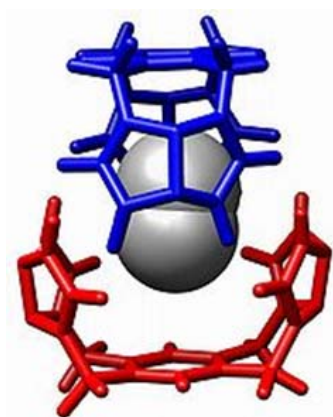


## TRENDS IN ORGANIC CHEMISTRY – MOLECULAR SELF-ASSEMBLY

Det senaste i raden av TOC-symposier hade temat "Molecular Self Assembly" och drog ca 100 deltagare på Kemicentrum i slutet av oktober. Sektionen för organisk kemi tog redan år 2001 initiativet till dessa "trends-symposier" och det senaste var det 19e. Sist det var supramolekylärkemi var det också i Lund men då med titeln "Synthetic Receptors". Sex världsledande forskare hade bjudits in att hålla föredrag och organisatör var Kenneth Wärnmark.

Symposiet visade på att "Molecular Self-assembly" griper in på många nya områden såsom röntgenkristallografi och utveckling av asymmetrisk katalys och att steget till tillämpningar har kortats.



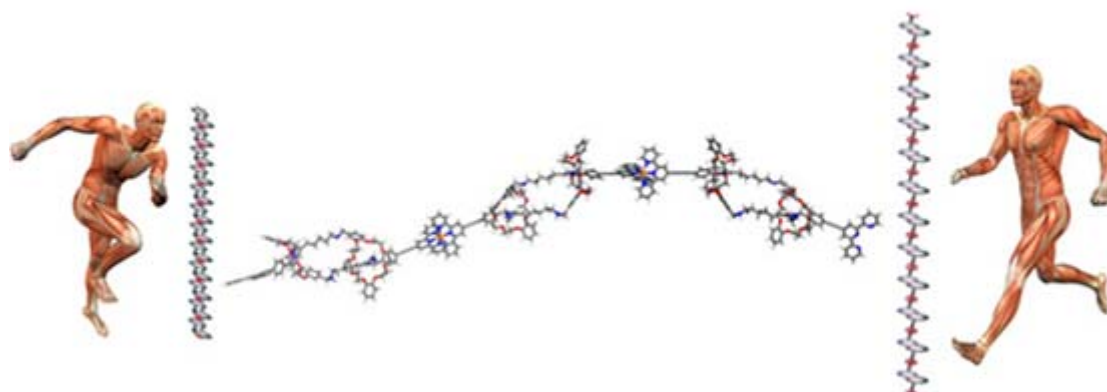
-Prof. Julius Rebek, the Scripps Research Institute, San Diego, föreläste om molekulära kapslar och gav en inblick hur området har utvecklats sedan Donald Crams kapslar. Dessa var konstruerade med kovalent kemi medan Prof. Rebeks kapslar hålls ihop med reversibel bindning; i hans fall vätebindningar (vilket han var först med). På detta sätt kan "gäster" komma in och ut ur kapslar vid rumstemperatur vilket har betydelse för området "drug delivery".

Figur 1. Rebeks molekulära kapsel som hålls ihop av vätebindningar mellan de två halvorna. Kapseln kan fånga in en kvävgasmolekyl och förvara den i sitt hålrum.

-Prof. Edvinas Orenta, Vilnius University, pratade om "molecular self-assembly", dvs då små monomerer kan styras att aggregera endera till molekulära kapslar eller till molekulära rör via externa stimulanser såsom lösningsmedel eller "gäster".

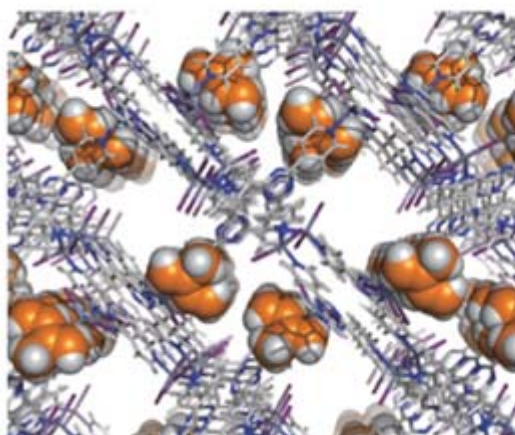
-Prof. Lyle Isaacs, University of Maryland talade om vidareutvecklingen av den ringformade molekylen "Cucurbit[n]uril", som utmanar cyclodextrin som en "Drug delivery" molekyl genom att kapsla in hydrofila läkemedel i dess hålrum och möjliggör för läkemedlet att passera de hydrofoba cellmembranerna och vidare in i cellen.

-Prof. Stefan Matile, University of Genève pratade sedan om användningen av anjon-pi-interaktionen inom katalys. Denna interaktion är han först att använda för att stabilisera övergångstillstånd. Principen exemplifierades med 1,4 additioner till enoner. Han har nu på konstgjord väg utvecklat det första enzymet som utför denna reaktion och inducerar hög enantiomer selektivitet i reaktionen.



Figur 2. Giuseppones molekylära muskel som expanderar och kontraherar mellan 1 nm and 1  $\mu$ m.

-Prof. Nicolas Giuseppone, *Strasbourg University*, pratade om kemi som hade anknytning till årets Nobelpris – molekylära maskiner. Han inkorporerar molekylära motorer i polymerer. Han visade på system som han hade utvecklat där polymeren helt enkelt kan viras in och viras ut med hjälp av molekylära motorer och därmed minska och öka polymerens volym.



Figur 3. Röntgendiffraktionsstruktur av icke-kristallina molekyler (i det här fallet 2-butan) kan bestämmas när molekylen har inkorporerats i Fujitas metallkoordinationsnätverk. Endast nanogramkvantiteter av molekylen behövs. Om molekylen är optiskt ren så kan även absolutkonfigurationen bestämmas direkt med denna metod (såsom i detta fall med 2-butan).

-Prof. Makoto Fujita, *Tokyo University* föreläste om hur man gör molekylära kapslar med koordinationskemi och visade att man kan göra reaktioner inne i kapslarna med högre effektivitet och med annan stereokemi än utan kapslarna. Vissa av hans 3D-nätverk av palladium och ligander kunde vara gäster till organiska molekyler. Insatta i metal-ligand nätverket kunde han bestämma både strukturen och absolutkonfigurationen av de små molekylerna även om de inte var kristallina med röntgendiffraktion. Detta är ett stort framsteg, möjliggör strukturutredningar av icke-kristallina naturprodukter på mindre än en vecka jämfört med NMR-baserade strukturutredningar som kan ta upp till sex månader.

2016-10-27