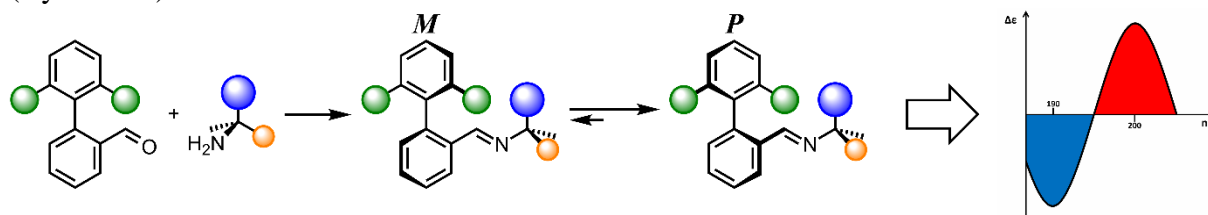


Detekcja chiralności przez stereodynamiczne sondy chromoforowe

Słowo *chiralność*, wywodzi się z greckiego słowa $\chi\epsilon\iota\rho$ – “ręka” i oznacza, że obiekt wyjściowy oraz jego lustrzane odbicie nie są identyczne. Chiralność związków chemicznych pełni kluczową rolę w licznych kowalencyjnie oraz nie kowalencyjnie związanych układach biologicznych takich jak: enzymy, DNA, leki itp. Transfer chiralności (lub detekcja chiralności) polega na przeniesieniu informacji na temat trójwymiarowej struktury jednej cząsteczki na drugą i może być dogodnie badany z wykorzystaniem stereodynamicznych sond chromoforowych. Sondy te (inaczej zwane receptorami) są konformacyjnie labilne, a tym samym zdolne do dostosowania swojej konformacji do chiralnego otoczenia. W wyniku transferu chiralności z chiralnej, nieracemicznej cząsteczki induktora na dynamiczną konformacyjnie cząsteczkę receptora, cały układ, niezależnie od tego, czy związany jest oddziaływaniami kowalencyjnymi, czy supramolekularnymi staje się optycznie czynny w spektroskopii dichroizmu kołowego (Rysunek 1).



Rysunek 1. Transfer chiralności w kowalencyjnie związanym układzie typu induktor-receptor.

Celem projektu jest opracowanie nowych, di- i triarylowych dynamicznych sond chromoforowych oraz zastosowanie ich w badaniach zjawiska transferu chiralności w kowalencyjnie związanych układach typu induktor-receptor. Aby osiągnąć główne cele projektu, przeprowadzimy syntezę nowych sond chromoforowych z wykorzystaniem dobrze znanych metod lub ich modyfikacji. Skuteczność nowych sond zostanie sprawdzona na przykładzie licznych cząsteczek induktorów o różnorodnej konstytucji i właściwościach sterycznych. Spodziewamy się zaobserwować charakterystyczne dwuznakowe efekty Cottona na widmach elektronowego dichroizmu kołowego (ECD) spowodowane przez dostosowanie się cząsteczki receptora do chiralnego induktora. Wszystkie uzyskane dane eksperymentalne zostaną potwierdzone przez obliczenia kwantowo-chemiczne na poziomie DFT.

Nasze badania skutkować będą głębokim zrozumieniem transferu chiralności w obrębie układów typu induktor-receptor wykorzystujących nieznane dotąd sondy di- i triarylowe. Ponadto, zaproponowany zostanie mechanizm działania nowych sond oraz ich potencjalne zastosowanie w oznaczeniach stereochemicznych.