



Program skupa Organska kemija u Hrvatskoj

Odbor za kemiju, II. Razred za matematičke, fizičke i kemijske znanosti,
Hrvatska akademija znanosti i umjetnosti,
Zagreb, 10. lipnja 2024.

9:00-9:15 Uvodna riječ

Organska sinteza; moderator: Matija Gredičak

9:15-9:45 **Ivanka Jerić**

Sinteza neproteinogenih aminokiselina

9:45-10:15 **Nikola Cindro**

Totalna sinteza prirodnih poliketida u kontekstu razvoja novih antibiotika

10:15-10:45 **Irena Zrinski-Antonac**

Total API Synthesis: Scaling from Milligrams to 1-2 kg

10:45-11:15 *pauza za kavu*

Organska, medicinska i farmaceutska kemija; moderator: Ivo Piantanida

11:15-11:45 **Silvana Raić-Malić**

Novi benzazolni derivati s antitripanosomskim djelovanjem *in vitro* i *in vivo*

11:45-12:15 **Nela Malatesti**

Sinteza porfirina za primjene u fotodinamičkoj terapiji

12:15-12:45 **Goran Kragol**

Elektrokemijska organska sinteza

12:45-13:15 **Zrinka Rajić**

Harmizinini, nova klasa hibridnih spojeva harmina i antimalarika artemizina

13:15-14:30 *pauza za ručak*

Organska kemija u znanosti o materijalima; moderator: Irena Dokli

14:30-15:00 **Anamarija Knežević**

Kiralni organski materijali – od tekućih kristala do supramolekulskih arhitektura u vodi

15:00-15:30 **Ivana Biljan**

Dizajn tankih filmova i poroznih organskih polimera temeljenih na aromatskim sustavima s dušik-dušik poveznicama

15:30-16:00 **Marina Šekutor**

Priprava i karakterizacija diamantoidnih kovalentnih sustava

Skup se održava pod pokroviteljstvom Odbora za kemiju II. Razreda za matematičke fizičke i kemijske znanosti Hrvatske akademije znanosti i umjetnosti, Sekcije za organsku kemiju Hrvatskog kemijskog društva i Instituta Ruđer Bošković.



Uvodna riječ

Organska kemija jedna je od vodećih grana u polju kemije s dugogodišnjom tradicijom koja seže još u doba hrvatskih nobelovaca L. Ružičke i V. Preloga. Tradicija dobrih istraživanja u području organske kemije zadržana je do danas te se vrhunska istraživanja iz organske kemije provode na više znanstvenih institucija u Republici Hrvatskoj. Pri tome valja naglasiti da se važan opus istraživanja iz područja organske kemije odvija i u farmaceutskim tvrtkama. Istraživači u Plivi, Selviti, Xelliji i Belupu istaknuti su organski kemičari. Mini-skup, organiziran u sklopu aktivnosti Odbora za kemiju II. Razreda HAZU i Sekcije za organsku kemiju Hrvatskog kemijskog društva bit će prilika za susret, diskusiju te razmjenu znanja organskih kemičara iz akademije i industrije. Tijekom jednodnevnog skupa prikazat će se trenutna istraživanja u području organske kemije vodećih znanstvenih skupina u R. Hrvatskoj. Teme obuhvaćaju organsku sintezu, organsku, medicinsku i farmaceutsku kemiju te organsku kemiju u znanosti o materijalima.

Organizacijom ovog drugog jednodnevnog skupa iz organske kemije nadamo se da ćemo uspostaviti tradiciju te da će se u budućnosti skupovi održavati svake godine.



Akademik dr. sc. Ivo Piantanida
Organizator skupa



dr. sc. Nikola Basarić
Organizator skupa

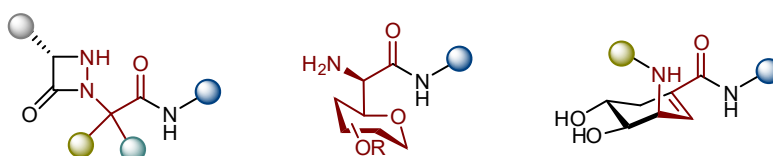
Sinteza neproteinogenih aminokiselina

Ivanka Jerić

Institut Ruđer Bošković, Bijenička cesta 54, Zagreb

Procjenjuje se da je oko 800 neproteinogenih aminokiselina (engl. nonproteinogenic amino acids, NPAA) identificirano u bakterijama, gljivama, biljkama i morskim organizmima, ostavljajući 20 proteinogenih aminokiselina u manjini od 4%. Postojanje više stotina biološki aktivnih prirodnih peptida s jednom ili više NPAA, odražava sposobnost ovih monomera da daju neka korisna funkcionalna svojstva, koja nisu dostupna u osnovnom skupu od 20 aminokiselina. Ugradnja NPAA u peptide dovodi do modifikacije sekundarne strukture koje često rezultira poboljšanom selektivnošću, bioraspoloživošću i stabilnošću. NPAA se koriste u sintezi peptidnih katalizatora i funkcionalnih materijala i svestrani su intermedijeri u organskoj sintezi, posebno u razvoju lijekova.

Brojne metode razvijene za sintezu NPAA povećavaju dostupnost ove klase organskih molekula, dok novi napredak u sintezi i analizi peptida i biblioteka peptida značajno pridonosi razumijevanju načina na koji NPAA može modulirati svojstva promatrane molekule. Unatoč tome, mnoge klase NPAA ostaju neiskorištene zbog nedostatka sintetskog protokola i/ili dovoljno znanja o njihovom utjecaju na strukturalna svojstva molekule u koju su ugrađeni. U ovom predavanju bit će prikazani rezultati istraživanja naše grupe u području sinteze NPAA [1-4], prvenstveno α -hidrazino kiselina, C-glikozilnih α -aminokiselina i γ -aminokiselina dobivenih modifikacijom polihidroksi cikloheksana i cikloheksena (Slika 1).



Slika 1. Odabrani primjeri NPAA

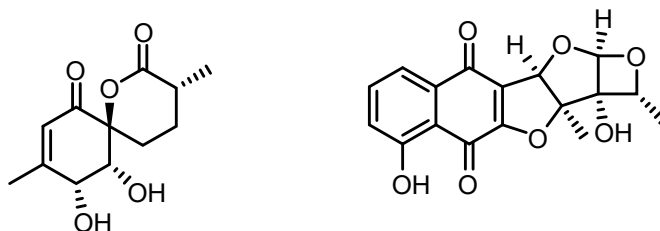
- [1] K. Vlahoviček-Kahlina, M. Vazdar, A. Jakas, V. Smrečki, I. Jerić, *J. Org. Chem.* **2018**, *83*, 13146–13156.
- [2] A. Jakas, A. Višnjevac, I. Jerić, *J. Org. Chem.* **2020**, *85*, 3766–3787.
- [3] J. Suć Sajko, I., Jerić, *J. Org. Chem.* **2022**, *87*, 7076–7084.
- [4] L. Kavčić, G. Ilc, B. Wang, K. Vlahoviček-Kahlina, I. Jerić, J. Plavec, *ACS Omega*, **2024**, doi: 10.1021/acsomega.4c00804

Totalna sinteza prirodnih poliketida u kontekstu razvoja novih antibiotika

Nikola Cindro

Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Zagrebu, Horvátovac 102a

Razvoj rezistencije bakterija na antibiotike jedna je od najvećih prijetnji svjetskom zdravstvenom sustavu u 21. stoljeću [1]. Ovaj problem uzrokovan je većim brojem faktora uključujući prekomjerno korištenje antibiotika u zdravstvu i prehrambenoj industriji, neprimjerenim upravljanjem otpadnim vodama te dugoročnim smanjenjem investicija u istraživanje i razvoj novih antibiotika. Trend smanjenja ulaganja rezultirao je situacijom u kojoj je najnovija klasa antibiotika danas u uporabi otkrivena 80-ih godina prošlog stoljeća [2]. Kao polazna točka u razvoju novih klasa antibiotika često se istražuju spojevi izolirani iz prirode. U sklopu predavanja bit će prezentirana sinteza dva nedavno otkrivena poliketida: peniciklona A [3] i enceleamicina A [4] koji pokazuju antimikrobno djelovanje prema multirezistentnim bakterijskim sojevima. Peniciklon A izoliran je je iz dubokomorske gljivice roda *Penicillium* tijekom OSMAC (“One Strain Many Compounds”) studije, dok je enceleamicin A izoliran iz bakterije roda *Amycolatopsis* klasičnom kultivacijom. Ključni korak u sintezi peniciklona A bila je dvostruka Grignardova reakcija [5], dok je planirani ključni korak za sintezu enceleamicina A formalna [3+2] cikloadicija fenola i furana.



Slika 1. Struktura peniciklona A (lijevo) i enceleamicina A (desno).

[1] D. De Oliveira, B. Forde, T. Kidd, P. Harris, M. Schembri, S. Beatson, D. Paterson, M. Walke, *Clin. Microbiol. Rev.*, 2020, 33, 2–49.

[2] WHO 2021 Antibacterial agents in clinical and preclinical development: an overview and analysis. Geneva: World Health Organization; 2022. Licence: CC BY-NC-SA 3.0 IGO.

[3] W. Guo, Z. Zhang, T. Zhu, Q. Gu, D. Li, *J. Nat. Prod.*, 2015, 78, 2699–2703.

[4] A. Khan, M. Said, B. Borade, R. Gonnade, V. Barvkar, R. Kontham, S. Dastager, *J. Nat. Prod.*, 2022, 85, 1267–1273.

[5] G. Talajić, E. Topić, J. Meštrović, N. Cindro, *J. Org. Chem.*, 2022, 87, 16054–16062.

Total API Synthesis: Scaling from Milligrams to 1-2 kg

Irena Zrinski Antonac

TEVA Pliva d.o.o.

E-mail: Irena.Zrinski-Antonac@pliva.com

Small molecule drugs and drug candidates represent the majority of active pharmaceutical ingredients (APIs) in use or under study worldwide.^{1,2} These molecules are made available in part by virtue of the skill and ingenuity of medicinal and process organic chemists who synthesize the compounds. In general, the API Process Development and Production involve a number of processing steps including reaction, crystallization, phase separation and purification, filter cake washing, solvent swapping and solvent exchange to get eco-efficiency and industrially scalable synthesis (Figure 1).

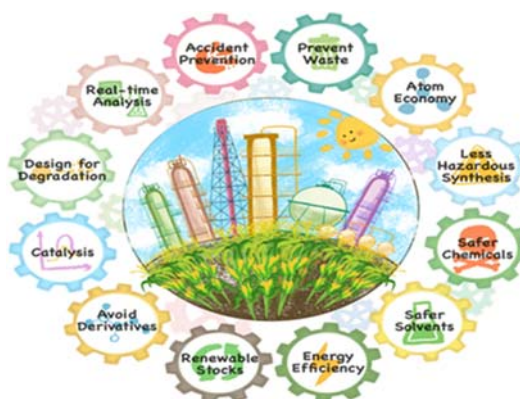


Figure 1. 12 Principles of Green Chemistry

The presentation will therefore focus on the necessary early phases of chemical development as would typically be required to support production of about 2 kg from first milligrams in lab. It covers an overview of the activities, when should we look at changing the synthetic route and where regulatory factors start to impact. Special part is using efficient methods for developing cheap, robust process with complete understanding of impurities origin and identification, process optimization and introduction to validation. Besides, physical form issue, process safety and raw material supply issues will be discussed, too.

[1] G. T. Whiteker, *Org. Process Res. Dev.*, **2019**, *23*, 2109-2131.

[2] H. X. Ngo, S. Garneau-Tsodikova, *Med. Chem. Commun.*, **2018**, *9*, 757-758.

Novi benzazolni derivati s antitripanosomskim djelovanjem *in vitro* i *in vivo*

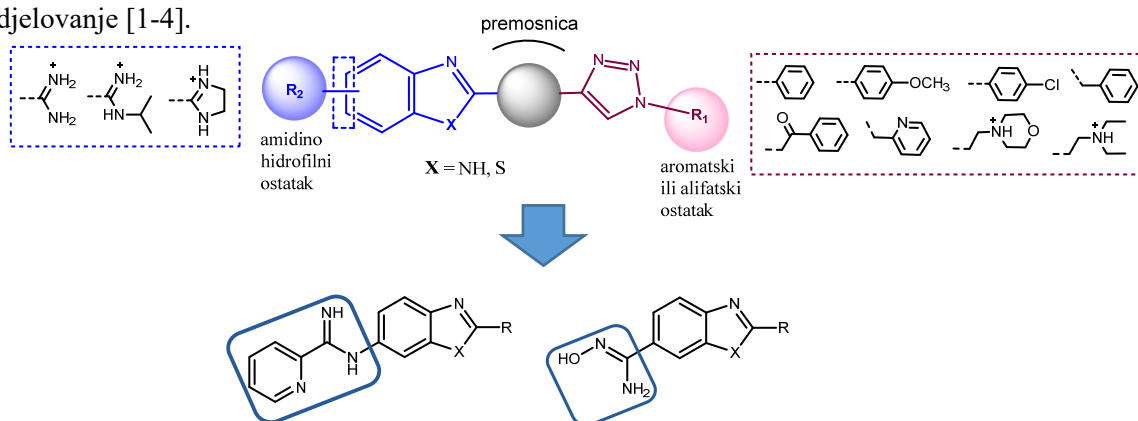
Silvana Raić-Malić

Sveučilište u Zagrebu Fakultet kemijskog inženjerstva i tehnologije

Marulićev trg 20, Zagreb

Tripanosomioza ili bolest spavanja je smrtonosna tropska bolest koju kod čovjeka i životinja uzrokuju jednostanični paraziti vrste *Trypanosoma brucei* u tropskim krajevima Afrike. Postojeća terapija u liječenju ovog oboljenja je nezadovoljavajuća jer ima neželjene nuspojave i postaje neučinkovita zbog pojave rezistentnosti na lijekove.

U sintezi novih *N*-heterocikličkih spojeva s antitripanosomskim djelovanjem primijenili smo strategiju bioizosterije i izmjene skeleta, a molekularnom hibridizacijom povezali smo farmakofore preko 1,2,3-triazola, aromatske ili alifatske premosnice. Pronašli smo da predstavnici amidino-supstituiranih benzimidazola, benzotiazola i bis-benzazola imaju učinkovito i selektivno aniprotozalno djelovanje [1-4].



Slika 1. Dizajn i sinteza novih benzazolnih derivata s antitripanosomskim djelovanjem.

Određena su svojstva ADME *in silico* i *in vitro*. Ispitivanja DNA interakcije spojeva pokazala su da se pojedini amidinski benzazolni derivati vežu u mali utor *ctDNA*. Za bis-benzotiazolni derivat provedena su ispitivanja antitripanosomske aktivnosti *in vivo*. Zbog niske membranske permeabilnosti spoja provedeno je daljnje optimiranje strukture u kojoj je amidinska zamijenjena arilimidamidnom, odnosno amidoksimskom skupinom.

[1] A. Bistrović Popov, L. Krstulović, S. Koštrun, D. Jelić, A. Brokulić, M. Radić Stojković, I. Zonjić, M.C. Taylor, J.M. Kelly, M. Bajić, S. Raić-Malić, *Eur. J. Med. Chem.* **2020**, *207*, 112802

[2] A. Bistrović Popov, I. Stolić, L. Krstulović, M.C. Taylor, J.M. Kelly, S. Tomić, L. Tumir, M. Bajić, S. Raić-Malić, *Eur. J. Med. Chem.* **2019**, *173*, 63

[3] L. Racané, V. Rep, S. Kraljević Pavelić, P. Grbčić, M. Radić Stojković, I. Zonjić, M.C. Taylor, J.M. Kelly, M. Bajić, S. Raić-Malić, *J. Enzyme Inhib. Med. Chem.*, **2021**, *36*, 1952

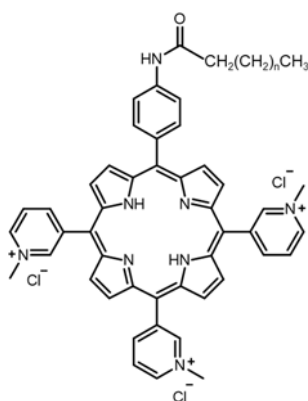
[4] L. Racané, L. Ptiček, S. Koštrun, S. Raić-Malić, M.C. Taylor, M. Delves, S. Alsford, F. Olmo, A.F. Francisco, J.M. Kelly. *J. Med. Chem.* **2023**, *66*, 130

Sinteza porfirina za primjene u fotodinamičkoj terapiji

Nela Malatesti

Sveučilište u Rijeci, Fakultet biotehnologije i razvoja lijekova, Rijeka, Hrvatska

Porfirini i njima srodni tetrapiroolni spojevi se često nazivaju bojama života, a među najpoznatijima u prirodi koji to potvrđuju su hem kao prostetička skupina brojnih, biološki važnih proteina, i klorofili koji sudjeluju u fotosintezi. Među najsloženijim primjerima potpune organske sinteze prirodnih spojeva su upravo ovih pigmenata, Nobelovom nagradom ovjenčane sinteze hema (H. Fischer, 1930.) i klorofila-*a* (R. W. Woodward, 1965.) [1]. Specifična optička i elektronska svojstva porfirina čine ih izuzetno zanimljivim za primjene u brojnim područjima, a jedno od njih je fotodinamička terapija (PDT) koja se temelji na fotosenzibilizaciji i stvaranju citotoksičnih reaktivnih kisikovih vrsta, s ciljem uništavanja neželjenih stanica, tkiva i patogena. Zahvaljujućim spomenutim ranim počecima u 20. st., razvijeni su brojni sintetski putevi i funkcionalizacije porfirina, a koriste se i izolacije i modifikacije prirodnih porfirina kao što je protoporfirin IX (iz hema), kako bi se pripremili fotosenzibilizatori koji zadovoljavaju sve uvjete za PDT [2]. Svakako jedan od najvažnijih uvjeta je učinkovito stvaranje singletnog kisika, ali je isto tako važno stvaranje singletnog kisika što bliže staničnim strukturama čija će oštećenja dovesti do stanične smrti. U protutumorskom PDT-u, pasivna selektivnost je pokazala određene prednosti u odnosu na aktivno ciljanje tumora, stoga se u dizajnu molekula osobito vodi računa o njejoj lipofilnosti [2], a sve više se istražuju amfifilni kationski porfirini koji su se pokazali uspješnim u protutumorskom, ali i protumikrobnom PDT-u [3]. Ovdje ćemo predstaviti naša istraživanja te skupine, s fokusom na *mezo*-tetraaril-supstituiranim porfirinima AB₃ tipa (Slika 1).



Slika 1. Osnovna struktura amfifilnih trikationskih piridilporfirina s alkilnim lancem

[1] M. O. Senge, N. N. Sergeeva, K. J. Hale, *Chem Soc. Rev.*, **2021**, 50, 4730-4789.

[2] M. Ethirajan, Y. Chen, P. Joshi, R. K. Pandey, *Chem. Soc. Rev.*, **2011**, 40, 340-62.

[3] N. Malatesti, I. Munitić, I. Jurak, *Biophys. Rev.*, **2017**, 9, 149-168.



Elektrokemijska organska sinteza

Goran Kragol

Selvita d.o.o., Prilaz Baruna Filipovića 29, 10000 Zagreb

Elektrokemijska organska sinteza se značajno razvila u zadnjem desetljeću. Razvoj komercijalno dostupne elektrokemijske opreme omogućio je “user-friendly” pristup elektrosintezi. Također, blagi reakcijski uvjeti s uglavnom neopasnim reagensima te česta upotreba protičnih otapala čine elektrokemijsku organsku sintezu pogodnom za okoliš te se uglavnom smatra kao dio “green-chemistry” strategije. Reaktivnost i selektivnost tijekom elektrokemijske sinteze može se često precizno kontrolirati primjenom određenog potencijala te se tako može postići bolja kemoselektivnost u odnosu na uobičajene redoks reagense. U ovom predavanju biti će prikazano nekoliko uspješnih primjera elektrokemijske organske sinteze u razvoju biološki aktivnih spojeva:

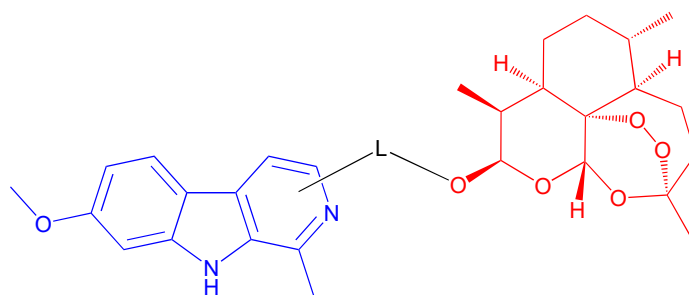
1. sp^2 - sp^3 unakrsno elektrofilno spajanje
2. intramolekularna dehidrogenativna ciklizacija
3. aneliranje 2-supstituiranih-1,3-oksazolidina na makrociklički skelet

Harmizinini, nova klasa hibridnih spojeva harmina i antimalarika artemizina

Zrinka Rajić

Sveučilište u Zagrebu Farmaceutsko-biokemijski fakultet

β -Karbolini su velika skupina prirodnih i sintetskih indolnih alkaloida, koji pokazuju širok spektar farmakoloških učinaka: antimikrobni (antiparazitski, antibakterijski i antivirusni) i citostatski učinak, kao i učinke na središnji živčani sustav (anksiolitički, hipnotički, antikonvulzivni i antikolinergični) [1,2]. Osim toga, β -karbolini su prisutni u ljekovitim biljkama *Peganum harmala* i *Eurycoma longifolia* koje se koriste u tradicionalnoj orijentalnoj medicini za liječenje različitih bolesti, među kojima su malarija i rak, a kao djelatne supstancije identificirani su harmin i srodni spojevi [1,2]. S druge strane, artemisinin i njegovi analozi trenutno su najučinkovitiji lijekovi za terapiju malarije, smrtonosne infektivne bolesti koju uzrokuje *P. falciparum*. Međutim, artemizinin posjeduje i značajno antiproliferativno djelovanje, koje se temelji na citotoksičnosti, zaustavljanju staničnog ciklusa, indukciji oksidativnog stresa, autofagiji, apoptozi i ferroptozu te inhibiciji invazije stanica raka [3,4]. U našem radu odlučili smo primjeniti principe molekulske hibridizacije u dizajniranju i sintezi harmizinina, novih hibridnih spojeva temeljenih na β -karbolinu i artemizininu. Strukturna raznolikost postignuta je variranjem mjesta supstitucije na β -karbolinskom prstenu i poveznice između dva strukturna motiva (triazol, amid), kao i modifikacijama molekule artemizina.



Slika 1. Harmizinini, hibridni spojevi β -karbolina i antimalarika artemizina (harmin je prikazan plavom, a artemisinin crvenom bojom, L = poveznica)

- [1] Cao R, Chen Q, Hou X, Chen H, Guan H, Ma Y, Peng W, Xu A, *Bioorg. Med. Chem.* **2004**, *12*, 4613-4623.
- [2] Chen Q, Rihui C, Chen H, Hou X, Yan H, Zhou S, Peng W, Xu A, *Int. J. Cancer* **2004**, *14*, 675-682.
- [3] Song Q, Peng S, Che F, Zhu X, *J. Pharmacol. Sci.* **2022**, *148*, 300-306.
- [4] Yi R, Wang H, Deng C, Wang X, Yao L, Niu W, et al. *Biosci. Rep.* **2020**, *40*, BSR20193314.

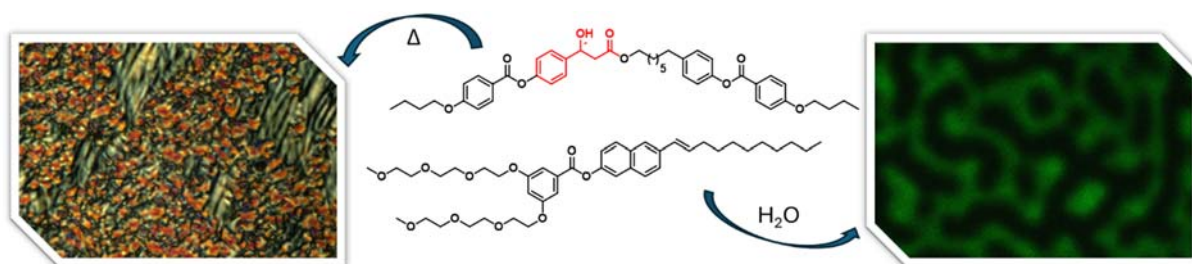
Kiralni organski materijali – od tekućih kristala do supramolekulskih arhitektura u vodi

Anamarija Knežević

Zavod za organsku kemiju i biokemiju, Institut Ruđer Bošković, Bijenička 54, Zagreb

Tijekom posljednjih nekoliko desetljeća došlo je do procvata u razvoju novih organskih materijala, kao što su monoslojevi, nanostrukture, gelovi, membrane i tekući kristali, zbog njihovih raznolikih primjena u novim tehnologijama [1]. Tekući kristali (LC) predstavljaju jedinstveno stanje materije koje se pojavljuje kao međufaza između trodimenzionalno uređene krutine i potpuno neuređene tekućine, te posjeduju jedinstvena elektrooptička i mehanička svojstva. Ključnu ulogu u formiranju LC faza imaju oblik molekula i međumolekulske interakcije. Zanimljivo je da proces samoorganizacije molekula pokreću iste međumolekulske interakcije bez obzira odvija li se u mezofazi ili u otopini [2]. Tako i amfifilne molekule u otopinama generiraju nanomaterijale s raznolikim svojstvima koje su zanimljive za tehnološke i biomedicinske primjene, osobito kada je medij voda.

Prvi dio predavanja fokusiran je na odnos strukture i svojstava LC fleksibilnih dimera s naglaskom na kiralne LC, pri čemu se kiralna 3-aril-3-hidroksipropanoatna esterska skupina pokazala kao svestrani građevni blok [3,4]. U drugom dijelu predavanja naglasak je na amfifilnim molekulama, dizajniranim iz LC dimera. Zamjenom alkilnih lanaca u strukturi LC molekula s oligo(etilen glikol)nim lancima nastaju amfifilne molekule topljive u vodi koje se samoorganiziraju u supramolekulske strukture formirajući hidrofobne džepove. U dobivene sustave će se ugraditi organokatalizatori te će koristiti za organokatalizu u vodi. Razvoj spomenutih sustava (Slika 1) ima značajan potencijal u stvaranju funkcionalnih organskih materijala.



Slika 1. Strukture pripremljenih LC i amfifilnih molekula

[1] S. I. Stupp, L. C. Palmer, *Chem. Mater.*, **2014**, *26*, 507–518.

[2] M. Castillo-Vallés et al., *J. Mater. Chem. C*, **2019**, *7*, 14454–14470.

[3] I. Dokli, A. Ožegović, A. Šimanović, M. Hromin, A. Knežević, A. Višnjevac, A. Lesac, *J. Org. Chem.*, **2022**, *87*, 14045–14057.

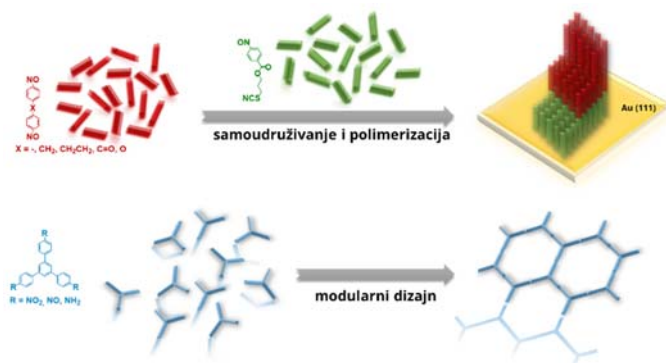
[4] A. Ožegović, A. Knežević, J. Novak, S. Šegota, P. Davidson, A. Lesac, *ChemPhysChem*, **2024**, e202400065.

Dizajn tankih filmova i poroznih organskih polimera temeljenih na aromatskim sustavima s dušik-dušik poveznicama

Ivana Biljan

*Prirodoslovno-matematički fakultet Sveučilišta u Zagrebu, Kemijski odsjek, Zavod za organsku kemiju, Horvatovac 102a, 10000 Zagreb, Hrvatska
ibiljan@chem.pmf.hr*

Izgradnja funkcionalnih materijala željenih svojstava pristupom odozdo prema gore temelji se na povezivanju manjih građevnih jedinica unaprijed određene geometrije i funkcionalnosti na predvidljiv način. U okviru naših istraživanja koristimo strukturno slične građevne jedinice, aromatske spojeve koji sadrže funkcijske skupine s dušikom, za dizajn tankih filmova na površinama i poroznih organskih polimera s dušik-dušik poveznicama (slika 1).



Slika 1. Dizajn tankih filmova i poroznih organskih polimera s dušik-dušik poveznicama

Predavanje će obuhvatiti pregled istraživanja samoudruživanja, dimerizacije i polimerizacije aromatskih C-nitro spojeva na površini zlata te nastanka nitrozo/azodioksidnih tankih filmova [1–3]. U nastavku će biti opisana priprava i karakterizacija novih poroznih organskih polimera s azodioksidnim i azo poveznicama [4–6], koji bi se mogli upotrijebiti za adsorpciju i pohranjivanje

ugljikovog dioksida čije su povišene emisije u atmosferu usko povezane s klimatskim promjenama.

Ovaj je rad financirala Hrvatska zaklada za znanost projektom IP-2020-02-4467.

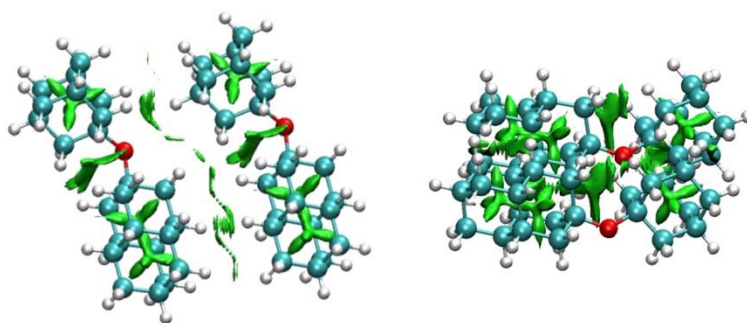
- [1] B. Panić, M. Koprivnjak, T. Marić, K. Majerová Varga, I. Biljan, *Colloids Interface Sci. Commun.*, **2021**, *45*, 100539.
- [2] L. Matasović, B. Panić, M. Bubaš, H. Vančik, I. Biljan, I. Rončević, *J. Mater. Chem. C*, **2022**, *10*, 5433–5446.
- [3] L. Nuić, B. Panić, L. K. Pereković, I. Šrut Rakić, M. Kralj, A. Mihanović, H. Vančik, I. Biljan, *Polymer*, **2023**, *271*, 125795.
- [4] N. Cindro, Ž. Car, V. Petrović Peroković, M. Borovina, B. Panić, I. Kodrin, I. Biljan, *Heliyon*, **2023**, *9*, e21781.
- [5] B. Panić, T. Frey, M. Borovina, K. Konopka, M. Samolec, I. Kodrin, I. Biljan, *Polymers*, **2023**, *15*, 229.
- [6] T. Frey, B. Panić, P. Šutalo, M. Borovina, I. Biljan, I. Kodrin, *CrystEngComm*, **2023**, *25*, 3870–3884.

Priprava i karakterizacija diamantoidnih kovalentnih sustava

Marina Šekutor

Zavod za organsku kemiju i biokemiju, Institut Ruđer Bošković, Bijenička 54, 10000 Zagreb, Hrvatska,
msekutor@irb.hr

Diamantoidni spojevi nalaze primjenu u mnogim poljima, a naročito kao podjedinice u dizajnu nanomaterijala. Nedavno predstavljena klasa takvih obećavajućih kavezastih derivata su složeni diamantoidni kovalentni sustavi koji se sastoje od nekoliko policikličkih podjedinica povezanih heteroatomima, a koje smo pripravili kako bismo istraživali njihovu samoorganizaciju na površinama materijala [1]. Karakterizacija nastalih supramolekulskih struktura na površinama je zahtjevna zbog njihove neplanarne prirode i traži primjenu kombinacije mikroskopskih i računalnih tehnika. Spontano slaganje takvih sustava u pravilu je posljedica djelovanja mnogobrojnih Londonovih disperzijskih interakcija (slika 1). Stoga smo u svrhu dobivanja dubljeg uvida u prirodu aglomeracijskih procesa također istraživali njihovu samoorganizaciju u helijevim nanokapljicama, što je medij pogodan za karakterizaciju slabo vezanih supramolekulskih klastera [2]. Bolje razumijevanje pokretačkih sila koje djeluju prilikom slaganja diamantoidnih molekula u suprastrukture ima važnu ulogu za njihovu buduću primjenu u nanotehnologiji.



Slika 1. Samoorganizirana struktura koja se sastoji od dvije molekule 1-adamantil-4-diamantil-etera; nekovalentne interakcije su prikazane zelenom bojom.

[1] J. Alić, I. Biljan, Z. Štefanić, M. Šekutor, *Nanotechnology* **2022**, *33*, 355603; J. Alić, T. Stolar, Z. Štefanić, K. Užarević, M. Šekutor, *ACS Sustainable Chem. Eng.* **2023**, *11*, 617-624; J. Alić, I. Lončarić, M. Etter, M. Rubčić, Z. Štefanić, M. Šekutor, K. Užarević, T. Stolar, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2024**, *26*, 4840-4844.

[2] J. Alić, R. Messner, F. Lackner, W. E. Ernst, M. Šekutor, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2021**, *23*, 21833-21839; J. Alić, R. Messner, M. Alešković, F. Küstner, M. Rubčić, F. Lackner, W. E. Ernst, M. Šekutor, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2023**, *25*, 11951-11958; M. Alešković, F. Küstner, R. Messner, F. Lackner, W. E. Ernst, M. Šekutor, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2023**, *25*, 17869-17876.