



STRESZCZENIE ROZPRAWY DOKTORSKIEJ
„Analiza oddziaływań cukrów i ich pochodnych z jonami wapnia”

Mgr inż. Dariusz Toczek

Promotor: Prof. dr hab. inż. Roman Gancarz

W rozprawie przeanalizowano oddziaływania pomiędzy kationem wapnia a cukrami prostymi oraz ich pochodnymi (alditolami, kwasami cukrowymi, sulfonową pochodną cukru, glukozaminą oraz fosfonowymi pochodnymi cukrów) w stosunku molowym 1:1. Dla każdego z układów ligand-Ca²⁺ wyznaczono potencjalne miejsca kompleksowania oraz opisano je wielkościami umożliwiającymi ocenę badanych oddziaływań pod kątem ich siły, stabilności i trwałości tworzących się kompleksów.

Zastosowano model obliczeniowy, dzięki któremu uzyskano wiarygodne odwzorowanie strukturalne potencjalnych kompleksów. Wykorzystany model pozwolił na określenie wpływu rozpuszczalnika na badane oddziaływania w ujęciu globalnym oraz lokalnym poprzez podkreślenie oddziaływań zachodzących na granicy ligand-H₂O, kation-H₂O. Ponadto, uzupełnienie pierwszej sfery koordynacyjnej kationu wapnia pozwoliło na zidentyfikowanie stosunkowo silnych oraz słabych jednostkowych oddziaływań O-Ca²⁺.

W pracy wskazano, jak właściwości strukturalne tj. konformacja liganda czy ułożenie przestrzenne donorowych atomów tlenu wpływają na badane oddziaływania, stabilność tworzących się kompleksów oraz ich trwałość. Co więcej, określono dwie podstawowe funkcje związane z odpowiednim przestrzennym ułożeniem donorowych atomów tlenu. Dodatkowo, określono wpływ charakteru chemicznego (np. hydroksylowy, karboksylowy, karboksylanowy, fosfonowy, fosfonianowy, sulfonowy) donorowego atomu tlenu na badane oddziaływania. Oszacowano średnie energie jednostkowych oddziaływań O-Ca²⁺ ze względu na typ donorowego atomu tlenu.

Bazując na otrzymanych wynikach zaproponowano schemat postępowania przy projektowaniu nowych ligandów o zadanym właściwościach kompleksujących.