

## ELECTRON TRAPS IN ORGANISCHE KRISTALLEN

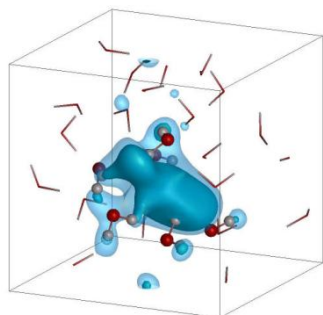
Wanneer biomoleculen (DNA, aminozuren, suikers, ...) blootgesteld worden aan ioniserende straling, worden radicalen - structuren met een ongepaard elektron – gecreëerd. Deze kunnen biologische implicaties hebben of bijv. als dosimeter gebruikt worden. Omwille van hun praktische en fundamentele belang, is de stralingschemie van deze systemen een actief onderzoeksdomein, zowel experimenteel als theoretisch-computationeel. Vaak worden daarbij “eenvoudige” modelsystemen bestudeerd en experimenteel onderzoek wordt steeds meer aangevuld met kwantumchemische berekeningen.

X-straling deponeert het merendeel van zijn energie in de materie door het ‘wegslaan’ van elektronen uit hun moleculaire orbitalen. Deze elektronen thermaliseren en worden uiteindelijk ingevangen door een molecule, met de vorming van een radicaal tot gevolg. Onder bepaalde omstandigheden kunnen de elektronen ook in een intermoleculaire elektronval (electron trap) terecht komen. Worden ze via thermische, UV- en/of optische excitatie uit die (ondiepe) val bevrijd, dan worden alsnog moleculaire radicalen gevormd.

Dergelijke systemen met ongepaarde elektronen kunnen experimenteel nauwkeurig gekarakteriseerd worden in termen van elektronen paramagnetische resonantie (EPR) parameters, bijv. de hyperfijninteracties van de elektronspin met de spins van waterstofkernen in het omringende rooster. De berekening van EPR-parameters laat dan toe theoretische resultaten met experimentele data te confronteren.

Specifiek: Het hoofddoel van de thesis is het modelleren van intermoleculair gevangen elektronen in organische kristallen. De student doet in feite “virtuele experimenten”: met behulp van gebruiksvriendelijke softwarepakketten worden computersimulaties op basis van kwantumfysica uitgevoerd. Concreet kan het thesiswerk o.a. volgende aspecten omvatten (ook afhankelijk van de interesse van de student):

- grondige literatuurstudie en zelf testen van verschillende theoretische methoden om gevangen elektronen te modelleren, met de bedoeling inzicht te verwerven in de theoretische achtergrond en een efficiënt ‘simulatieprotocol’ te bepalen
- simuleren van intermoleculair gevangen elektronen in een aantal suikers en eventueel andere biomoleculen
- berekening van EPR-parameters van deze structuren
- mogelijke reactiepaden onderzoeken voor de conversie van het gevangen elektron naar een moleculair radicaal, bijv. via moleculaire dynamicsimulaties.



Dit project omvat 'nieuw' onderzoek binnen de groep, zodat de studie eerder verkennend (en zeker niet routinematig) zal zijn. De student kan daarbij wel rekenen op intensieve begeleiding.

*Een 'exces elektron' creëert in water een eigen holte met een solvatatieschil. Op de figuur staat de elektronische ladings-dichtheid afgebeeld als een blauwe wolk. Gelijkaardige electron traps/trapped electrons worden gecreëerd door X-straling in organische kristallen.*

---

**Promotoren:** Dr. E. Pauwels – [ewald.pauwels@ugent.be](mailto:ewald.pauwels@ugent.be) (09/264 65 62), Prof. Dr. ir. V. Van Speybroeck [veronique.vanspeybroeck@ugent.be](mailto:veronique.vanspeybroeck@ugent.be) (09/264.65.58) / **Begeleiding:** Dr. E. Pauwels [ewald.pauwels@ugent.be](mailto:ewald.pauwels@ugent.be) (09/264 65 62) / <http://molmod.ugent.be/student-corner>