
化学所发展出界面超分子手性传递分子机理研究新方法

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/21259.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！

化学所发展出界面超分子手性传递分子机理研究新方法

。手性在自然界中无处不在。界面所具有的非中心对称性为分子在界面的聚集和组装过程产生对称性破缺创造了先天条件，因此相比于体相，研究界面手性传递、自组装手性动力学对于探索手性起源、探寻生命起源、制备手性材料具有重要意义。

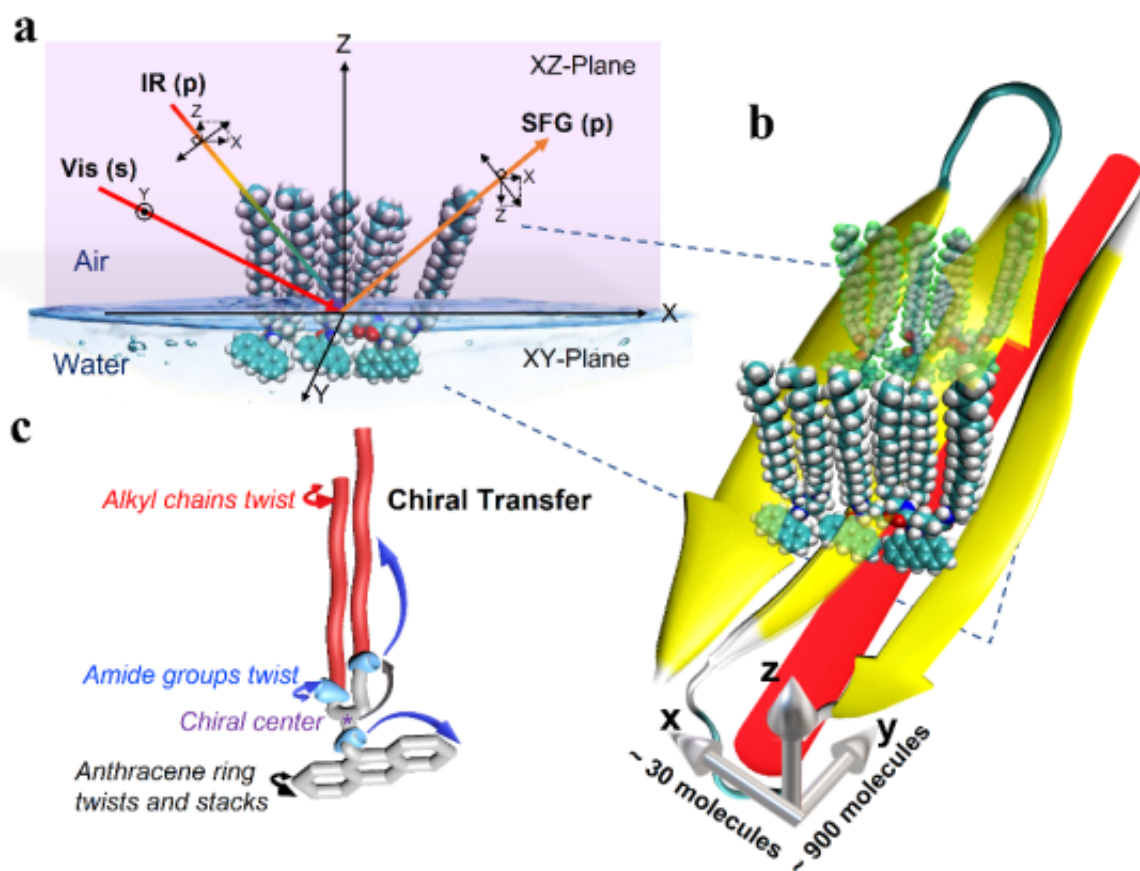
界面手性超分子自组装是近年来备受瞩目的研究领域之一。它与手性生命系统密切相关，也是构建大型功能性手性材料的重要方法。超分子手性与分子的手性相关，也取决于分子的空间排列。研究超分子手性形成机制中重要而困难的科学问题之一是原位研究界面分子手性如何被传递到超分子水平。迄今为止，这一问题尚未有明确答案。非线性光学方法较其他研究手段具有原位、界面和手性研究的敏感性，为阐释手性物质结构与其特性之间的关系提供了重要技术和方法。

近年来，中国科学院化学研究所分子反应动力学实验室研究员张贞课题组在界面超分子自组装单层膜的结构手性、手性调控（J. Phys. Chem. B.2020,124, 8179-8187）、界面生物膜磷脂分子由手性碳原子传递至宏观结构手性的分子机理（J. Chem. Phys.2022,156, 094704）以及界面手性分子诱导非手性分子组装动力学及其手性组装分子机理（J. Phys. Chem. Lett.2022,13, 3523-3528）方面取得系列研究成果。近日，在上述研究的基础上，科研人员使用自行研制的非线性光谱及成像仪器并结合分子动力学模拟，从分子水平进一步探索了界面超分子手性构筑过程中手性从分子手性中心到超分子尺度的手性传递机制，建立了非线性光谱定量研究界面超分子长程手性传递的方法。

该工作通过手性和频振动光谱（chiral SFG）结合分子动力学（MD）模拟研究了两亲分子 L - D -GAn (N, N'-bis (octadecyl)- L - D -(anthracene-9-carboxamide)-glutamic diamide)单分子膜界面，原位探究在构筑超分子单层的过程中，手性信息是如何在分子各基团间传递，并计算出分子各基团的取向信息以及组装形成的氢键数目。研究发现，位于谷氨酸单元的手性中心通过分子间氢键诱导与之相连的酰胺基团发生轻微扭曲，将手性传递到酰胺基团、蒽环和疏水烷基链上。研究表明，手性中心的手性信息可以通过分子间弱的非共价相互作用传递到400-500 nm距离内的数百个分子中。该研究对于阐释分子本征手性和超分子手性之间的关系具有重要意义。

12月14日，相关研究成果在线发表在《自然-通讯》（Nature Communications）上。

[论文链接](#)



原位探索界面处的长程手性传递机制

研究团队单位：化学研究所

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](#)转发