

PRIOPĆENJE ZA MEDIJE:

Petra Buljević Zdjelarević, Ured za odnose s javnošću
Institut Ruđer Bošković
T. +385 (1) 457-1269, (99) 267-95-14
E. info@irb.hr W. www.irb.hr

Zagreb, 22. veljače 2017.

Ruđerovci su otkrili novi otopinski sustav koji može obrnuti kiralnost udruženja malih molekula

Rad je objavljen na naslovniči prestižnog časopisa u kemiji

Znanstvenici s Instituta Ruđer Bošković (IRB) su u suradnji s farmaceutskom tvrtkom PLIVA objavili u časopisu Chemical Communications (IF = 6.6) prvi primjer inverzije supramolekulske kiralnosti udruženja malih molekula u otopini pomoću kompleksiranja s metalnim ionima. Riječ je o sustavu koji bi mogao poslužiti kao model za dizajn novih kiralnih katalizatora s primjenom u farmaceutskoj industriji.

Kiralnost je svojstvo molekula kod kojih se zbog prostornog rasporeda atoma, molekula (original) ne može poklopiti sa svojom ogledalnom slikom. Proteini i nukleinske kiseline, iznimno važne molekule za život kakvog poznajemo, su homokiralne, tj. u prirodi se može naći samo original, ali ne i njegova ogledalna slika.

Kontrola kiralnih svojstava supramolekulskega sustava je važna za razumijevanje uloge kiralnosti u biološkom okruženju i sve veće primjene u područjima katalize, optike, elektronike i senzora. Do danas, regulacija kiralne inverzije ostvarena je uspješno putem koordinacije metala, promjene otapala, tlaka, i temperature, upotrebom ultrazvučnih valova, svjetla itd. Međutim, dosadašnja istraživanja su provedena na velikim polimernim molekulama gdje su postupci priprave i izolacije čistih spojeva dugotrajni i složeni, što značajno negativno utječe na optimizaciju i potencijalnu primjenu u industriji.

"Jednostavnost postupka i cijena priprave kemikalija neki su od važnih uvjeta za primjenu u gospodarstvu. Iz tog razloga smo, inspirirani prirodom, odlučili istraživati sustave jeftinih i lako dostupnih molekula, čija je modifikacija danas brza i uvelike optimirana." – objašnjava dr. sc. Srećko Kirin, voditelj Laboratorij za kemiju čvrstog stanja i kompleksnih spojeva na IRB-u.

Hrvatski tim znanstvenika pronašao je jedinstven i robustan sustav sastavljen od građevnih jedinica poput kiralnih aminokiselina i metalnih soli. Kombinacijom eksperimentalnih i računskih metoda pokazano je da se određeni derivati aminokiselina udružuju u nekovalentne aggregate, tvoreći kiralne strukture u otopini i čvrstom stanju. Dodatak metalne soli preraspodjeljuje molekule u otopini na način da tvore strukture obrnute kiralnosti, što je prvi takav slučaj opisan u literaturi.

"Iznimno su rijetki sustavi koje sadrže male građevne jedinice iste kiralnosti, a dodatkom akiralnih spojeva mogu pokazati suprotna optička svojstva." – dodaje dr. sc. Kirin.

S obzirom da se radi o kiralnom sustavu koji sadrži metal, svoju potencijalnu primjenu može pronaći u području enantioselektivne katalize gdje se u industrijskim postupcima priprave kiralnih farmaceutski aktivnih spojeva najčešće koriste skupi metalni katalizatori.

"Za uspješan dizajn novih katalizatora u enantioselektivnim reakcijama, od velike je važnosti razumijevanje nekovalentnih interakcija malih kiralnih molekula u modelnim sustavima koji sadrže metal" – naglašava dr. sc. Kirin te zaključuje – "Istraženi sustav je značajan za primjenu u gospodarstvu jer otvara mogućnost korištenja jednog kiralnog katalizatora za pripravu oba enantiomera željenog produkta".



Rezultate istraživanja, autori Zoran Kokan, Berislav Perić, Mario Vazdar, Željko Marinić, Dražen Vikić-Topić i Srećko Kirin (IRB) te Ernest Meštrović (PLIVA), predstavili su u radu pod naslovom 'Metal-Induced Supramolecular Chirality Inversion of Small Self-Assembled Molecules in Solution'. Rad je objavljen u vrhunskom znanstvenom časopisu Chemical Communications (IF = 6.6, Q1), koji je po ukupnom broju citata treći od 520 najkvalitetnijih časopisa iz područja kemije, sukladno bazi Web of Science.

Istraživanja su provedena u okviru projekta Hrvatske zaklade za znanost 'Minimalni umjetni enzimi' (IP-2014-09-1461, voditelj: S. Kirin), projekta Hrvatske akademije znanosti i umjetnosti (voditelj: Z. Kokan) i COST Akcije 1402.

KORISNE POVEZNICE:

RAD: <http://dx.doi.org/10.1039/c6cc09203a>

PROJEKT HrZZ: <http://www.irb.hr/MArtEn>

KONATAKTI SUGOVORNIKA NA TEMU:

Dr. sc. Srećko Kirin

E: Srecko.Kirin@irb.hr

T: +385 1 457 1367

Dr. sc. Zoran Kokan

E: Zoran.Kokan@irb.hr

T: +385 1 456 1096