

# Modelowanie rozpadu cząsteczek heterocyklicznych za pomocą metod chemii kwantowej

M. Łabuda

*Wydział Fizyki Technicznej i Matematyki Stosowanej,  
Politechnika Gdańska,  
ul. Narutowicza 11/12, 80-233 Gdańsk  
e-mail: marta.labuda@pg.edu.pl*

Od kilku lat nasze zainteresowania koncentrują się na badaniach wpływu promieniowania jonizującego na środowisko biologiczne [1, 2]. Z aplikacyjnego punktu, badania tego typu mają ogromne znaczenie w medycynie, a szczególnie w badaniach nad uszkodzeniami DNA i RNA oraz w radioterapii. W szczególności, rozerwanie pojedynczej i podwójnej nici DNA, spowodowane przejściem promieniowania przez tkankę, jest jednocześnie głównym mechanizmem powodującym zmiany nowotworowe oraz czynnikiem kontrolującym niszczenie komórek. Poznanie i identyfikacja ścieżek tych reakcji jest obecnie najbardziej efektywnym sposobem uszkodzania DNA i ma duży wpływ na odkrywanie potencjalnych procesów naprawczych tkanek [3, 4].

Uszkodzenia te na poziomie molekularnym są wynikiem zdarzeń fizycznych: deponowania ilości energii do układu oraz wytwarzania zjonizowanych i wzbudzonych stanów cząsteczek, biorących udział w reakcjach lub zdarzeń chemicznych: produkcji rodników i innych cząsteczek, produktów rozpadu reakcji. Z perspektywy fizyka, w przypadku badań teoretycznych i doświadczalnych na poziomie molekularnym oznacza to badanie procesów fragmentacji i dysocjacji cząsteczek, które stanowią modele strukturalne składników DNA i RNA.

Z punktu widzenia teorii bezpośrednim i najbardziej istotnym celem badawczym jest zatem rozwinięcie metodologii, umożliwiającej opis procesu rozpadu cząsteczek w różnych podejściach:

- (1) przy użyciu metody dynamiki molekularnej, dzięki której będzie możliwy statystyczny opis procesów zachodzących podczas zderzenia, a także identyfikacja kanałów rozpadu cząsteczek w czasie;
- (2) poprzez badanie energetycznych aspektów rozpadu, czyli eksplorację powierzchni energii potencjalnej
- (3) zastosowaniem nowego podejścia w oparciu o założenia mechaniki statystycznej, umożliwiającego reprodukcję widm masowych cząsteczek, a co za tym idzie – bezpośrednią weryfikację z eksperymentem [5, 6].

Konsekwencją ostatniego założenia jest również adaptacja i implementacja numeryczna użytej metody. W szczególności, zaproponowane ujednolicone podejście metodologiczne zastosowano do badania oddziaływań i poznania mechanizmów procesów

zachodzących w cząsteczkach pierścieniowych (organiczne związki heterocykliczne, z ang. heterocyclic organic molecules (HOMs)). W naszych badaniach HOMs to wybrane pięcio- i sześćo-członowe związki jak: furan ( $C_4H_4O$ ), izoksazol ( $C_3H_3NO$ ), pirydyna ( $C_5H_5N$ ) i pirymidyna ( $C_4H_4N_2$ ) oraz ich analogi. Mogą one służyć jako proste analogi i prototypy składników struktury DNA (kwasy nukleinowe, deoxyryboza) w kontekście badań nad wpływem promieniowania jonizującego na materiał biologiczny. W prezentacji przedstawię otrzymane rezultaty obliczeń dla wybranych układów.

### Podziękowania

Praca powstała w ramach Europejskiego Programu Współpracy w Dziedzinie Badań Naukowo-Technicznych (COST) sieci *Molecular Dynamics in the Gas Phase* (MD-GAS). Autorka pragnie podziękować również Centrum Informatycznemu Trójmiejskiej Akademickiej Sieci Komputerowej za dostęp do zasobów komputerów dużej mocy obliczeniowej.

### Bibliografia

- [1] Erdmann E., M. Łabuda, Aguirre N. F., Díaz-Tendero S., Alcamí M., J. Phys. Chem. A 122, 4153-4166 (2018).
- [2] Erdmann E., Bacchus M.-C., Łabuda M., Phys. Chem. Chem. Phys. 19, 19722-19732 (2017).
- [3] Belkić D., Fast Ion-Atom and Ion-Molecule Collisions, World Scientific (2012).
- [4] Whelan C, Fragmentation Processes: Topics in Atomic and Molecular Physics, Cambridge Press (2012).
- [5] Zettergren H., Domaracka A., Schlathölter T., Łabuda M. et al., Eur. Phys. J. D 75, 152 (2021).
- [6] Erdmann E., . . . , M. Łabuda, Phys. Chem. Chem. Phys. 23, 1859-1867 (2021).