

Statyczna vs. dynamiczna samoasocjacja kapsuł wiązań wodorowych o niskiej symetrii – mechanistyczne podejście do samoasocjacji sfer (LSymCap)

Piękno jest kojarzone z symetrią. Ludzie naturalnie szukają obiektów o wysokiej symetrii, równomiernie rozmieszczonych wokół nas, a krzywo zawieszony obraz na ścianie wywołuje natychmiastową reakcję. Ale czy natura faktycznie jest tak symetryczna? Może to tylko nasza percepcja świata stworzyła takie przekonania?

Chemia supramolekularna jest często określana jako dziedzina nauki inspirowana naturą, głównie ze względu na wykorzystanie interakcji, które tworzą całą żywą materię. Jednak dokładniejsze przyjrzenie się procesom biochemicznym zachodzącym w naturze rodzi szereg ważnych pytań dotyczących tego powszechnego przekonania. Mianowicie, w przeciwieństwie do organizmów żywych, chemia supramolekularna zazwyczaj prowadzi do utworzenia wysoce symetrycznego produktu w (stosunkowo) prostym stanie równowagi termodynamicznej. Takie procesy niezwykle rzadko zachodzą w naturze, gdzie nawet najprostsze organizmy jednokomórkowe, np. algi, generują wysoce asymetryczne produkty w warunkach dalekich od równowagi. Ponadto, pozorną symetrią -często obserwowaną w naturze na poziomie makroskopowym- zwykle ujawnia się jako wysoce asymetryczna pod względem funkcjonalności - ludzkie dłonie są wyraźnym przykładem tego paradoksu.

Ostatnimi czasy, naukowcy coraz częściej dostrzegają paradoks „doskonałej symetrii”- pięknej, ale w rzeczywistości znacząco ograniczającej funkcjonalność i praktyczne zastosowania agregatów supramolekularnych. Wśród nich szczególną uwagę przyciągają kapsuły - architektury supramolekularne, które mogą wiązać i zatrzymywać inne cząsteczki w swoich wewnętrznych przestrzeniach. Niestety, redukcja symetrii w systemach czysto niekowalencyjnych stanowi wyjątkowe wyzwanie z powodu naturalnie niskich energii interakcji oraz wysoce dynamicznej, nieuchwytniej natury tych asocjatów.

Aby sprostać tym wyzwaniom, projekt badawczy ma na celu opracowanie nowej generacji kapsuł supramolekularnych, których symetria, chiralność i przestrzeń wewnętrzna mogą być modyfikowane w celu enkapsulacji określonych cząsteczek gości, a także zrozumienie złożonych procesów samoasocjacji i samosortowania takich agregatów. Zrozumienie podstawowych zjawisk odpowiedzialnych za tworzenie sztucznych kapsuł otworzy drogę do formowania nowej generacji cząsteczek typu „gospodarz”, ze strukturą i właściwościami ukierunkowanymi nie tyle na piękno, co na ich funkcjonalność, i selektywność, porównywalną do układów obserwowanych w naturze.