

Chiralne Naftalenodiimidy: Od Syntezy do Zastosowań

Ostatnio zsyntezowaliśmy chiralne naftalenodiimidy (NDI), dzięki którym skonstruowaliśmy enancjoselektywny sensor teratogennego (*S*)- i terpeutycznego (*R*)-*Talidomidu* w osoczu krwi. Inne zsyntezowane przez nas atropoizomeryczne pochodne NDI (wykazujące wewnątrzcząsteczkowe wiązanie typu *charge-transfer*) pozwoliły nam zaobserwować indukowanie chiralności w rozpuszczalniku za pomocą widm Ramanowskiej Aktywności Optycznej (ROA). W wypadku różnych chiralnych pochodnych NDI nasze pomiary metodą spektroelektrochemii ECD (SEC ECD), stosowaną w Polsce po raz pierwszy, pozwoliły pogłębić interpretację przebiegu procesów elektrochemicznych w związkach chiralnych uzupełniając wnioski uzyskane na podstawie badań UV-Vis SEC i EPR-SEC. Nasze prace były wspierane pomiarami metodami spektroskopii molekularnej i rentgeno-strukturalnymi oraz obliczeniami kwantowo-chemicznymi. W nowym projekcie zamierzamy przełamać kolejne bariery.

Mamy trzy główne cele projektu:

- (1) Skonstruować nowe enancjoselektywne sensory elektrochemiczne chiralnych leków.
- (2) Wyjaśnić rolę rezonansowego przeniesienia energii (RET) w transferze chiralności obserwowanym metodą Ramanowskiej Aktywności Optycznej.
- (3) Wykonać pierwsze w Polsce i bardzo rzadkie na świecie pomiary spektroelektrochemiczne metodą Magnetycznego Dichroizmu Kołowego (MCD SEC), towarzyszące pomiarom SEC ECD, UV-Vis i EPR.

Aby te cele zrealizować:

- (1) Zsyntezujemy nowe chiralne NDI [UPH Siedlce], które dzięki półprzewodnictwu (typu *n*, *p*, lub ambipolarnemu) znajdą kolejne zastosowania jako sensory elektrochemiczne.
- (2) Zbudujemy nowe enancjoselektywne elektrochemiczne sensory leków chiralnych lub substancji bioaktywnych [UW].
- (3) Wykonamy kompleksowe pomiary spektroskopowe (ECD, VCD, MCD [IChTJ], ROA [UJ], NMR [UPH Siedlce], rentgenostrukturalne [IChTJ], elektrochemiczne [PŚ Gliwice] i kwantowo-chemiczne [IChTJ, CMDiK PAN] charakteryzujące właściwości nowych chiralnych NDI i ich oddziaływań międzycząsteczkowych [IChTJ, CMDiK PAN] z chiralnymi celami sensorów [UW, WUM].
- (4) Wykonamy pomiary ROA serii zsyntezowanych chiralnych naftalenodiimidów [UJ] pozwalające zweryfikować różne hipotezy co do typu i zasięgu rezonansowego przeniesienia energii (RET) towarzyszącego zjawisku indukowania chiralności w spektroskopii ROA [UJ, IChTJ].
- (5) Wykonamy pomiary MCD SEC serii związków modelowych i zsyntezowanych chiralnych naftalenodiimidów oraz porównamy je z pomiarami SEC ECD, UV-Vis i EPR [PŚ Gliwice, IChTJ].

Spodziewany efekt projektu:

- (1) Skonstruujemy nowe sensory chiralnych leków/biomolekuł umożliwiające kontrolę poziomu terapeutycznych i/lub toksycznych substancji w płynach ustrojowych.
- (2) W pełni zrozumiemy zjawisko indukowania chiralności w spektroskopii ROA od molekuly rozpuszczonej do otoczenia w tym wyjaśnimy rolę rezonansowego przeniesienia energii na krótki, średni i daleki dystans.
- (3) Zbadamy charakterystyki spektroelektrochemiczne MCD uzyskując informacje komplementarne do tych, które można otrzymać z pomiarów SEC ECD, UV-Vis SEC i EPR SEC.