

Konstrukcja i poznanie mechanizmów działania oraz dynamiki związków, których budowa i funkcja odpowiada działaniu urządzeń mechanicznych w makroświecie jest obok syntezy asymetrycznej jednym z ważniejszych działów nowoczesnej chemii. Takie urządzenia molekularne (molekularne maszyny) są zdolne do wykonywania pracy mechanicznej lub gromadzenia, bądź przetwarzania, informacji na poziomie pojedynczych cząsteczek. Zależnie od roli jaką takie cząsteczki pełnią można wyróżnić, m.in.: molekularne motory (zdolne do wykonywania jednokierunkowego ruchu pod wpływem zewnętrznego bodźca), przełączniki (charakteryzujące się co najmniej dwoma stanami stacjonarnymi o różnych właściwościach fizykochemicznych, i możliwością przemiany jednego stanu w drugi pod wpływem zewnętrznych bodźców), sensory (reagujące specyficznie na dostarczone bodźce), zębatki (w których występuje skorelowany ruch między częściami molekuly), śmigła (reprezentujące jednokierunkowy zsynchronizowany ruch). Ta sama cząsteczka lub jej fragment może być zaklasyfikowana do różnych podgrup, w zależności od pełnionej aktualnie funkcji.

Fascynująca stereochemia molekularnych śmigieł, o wzorze ogólnym $YXAr_3$, od kilku dekad stanowi atrakcyjny przedmiot badań. Grupa trifenylometylowa (tritylowa) – najprostszy molekularny propeller jest powszechnie używana w syntezie do zabezpieczania reaktywnych grup funkcyjnych. Kation tritylowy był pierwszym odkrytym stabilnym karbokationem.

Kształt i dynamika strukturalna grupy tritylowej (Ph_3C- , trityl, Tr), zależnie od wyobraźni obserwatora, może zostać opisana jako propeller (śruba okrętowa) lub trójlistna koniczyna. Obniżenie symetrii propellera skutkuje zmianą mechanizmu działania tritylu z propellera na przekładnię zębatą.

Przedstawiony projekt stanowi próbę wykorzystania dużej zmienności strukturalnej pochodnych triarylometanu w chemii supramolekularnej oraz w syntezie stereoselektywnej. Zamierzamy wykazać użyteczność i wszechstronność pochodnych triarylometanu jako: sond stereochemicznych, selektorów i receptorów molekularnych, ligandów, katalizatorów i pomocników chiralnych w syntezie stereoselektywnej oraz jako związków wykazujących zdolność do inkluzji i rozpoznania molekularnego w kryształach.

Zamierzamy wykazać przydatność jako receptorów i selektorów molekularnych prostych pochodnych alkaloidów jak również układów złożonych, będących molekularnymi odpowiednikami rozpowszechnionego w niemal wszystkich morzach świata organizmu, jakim jest koralowiec sześciopromienny (ukwiał), w tym przypadku o zredukowanej do trzech liczbie ramion.

Zainteresowanie mechanizmem indukcji i transferu chiralności jest naturalną konsekwencją naszych wcześniejszych prac nad sondami chromoforowymi, molekularnymi propellerami i motorami oraz syntezą asymetryczną. Ciągłe natomiast nieznanym jest mechanizm transferu chiralności w układach, w których reporter jest związany z induktorem łącznikiem również mogącym dynamicznie adaptować się do chiralnego otoczenia. Kaskadowa („podwójna” lub „potrójna”) indukcja i transfer chiralności, rozumiana jako sekwencyjne przeniesienie informacji strukturalnych od induktora do reportera i dalej do prochiralnego substratu nie była przedmiotem zainteresowań.

Samooorganizacja cząsteczek organicznych w twory wyższego rzędu obok rozpoznania molekularnego i indukcji (transferu) chiralności jest jednym z fundamentalnych procesów przebiegających w organizmach żywych. Podwójna helisa DNA, agregaty białkowe czy wirus mozaiki tytoniowej są sztandarowymi przykładami samooorganizacji w układach biologicznych. Z kolei zdolność do rozpoznania molekularnego przez układy receptorowe jest czynnikiem decydującym o aktywności biologicznej danego związku chemicznego, w tym zróżnicowaną aktywnością biologiczną enancjomerów. Niechlubnym przykładem jest tu talidomid, którego jeden z enancjomerów wykazywał właściwości teratogenne. Transfer (lub indukcja) chiralności jest ogólną nazwą obejmującą zarówno proces przeniesienia informacji o trójwymiarowej strukturze układu na cząsteczkę substratu na etapie biosyntezy lub sposób, w jaki labilne konformacyjnie otoczenie adaptuje się do chiralnego czynnika indukującego (induktora).

Ponadto, chcemy wykazać, że wzajemne współdziałanie na dwóch płaszczyznach – eksperymentalnej i teoretycznej prowadzić będzie do udanej „koabitacji” specjalistów z obydwu dziedzin. Takie eksperymentalno-teoretyczne podejście do badań mechanizmu indukcji chiralności, sposobu, w jaki duże cząsteczki mogą tworzyć układy „ponad cząsteczkowe” i mechanizmu rozpoznawania cząsteczek polarnych, głównie aminokwasów, przez układy receptorowe pozwoli na poznanie mechanizmu wybranych zjawisk o fundamentalnym znaczeniu w chemii i biochemii.