



Středoškolská technika 2009
Setkání a prezentace prací
středoškolských studentů na ČVUT

HMOTNOSTNĚ SPEKTROMETRICKÉ STUDIUM KLUSTERŮ A SUPRAMOLEKUL

Adam Adday

Gymnázium Brno-Řečkovice
Terezy Novákové 2, Brno-Řečkovice

Hmotnostní spektrometrie, zejména MALDI TOF MS, je klíčovou technikou pro analýzu biomolekul nejen v proteomice. V této práci je ukázáno, že tuto instrumentální techniku je kromě proteomiky možno použít v režimu laserové ablace a ionizace i pro studium nízkomolekulárních, a to i anorganických látek, nano-materiálů (klusterů) a supramolekul.

V první části práce byla studiem ablace červeného fosforu zjištěna tvorba klusterů P_m ($m = 1, \dots, 95$) a studována dále jejich interakce s makrocikly kukurbiturilů ($CB[n]$, $n = 6, 8$) a fullerenem C_{60} . Tvoří se adukty $P_mCB[n]$, ale současně dochází k destrukci makrocyklů i struktury fullerenu reakcemi s fosforem.

V druhé části práce byla sledována tvorba supramolekul kukurbiturilů a různých organických sloučenin a komplexu platiny. Podařilo se prokázat tvorbu několika dosud nepopsaných supramolekul, a to 1,10-fenanthrolin@CB[8] u herbicidu Paraquatu: Paraquat@CB[6] a Paraquat@CB[8]. Nejvýznamnější jsou výsledky prokazující tvorbu supramolekulárních komplexů kancerostatika cis-(1-adamantan amin) - amine-dichloro platiny (LA9). Lze předpokládat, že supramolekulární komplexy LA9@CB[7] a LA9@CB[8], podobně jako komplex cis-platiny s CB, budou mít pravděpodobně také výrazně sníženou nefrotoxicitu a jsou tak perspektivní formou tohoto cytostatika pro lékařské aplikace.

Pro správnou identifikaci složení klusterů a supramolekul byla analýza všech hmotnostních spekter doprovázena počítačovým modelováním jejich izotopických obálek. Struktura supramolekul byla optimalizována kvantově chemickými výpočty počítačovým programem HyperChem.