
反应驱动的“分子笼-连体分子笼”仿生结构转化研究取得进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/11155.html>

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

由化学反应驱动的结构转化是自然界万物生长变化的物质基础。这些自然系统的运动通常对应着相应的生命功能，比较有代表性的例子是ATP合成酶催化过程中的构象变换。多组分自组装超分子体系提供了一种可以在分子尺度上模拟生物体功能的可控平台。虽然文献已有大量的基于分子识别原理的刺激响应体系报道，但它们大都是通过动态主体分子与具有特殊尺寸、形状和电荷特征的客体分子定向结合（诱导匹配模型）而发展的。由主体催化初始客体反应原位产生新客体、且新客体进一步反过来诱导主体结构发生转化的现象极其罕见。

邻亚甲基苯醌（o-QMs）是一类重要的天然产物和药物合成中间体。由于具有双自由基或两性离子结构，o-QMs中间体往往稍纵即逝，极易于发生杂化Diels-Alder或亲核加成反应。

近期，中国科学院福建物质结构研究所研究员孙庆福团队在客体反应驱动的“分子笼-连体分子笼”的仿生结构转化研究取得进展。该研究选择1-羟甲基-2-萘酚（G1）这一已知的o-QMs前驱体作为客体，通过疏水作用将其包裹的具有大尺寸空腔的水溶性分子笼1中，意外发现一种由客体反应诱导的从较大空腔的分子笼1到含有两个较小空腔的连体双笼2的结构转化现象。

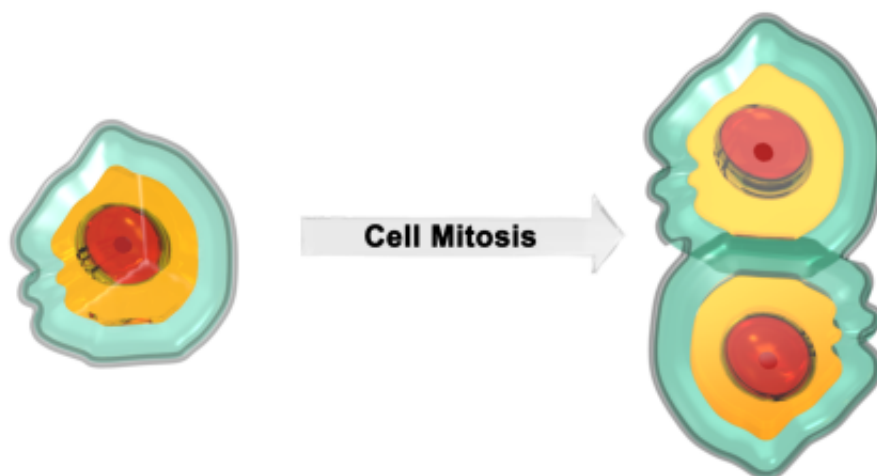
该研究对分子笼1和G1间的主客体化学进行探索。在核磁滴定实验表面，水相条件下分子笼1可以包裹高达4个G1分子在其内部空腔内。理论计算表明，在限域空腔中G1具有高达7.57 M的局部浓度，因此触发了其自发脱甲醛的自偶联二聚反应，原位生成2,2-二羟基-1,1-二萘甲烷产物G2；在强-相互作用驱动下，G2触发了母体分子笼1到连体分子笼2的类有丝分裂过程。这种从分子笼到连体双笼的结构转化与细胞有丝分裂过程具有类似的特征：都是由一个内部反应驱动的；母体骨架有一个空腔，而生成的新骨架具有两个独立的空腔；转化前后两个体系的构建单元相同。

具有动态对外界刺激做出反应的能力是生命最基本的特征。该研究首次揭示了由内部客体分子反应充当驱动力的分子笼到连体分子笼的刺激响应性转化行为，有助于理解酶催化和蛋白变构等生物过程。

相关成果发表在《德国应用化学》上，福建物构所、福建师范大学联合培养硕士研究生程珮明为第一作者。研究得到中科院战略性先导科技专项、国家杰出青年基金支持。

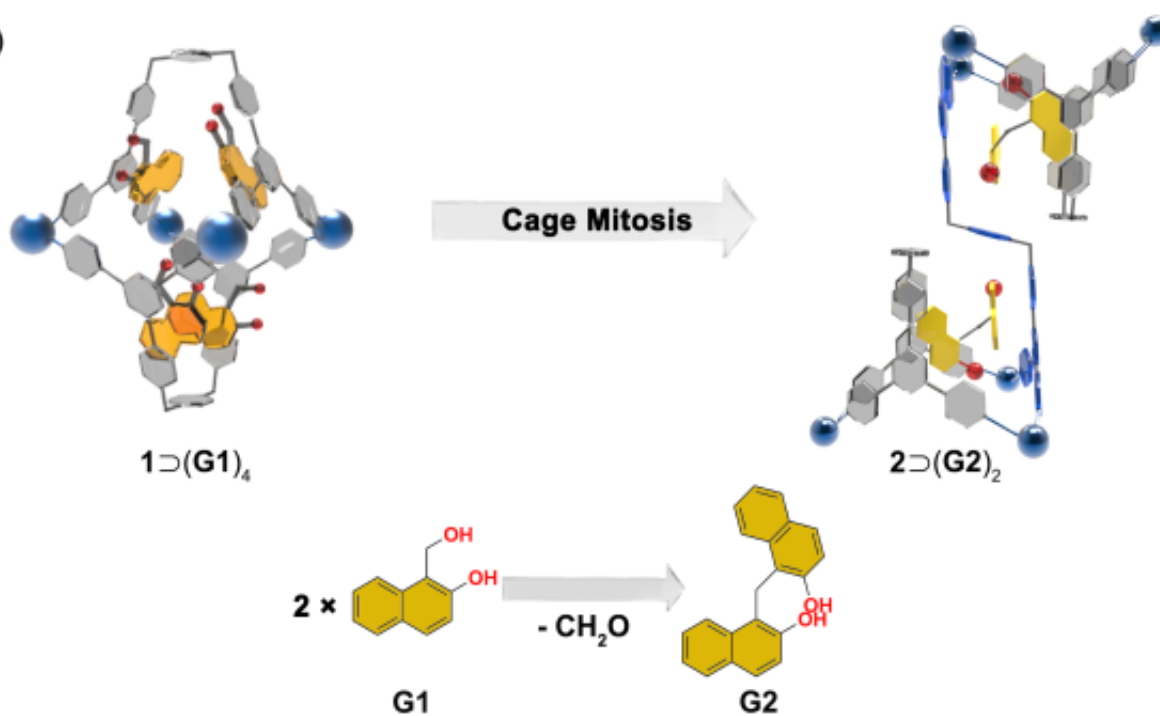
[论文链接](#)

a)



Mimic

b)



反应驱动的“分子笼-连体分子笼”仿生结构转化研究取得进展

研究团队单位：福建物质结构研究所

更多科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](http://www.iikx.com)转发