

Poszukiwanie nowych związków o ściśle określonych właściwościach a także zdolnych do tworzenia złożonych układów ponad cząsteczkowych (architektur supramolekularnych) są wyzwaniem współczesnej chemii. Obecnie, dynamicznie rozwijanym obszarem chemii jest selektywna synteza i funkcjonalizacja makrocząsteczek (makrocykli i klatek molekularnych) otrzymywanych ze substratów o nieskomplikowanej strukturze i niskiej masie molowej. Za związki makrocykliczne tradycyjnie uważa się te zawierające powyżej 12 członów w pierścieniu. Z kolei kowalencyjną klatką organiczną nazywany jest związek policykliczny o zdefiniowanym kształcie i wymiarach, zbudowany z atomów połączonych wyłącznie wiązaniami kowalencyjnymi. Makrocykle i klatki zbudowane z regularnie powtarzających się jednostek nazywane są stało-kształtnymi. Cechą charakterystyczną stało-kształtnych (ang. shape-persistent) makrocykli i klatek molekularnych, jest ich stosunkowo mała labilność konformacyjna.

Przez wiele lat uważano, że związki makrocykliczne nie mogą istnieć ze względu na napięcia kątowe. Za punkt przełomowy uważane są prace Rużički, który określił struktury 15-17-członowych ketonów muskonu i cywetonu. Te odkrycia zapoczątkowały gwałtowny rozwój chemii związków makrocyklicznych, spowodowany z jednej strony odkryciem nowych metod syntezy a drugiej aktywnością biologiczną niektórych związków makrocyklicznych, np. antybiotyków makrolidowych oraz leków immunosupresyjnych.

Obserwowany rozwój tej dziedziny znalazł odzwierciedlenie w werdyktach Komitetu Noblowskiego. W 1987 roku Donald James Cram, Jean-Marie Lehn i Charles John Pedersen otrzymali wspólnie Nagrodę Nobla za rozwinięcie i zastosowanie cząsteczek o szczególnie selektywnych oddziaływaniach zależnych od struktury. Z kolei w 2016 roku Nagrodę Nobla otrzymali Jean-Pierre Sauvage, Sir James Fraser Stoddart oraz Bernard Lucas Feringa za zaprojektowanie i syntezę maszyn molekularnych. Można zaryzykować twierdzenie, że bez chemii supramolekularnej i chemii makrocykli nie byłoby maszyn molekularnych.

Synteza makrocykli i klatek nie jest sprawą prostą. Spośród wielu metod, te które bazują na koncepcji Dynamicznej Chemii Wiązań Kowalencyjnych pozwalają na efektywną syntezę makrocykli klatek. W reakcjach przebiegających według koncepcji DCC, substraty tworzą układy wyższego rzędu (produkty) w wyniku odwracalnych reakcji tworzenia wiązań kowalencyjnych. Spośród reakcji odwracalnych największe znaczenie w chemii makrocykli ma reakcja iminowania. Projektowanie i synteza makrocykli, klatek molekularnych opiera się na wykorzystaniu specyficznych cech strukturalnych substratów. Stąd często ten sposób podejścia do syntezy przypomina budowanie z klocków (bloków budulcowych).

Możliwość wprowadzenia różnych grup funkcyjnych do szkieletu powoduje, że zarówno makrocykle jak i klatki molekularne mogą pełnić różne funkcje. Na poziomie cząsteczkowym, makrocykle mogą być wykorzystane w katalizie, do tworzenia nowych wiązań węgiel-węgiel lub węgiel-heteroatom, jako wysoce specyficzne receptory pozwalające na detekcję pojedynczych cząsteczek selektanda. Równie ważne jest wykorzystanie makrocykli i klatek na poziomie ponad cząsteczkowym. W tym przypadku o strukturze asocjatu i właściwościach materiału decydują oddziaływania niekowalencyjne o różnej sile i kierunkowości.

Mechanizm działania badanych przez nas związków z założenia ma przypominać sposób funkcjonowania żywych organizmów, gdzie o końcowym efekcie decyduje kooperacja pomiędzy poszczególnymi podjednostkami. W ramach tego projektu planujemy otrzymanie biblioteki związków o charakterze makrocykli i klatek molekularnych. Związki te będą charakteryzowały się albo zdefiniowaną, niezmienną strukturą albo będą zdolne do zmian struktury pod wpływem zewnętrznego bodźca. Spośród otrzymanych związków, najbardziej obiecujące zostaną użyte jako molekularne receptory lub tektony.

Nie mniej ważne będzie zastosowanie otrzymanych związków jako prekursorów nowych materiałów, zdolnych zwłaszcza do selektywnego wiązania małych cząsteczek, w tym również chiralnych. Chcemy wykazać jak struktura mniejszych „cegiełek” wpływa na budowę nie tylko cząsteczek makrocykla i klatki molekularnej ale także na strukturę i właściwości materiałów zbudowanych z tych cząsteczek.

Wykazanie możliwości syntezy a następnie wykazanie przydatności otrzymanych związków w różnych aspektach chemii pozwoli na określenie ich jako cząsteczeki *uprzywilejowane*.