiotem badań są ksantofile będące grupą związków chemicznych, naturalnych, żółto-czerwonych barwników organicznych, charakteryzujących się wysokimi właściwościami przeciwutleniającymi, pełniących rolę ochronną przeciw chorobom układu odpornościowego, układu sercowo-naczyniowego oraz przeciwko stanom zapalnym i chorobom neurodegeneracyjnym. Ksantofile w odpowiednich warunkach (również biologicznych), ulegają zjawisku agregacji, tworząc struktury o nieznannej budowie, prowadząc do zmiany wielu właściwości, takich jak biodostępność, trwałość czy właściwości przeciwutleniające. Dlatego badania procesu agregacji ksantofili są bardzo istotne. Narzędziem badań jest szereg technik spektroskopowych (spektroskopia ramanowska, IR, UV-Vis, ROA, VCD i ECD) oraz najnowsze rozwinięcie metody ROA: wzmocniona agregacją ramanowska aktywność optyczna AIRROA (ang. *Aggregation-Induced Resonance Raman Optical Activity*), pozwalająca na zarejestrowanie wysokiej jakości widma ROA w przeciągu kilku minut, dla substancji rozcieńczonych.

Badania podzielono na trzy główne zagadnienia. **Pierwsze**, to pomiary spektroskopowe monomerów chiralnych ksantofili. **Druga** część doktoratu skupia się na syntezie i pomiarach spektroskopowych agregatów ksantofili. W ramach tej części zaplanowano również zbadanie wpływu struktury monomerów oraz środowiska na proces agregacji, produkt końcowy oraz profil otrzymanych widm. **W trzecim** zagadnieniu doktoratu zaplanowano opis i interpretację wyników w oparciu o różne modele teoretyczne, wykorzystujące zaawansowane metody obliczeniowe. Dotychczasowe badania doprowadziły do odkrycia nowego efektu chiralooptycznego (AIRROA), zarejestrowanego po raz pierwszy dla agregatów astaksantyny, oraz potwierdzonego dla innych karotenoidów (zeaksantyny, luteiny i pochodnych). Dla wybranych ksantofili, zbadano również wpływ warunków środowiskowych na proces agregacji, profil widmowy i strukturę produktu końcowego. Ciekawym przykładem jest luteina, dla której niewielkie zmiany struktury prowadzą do otrzymania zupełnie innych układów supramolekularnych.

Do pełnej interpretacji wyników eksperymentalnych, a tym samym do opisu struktury otrzymanych agregatów, niezbędne jest przeprowadzenie zaawansowanych obliczeń teoretycznych różnych modeli agregatów, które zaplanowano w ramach wyjazdu na staż zagraniczny u wiodących specjalistów w tej dziedzinie.