

---

**Ewelina Wielgus**  
Centrum Badań Molekularnych i Makromolekularnych  
Polskiej Akademii Nauk  
Środowiskowe Laboratorium  
Badań Fizykochemicznych

***Zastosowanie spektrometrii mas w badaniach wybranych chiralnych  
połączeń heterocyklicznych***

Spektrometria mas (ang. *Mass Spectrometry*, MS) to obecnie jedna z najpowszechniej używanych i najbardziej uniwersalnych metod instrumentalnych wykorzystywanych w analizie chemicznej. Uzyskana za jej pomocą dokładna masa cząsteczkowa związku chemicznego, jest informacją niezbędną nie tylko w charakterystyce związków syntezowanych, ale również w określeniu struktury związków nieznanymi, czy ustalaniu składu jakościowego i ilościowego mieszanin. Obserwowany na przestrzeni ostatnich lat ogromny postęp technologiczny, wprowadzenie nowych i udoskonalanie dotychczas stosowanych technik jonizacji badanych układów, a także rozwój wydajnych sposobów przetwarzania danych sprawiły, iż spektrometria mas, daje możliwość badania zarówno związków organicznych, jak i nieorganicznych w bardzo szerokim zakresie mas cząsteczkowych oraz układów w różnych stanach skupienia.

Celem mojej pracy doktorskiej była charakterystyka niskocząsteczkowych związków bioorganicznych z wykorzystaniem spektrometrii mas. Wśród nich znalazły się pochodne 1,2–diaminoalkanofosfonianów, pochodne oksazolidynonowe i układy peptydowe. Wspólną cechą wybranych do badań układów jest obecność w ich strukturze pierścienia heterocyklicznego, posiadającego przynajmniej jedno centrum asymetrii.

W części literaturowej mojej pracy omówione zostały możliwości aplikacyjne współczesnej spektrometrii mas. Z uwagi na to, że wybrane do badań układy to związki chiralne, krótko scharakteryzowałam najpowszechniej wykorzystywane techniki jonizacji oraz sposoby analizy wygenerowanych jonów, ze szczególnym uwzględnieniem tych stosowanych w badaniach układów optycznie czynnych. Obszerny rozdział poświęciłam metodom rozróżniania enancjomerów, których analiza tradycyjnymi metodami analitycznymi przysparza wiele trudności. Na zakończenie przedstawione zostały możliwości jakimi dysponuje współczesna spektrometria mas w badaniach układów diastereoizomerycznych.

---

---

Rozdział ten stanowi bezpośrednio wprowadzenie do zasadniczej części mojej dysertacji poświęconej właśnie rozróżnianiu diastereoizomerów.

W trakcie prowadzonych badań wykazałam, iż spektrometria mas jest znakomitą metodą, którą można zastosować w rozwiązywaniu takich problemów jak rozróżnianie diastereoizomerów (pochodne kwasów 1,2-diaminoalkanofosfonowych). Potwierdziłam również, że doskonałym narzędziem, dostarczającym dodatkowych informacji na temat procesów fragmentacji, które zachodzą w trakcie jonizacji analizowanych związków są obliczenia teoretyczne oparte na teorii funkcjonału gęstości.

Bardzo interesującą grupę związków ze względu na niezwykle własności fizykochemiczne stanowią azydki. Wysoka reaktywność oraz termiczna nietrwałość azydków sprawia, iż ich charakterystyka strukturalna dostarcza wielu eksperymentalnych problemów. W trakcie prowadzonych badań wykazałam, iż doskonałym narzędziem w analizie chiralnych związków zawierających ugrupowanie azydkowe jest spektrometria mas, która dodatkowo dostarcza istotnych informacji na temat mechanizmów fragmentacji takich układów.

W ostatniej części moich badań potwierdziłam doskonałą użyteczność i komplementarność spektrometrii mas z innymi metodami wykorzystywanymi standardowo w identyfikacji produktów reakcji, na przykładzie badań procesów termicznych w kryształach krótkich peptydów (2,5-diketopiperazyny). Wykorzystując spektrometrię mas i spektroskopię magnetycznego rezonansu jądrowego w ciele stałym (ang. *Solid State Nuclear Magnetic Resonance*, SS NMR) podjęłam próbę ustalenia mechanizmu tworzenia wspomnianych struktur w fazie stałej.

Badania zrealizowane w ramach mojej pracy doktorskiej wykazały użyteczność spektrometrii mas, jako metody instrumentalnej w opisie różnych aspektów związanych z charakterystyką związków organicznych, których trudno dokonać wykorzystując inne techniki analityczne.