

Záverečná karta projektu

Názov projektu

Evidenčné číslo projektu

APVV-0310-07**Účinok elektrónmi indukovaných ionizačných reakcií na aminokyseliny a peptidy**Zodpovedný riešiteľ **prof. RNDr. Ján Urban, DrSc.**Príjemca **FMFI UK****Názov pracoviska, na ktorom bol projekt riešený**

1. FMFI UK
- 2.
- 3.
- 4.
- 5.

Názov a štát zahraničného pracoviska, ktoré spolupracovalo pri riešení

1. Lehrstuhl fuer Theoretische Chemie, Ruhr-Universität Bochum, SRN
2. MFF KU Praha, Česká republika
3. Institut fuer Ionenphysik und Angewandte Physik, Uni-Innsbruck, Rakúsko

Udelené patenty/podané patentové prihlášky, vynálezy alebo úžitkové vzory, ktoré sú výsledkami projektu

- 1.
- 2.
- 3.

Najvýznamnejšie publikácie (knihy, články, prednášky, správy a pod.) zhrňujúce výsledky projektu – uveďte aj publikácie prijaté do tlače

1. Calculation of S-matrix poles by means of analytic continuation in the coupling constant: Application to the $2\Pi_g$ state of N_2^- , Phys. Rev A 82 032713 (2010) J. Horáček, P. Mach and Ján Urban
2. Dissociative electron attachment to methyl chloride: A quasi-diatomic potential curve for the fragmentation of the metastable CH_3CL^- anion / P. Mach, J. Urban, V. Staemmler Chemical Physics, Vol. 356, No. 1-3, Sp. Iss. (2009), s. 164-170
3. P. Papp, P. Shchukin, Š. Matejčík: Specific formation of negative ions from leucine and isoleucine molecules. The Journal of Chemical Physics, 132, 014301 (2010)
4. Electron impact ionization of furanose alcohols, J. Chem. Phys. 132, 104308 (2010), A.R.

Milosavljevic, J. Kočíšek, P. Papp, D. Kubala, B.P. Martinkovič, P. Mach, J. Urban and Š. Matejčík

5. A DFT study of H-isomerisation in alkoxy-, alkylperoxy-, and alkyl radicals: Some implications for radical chain reactions in polymer systems, Polymer Degradation and Stability 96 (2011) 660-669, O. Kyseľ, Š. Budzák, M. Medveď and P. Mach

Uplatnenie výsledkov projektu

Výskum v rámci projektu bol základný. Nami navrhnutá metodika umožňuje charakterizovať prechodne vzniknuté nestabilné ióny, štruktúru produktov a energetiku fragmentačných reakcií. Vybudovaný experiment dokonale sleduje elementárne procesy spôsobené zachytním elektrónu s molekulami. Oba prístupy možno využiť pre štúdium ďalších molekúl.

CHARAKTERISTIKA VÝSLEDKOV

Súhrn výsledkov riešenia projektu a naplnenia cieľov projektu v slovenskom jazyku (max. 20 riadkov)

Experiment pripravený v laboratóriu v Bratislave umožňuje sledovať produkty vznikajúce po zrážke elektrónu s aminokyselinou. Keďže hmotnostný spektrometer neanalyzuje štruktúru ale poskytuje len údaj o hmotnosti fragmentových iónov, kvalitu práce dopĺňajú kvantovochemické výpočty geometrií a prahových energií možných vznikajúcich fragmentov jednotlivých reakčných kanálov. Tieto výsledky umožňujú interpretovať namerané údaje a navrhnúť štruktúru aj neutrálnych fragmentov. Podarilo vyriešiť popis prechodne vzniknutých nestabilných negatívnych iónov. ACCC prístup upravený na túto problematiku, umožňuje kvalitný popis šírky rezonancie a tiež rezonančnej energie. Vyriešila sa metodika na popis nestabilných negatívnych iónov, aplikovali sme ju na molekuly CH_3Cl^- a N_2^- . Vypočítali sme charakteristiky aj pre molekuly kyseliny mravčej a jej diméru ako aj nestabilné negatívne ióny fragmentačných reakcií. Charakterizovali sme fragmentačné kanály interakcie elektrónov s leucínom, izoleucínom, serínom, dipeptidmi Gly-Gly. Štúdium molekúl furánového typu (3-hydroxytetrahydrofuran 3HTHF, α -tetrahydrofurfuryl alkohol THFA), modelových zlúčenín pre vplyv interakcie elektrónov s nukleovými kyselinami ukázalo fragmentačné kanály tohto typu biomolekúl. Radikály, ktoré sú produktami fragmentácií charakterizovalo štúdium zamerané na migrácie centier radikálov.

Súhrn výsledkov riešenia projektu a naplnenia cieľov projektu v anglickom jazyku (max. 20 riadkov)

Experiment set up in Bratislava allows to determine the products formed after the attachment of the electrons to amino acids. Mass spectrometry does not analyze the structure, it gives the mass data. The results are completed by the quantum chemical calculations of the geometry and appearance energies of the possible formed fragments. These results allow to interpret the measured data and to propose the structure of ions and neutral molecules. ACCC approach adapted to solve this problem enables description of the resonance width as well as the resonance energy. The methodology of the description of temporary negative ions has been solved and applied to CH_3Cl^- and N_2^- molecules. We have calculated the characteristics of formic acid and its dimer as well as temporary negative ions of the fragmentation reactions. We characterised the fragmentations channels for electron attachment to leucine, isoleucine, serine and dimer Gly-Gly. The study of the molecules of the furanose type (3-hydroxytetrahydrofuran 3HTHF and α -tetrahydrofurfuryl alcohol THFA), model compounds for the influence of the interactions of electrons with nucleic acids revealed the fragmentation channels of this type of biomolecules. Radicals, also the products of the fragmentation, have been characterized by the study oriented to the migration of radical centers.

Svojím podpisom potvrdzujem, že údaje uvedené v záverečnej karte sú pravdivé a úplné a súhlasím s ich zverejnením.

Zodpovedný riešiteľ

prof. RNDr. Ján Urban, DrSc.

V Bratislave 26.07.2011

Štatutárny zástupca príjemcu

prof. RNDr. Jozef Masarik, DrSc.

V Bratislave 27.07.2011

.....
podpis zodpovedného riešiteľa

.....
podpis štatutárneho zástupcu príjemcu