仿酶超分子催化研究获重要进展

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/27133.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！

仿酶超分子催化研究获重要进展。近日，华南师范大学化学学院副研究员李康和蔡跃鹏教授团队在国家自然科学基金、广东省基础与应用基础研究等项目的支持下，通过超分子自组装构筑的一维纳米管限域空腔来模拟生物酶的催化活性口袋，从而显著提升了催化反应的效率和选择性。相关成果发表于《自然-通讯》（Nature Communications）。

论文共同通讯作者蔡跃鹏教授表示，超分子限域催化的理念是通过人工精心设计并构筑的微环境来模拟生物酶的活性口袋，来提高催化反应的效率和选择性。因此，构筑具有精巧限域空间的人工仿酶超分子催化剂体系是该领域的关键问题之一。手性1,1'-联-2-萘酚（BINOL）磷酸酯衍生的Br?nsted酸是一类经典的优势有机小分子催化剂，被广泛应用于各类不对称催化。

论文第一作者和通讯作者李康表示，该研究利用这类有机催化剂作为分子基元，通过分子间的识别和重排等非共价相互作用，在水相介质中构建了手性超分子中空纳米管。通过X-射线单晶衍射、核磁共振、电喷雾质谱、原子力显微镜和透射电镜等多种技术手段对六方纳米管结构进行精确表征分析，证实其在均相水溶液中可以稳定存在。

此外，由于空腔内部约束效应，组装后的纳米管可以将3-aza-Cope重排反应的速率最高提升85倍。基于动力学和热力学分析结果，可以推断链状底物被捕获后会发生预组织并折叠成利于反应进行的椅状构象，从而在纳米管的限域空间中稳定了反应的过渡态，降低了反应的活化能。

值得注意的是，由于底物在受限环境下采取较小自由度的椅式构象，与反应焓变能垒的微小改变相比，熵变能垒显著降低，这是导致反应加速的主要因素。此外，该手性纳米管还展现出了良好的催化对映选择性，针对其在不对称催化方面的应用将会是接下来的研究重点。（来源：中国科学报 朱汉斌）

相关论文信息：https://doi.org/10.1038/s41467-024-47150-6

作者：李康等 来源：《自然—通讯》

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