

# **Streszczenie pracy doktorskiej**

**Piotr Paluch**

**Rozwój i implementacja metod spektroskopii NMR w ciele stałym z wykorzystaniem bardzo szybkiego wirowania próbek pod kątem magicznym**

**Centrum Badań Molekularnych i Makromolekularnych Polskiej Akademii Nauk, Sienkiewicza 112, 90-363 Łódź**

Przedstawiona dysertacja składa się z trzech głównych wątków, których wspólnym mianownikiem jest aplikacja techniki szybkiego wirowania pod kątem magicznym (UF-MAS) w badaniach strukturalnych z wykorzystaniem spektroskopii NMR.

Pierwszy wątek dotyczy implementacji technik odwrotnej detekcji w ciele stałym. Badanie te miały na celu poprawę czułości stosowanych eksperymentów i pozwoliły na uzyskanie informacji niedostępnych innymi metodami. Ich głównym celem była próba charakterystyki struktury kompleksu typu gość - gospodarz 5,10,15-tris(pentafluorofenylo)korolu.

Druga część pracy dotyczy zastosowania techniki UF-MAS w badaniach procesów dynamicznych. Analiza takich procesów jest niezwykle istotna dla zrozumienia budowy kryształów, ich struktury, a w konsekwencji własności.

W ramach prowadzonych badań opracowane zostały techniki 2D CP-VC i 3D CP-VC, pozwalające na badanie istotnych procesów dynamicznych, a także parametrów geometrycznych cząsteczek. Zaprojektowane eksperymenty zostały przetestowane na modelowych układach

aminokwasów oraz peptydów. Dodatkowo wykonane zostały symulacje numeryczne potwierdzające użyteczność oraz dokładność zaproponowanych metod. Po przeprowadzeniu badań na układach modelowych podjąłem próbę aplikacji tych metod w badaniach złożonych układów, jakimi są kryształy białek. Prace te pozwoliły po raz pierwszy przeanalizować dynamikę aromatycznych łańcuchów bocznych na przykładzie dwóch niewielkich białek GB-1 oraz LC-8. Kolejnym aspektem prowadzonych badań było połączenie techniki CP-VC z detekcją odwrotną, co pozwoliło na kilkukrotną poprawę czułości eksperymentu.

Ostatnia część pracy dotyczy aplikacji techniki UF-MAS w odniesieniu do jąder kwadrupolowych. W prowadzonych badaniach skupiłem się na ustaleniu możliwości zastosowania techniki CP w warunkach UF-MAS do rejestracji widm  $^{27}\text{Al}$ . Wyniki eksperymentów potwierdziły użyteczność stosowanych metod i pozwoliły na charakterystykę wybranych katalizatorów metalicznych osadzonych na podłożu typu glinowego.

Otrzymane wyniki zostały opisane w sześciu publikacjach oryginalnych w czasopiśmie o zasięgu międzynarodowym. Prace te stanowią zasadniczą część przedstawionej pracy doktorskiej. Każda z prac została pokrótce omówiona, jednak prezentowane podrozdziały należy traktować jako swoistą przedmowę zawierającą opis idei i motywacji do podjęcia badań, które zostały szczegółowo opisane w każdej z publikacji i nie będą tutaj ponownie omawiane. Umieszczone krótkie opisy nie są streszczeniem lub tłumaczeniem oryginalnych prac. Ich głównym zamierzeniem jest więc zaprezentowanie koncepcji prowadzonych badań.