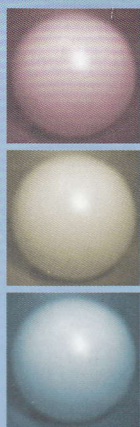


A TARTALOMBÓL:

- Enantioszelektív hidrogénezések módosított fémkatalizátorokon
- A sárkány és a spektrumok
- Áramlásos módszerekkel új kémiai terek irányába
- Az égésgátlás korszerű módszerei



MAGYAR KÉMIKUSOK LAPJA

A MAGYAR KÉMIKUSOK EGYESÜLETE HAVONTA MEGJELENŐ FOLYÓIRATA • LXXI. ÉVFOLYAM • 2016. JÚNIUS • ÁRA: 850 FT

Szupramolekuláris kapcsolatok



A lap megjelenését
a Nemzeti Kulturális Alap
támogatja

Nemzeti Kulturális Alap

A kiadvány
a Magyar Tudományos
Akadémia támogatásával
készült



Braun Tibor

■ ELTE Kémiai Intézet, MTA Könyvtár és Információs Központ | braun@mail.iif.hu

Aiszkhüloszi érzelmek nyomán a kémiában

Vendéglátó-vendég és börtön-rab szupramolekuláris kapcsolatok

Előszó

Mint dolgozatunk címe is jelzi, a továbbiakban a molekuláris vendéglátó-vendég (host-guest) kémiai kölcsönhatásokkal, de azokon túlmenően a börtön-rab kémiai kapcsolatokkal is foglalkozunk, és ez lényegében utal a molekulák, atomok vagy ionok kémiai *rabul ejtésére* (*encarcerating*) is, amit szintén témánkhoz tartozónak vélünk.

Ezen utóbbira vonatkoztatva az alábbiakban nem arról lesz szó, hogy hogyan ejti rabul a kémia a kémiai ismeretekre éhezõ koponyákat. Bár ez utóbbi lehetőség is fennállhat, és e sorok szerzője maga is átesett e folyamaton zsenge ifjúkorában, az, amivel itt foglalkozni kívánunk, magában a kémiában és nem a kémiával történik.

Ezek után valószínűsíthető, hogy lesznek, akik a dolgozat címét fejcsóválva olvassák. Hát már a kémiában is..., mondhatják azok, akik a rabul ejtést kizárólag az élővilágra jellemző jelenségnek hitték. Optimistább alkatúak talán nem is a negatív kicsengést vélik kihallani a rabulejtés mögül, hiszen romantikus emberi kapcsolatok során érzelmileg is rabul ejthető a partner és lélekmelengető írások foglalkoznak ezzel a költészetben és a szépirodalomban. A kémiában azonban mindez másképpen van. A fenti címben kiemeljük a molekulák közötti *börtön-rab* fogalmat, ami a *börtön* (*carcer*) szó felemlítésével már enyhíteni, sőt feledtetni látszik a szívbemarkoló aiszkhüloszi vendéglátó-vendég kapcsolatot, amely romantikát és szigorúbb kölcsönhatásokat ígér. Pedig még a kémiában is milyen szépen, barátságosan indult minden.

Bevezetés

1974-ben az egyesült államokbeli *Donald* és *Jane M. Cram* kutatóvegyész házaspár a „vendéglátó-vendég” (host-guest) elnevezést javasolta bizonyos kémiai kölcsönhatások és kapcsolatok (komplex vegyületek) jelölésére [1]. Javaslatukat a már előzőleg megfogalmazott kémiai elvek esztétikai kiegészítéseként *Aiszkhülosz* athéni költő és drámaíró egyik gondolatára is alapozták, aki 2500 évvel ezelőtt írta, hogy „a legkellemesebb (emberi) kapcsolat a vendéglátó és vendégek kapcsolata” [2]. Cramék nézeteiket a következőképpen foglalták össze „az elmúlt 17 évben kutatásaink során a vendéglátó (host) és a vendég (guest) közötti kellemes kapcsolattal foglalkoztunk a szerves molekulák szintjén”. A vendéglátó-vendég, valamint a komplex fogalmát és kötéseit a következők szerint definiáljuk [3]. A komplexek két vagy több molekulából vagy ionból állnak, melyeket egyedi szerkezeti kapcsolat tart össze olyan elektrosztatikus erőkkel, amelyek mások, mint a teljes, igazi kovalens kötések. Molekuláris komplexeket általában *hidrogénkötések*, *ionpárok*, π -savak vagy π -bázisok együtthatók, és *fém-ligandum* vagy *van der Waals* vonzási erők tartanak össze. Magas fokú szerkezeti szervezés általában csak sokszoros kapcsolati helyeken jön létre. Egy vendéglátó-vendég kapcsolat a vendéglátó és vendég kötés helyein létrejövő komplementer sztereoelektronikus elrendezést feltételez. A vendéglátót olyan szerves molekulaként vagy ionként definiálják, aminek a kötési helyei konvergálnak, míg a vendég komponens bármilyen molekulaként vagy ionként jel-

lemezhető, aminek a kötési helyei divergálnak a komplexben. Általában az egyszerű vendégek bőségesen állnak rendelkezésre, míg a vendéglátókat meg kell tervezni és szintetikus úton elő kell állítani [4]. Cram véleménye szerint „egy új terület új terminológiát igényel, melyet ha pontosan definiálnak, analógia segítségével megkönnyíti a gondolkodást a kutatás területén [3]. A Cram házaspár folytatta fent említett kutatásait és későbbi eredményeit egy „Container molecules and their guests” című kötetben foglalta össze [5].

Donald Cram saját kutatásai előzményeinek tekintette *Charles Pedersen* 1967-ben megjelent cikkeit [6, 7], amik a koronaéterek (crown ethers) felfedezéséről és azoknak az alkálifémekkel alkotott komplexekről számoltak be. Ugyancsak vendéglátó-vendég kémiai kapcsolatok előzményeként kezelte Cram *Jean-Marie Lehn* és munkatársai 1969-ben publikált felfedezését a kriptand-molekulák tervezéséről, szintéziséről és kötési tulajdonságairól [8, 9]. Jean-Marie Lehn az általa tovább folytatott kutatásait egy új területként definiálta, aminek a *szupramolekuláris kémia* elnevezést adta [10]. Itt tartanánk fontosnak megjegyezni, hogy Charles Pedersent, Donald Cramot és Jean-Marie Lehnt 1987-ben a Nobel Bizottság kémiai Nobel-díjjal tüntette ki „for their development and use of molecules with structure-specific interaction of high selectivity” (szerkezet-specifikus molekulák és nagy szelektivitású kölcsönhatásaik kidolgozásáért és felhasználásáért) [11–13].

Annak a bemutatására, hogy mennyire átfedőek voltak Cram és Lehn eredeti né-



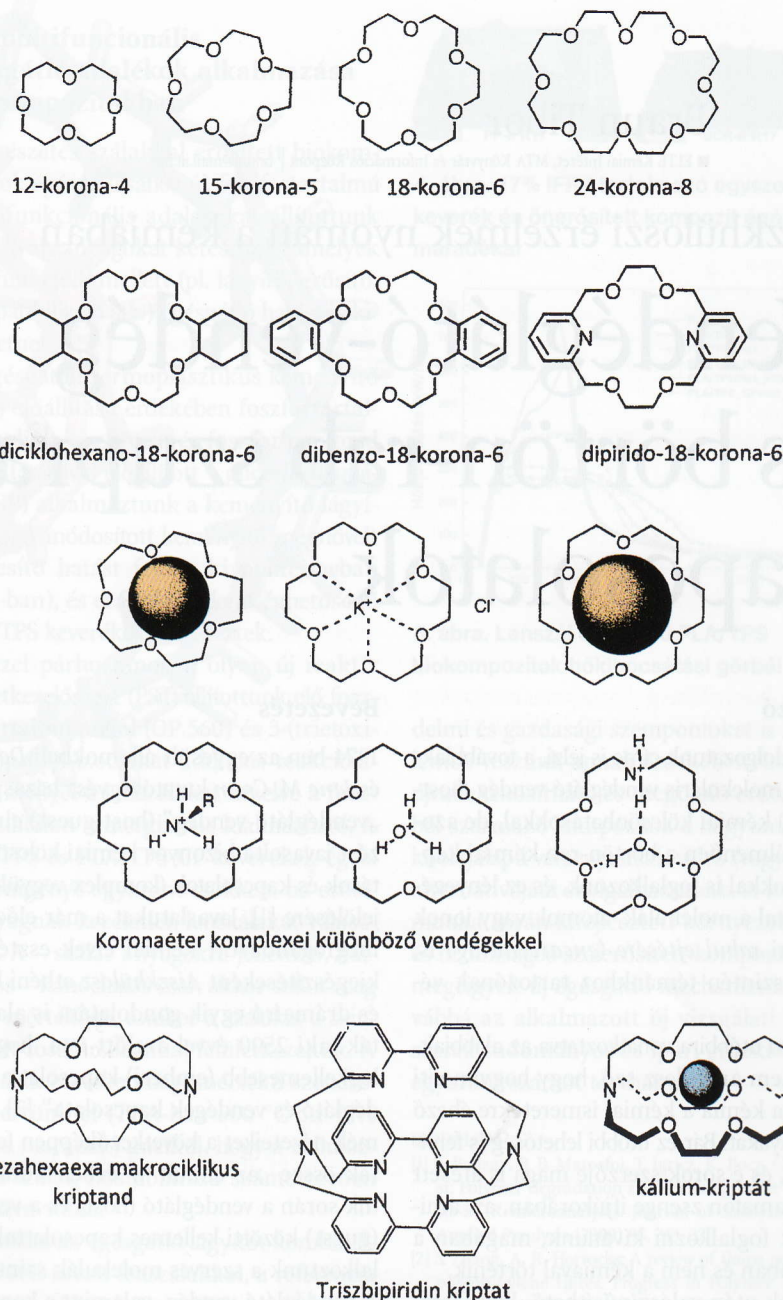
zetei és kutatási szándékai, talán elég itt az e dolgozat elején már szó szerint idézett, Cram-féle vendéglátó-vendég kapcsolatok definícióját összehasonlítani a Lehn Nobel-előadásán elhangzottakkal. „A molekuláris kémia a kovalens kötés kémiájával foglalkozik, illetve azon szabályokkal, amik irányítják, meghatározzák a molekuláris kémiát, és a molekulán túli kémiaként definiálható. Állíthatjuk, hogy a szupramolekulák a molekuláknak és az intermolekuláris kötéseknek ugyanazok, mint a molekulák az atomoknak és a kovalens kötéseknek.” [13].

Koronaéterek

De térjünk vissza kicsit részletesebben a kezdetekhez, illetve előzményekhez, azaz az 1967-ben Pedersen által felfedezett és általa koronaétereknek nevezett ciklikus poliéterekhez [6, 7]. Ezek a vegyületek nagyszámú, körben, szabályos intervallumokban elhelyezkedő szénatomokból állnak (innen Pedersen „korona” elnevezése), amiket oxigénatomok szakítanak meg (1. ábra). Fémionok hiányában a koronaéter gyűrű petyhüdt (floppy) jellegű. Azonban fémion bevezetésére (amikor a kötés a koronaéter gyűrű közepén jön létre), az ion a koronát szervezettebb, sík lapszerű alakúvá teszi. Pedersen ezen felfedezése a kémiai kutatás új irányát jelentette különös hangsúllyal az ionos kötések irányába, valamint utalás, illetve átvezetés a biológiában és a biotikus rendszerekben ismert nagyon gyenge nemkovalens kötések, azaz a gyenge kölcsönhatások felé. Időben még távolabbra visszautalva megemlíthetők *Linus Pauling* 1940-es, gyenge kölcsönhatásokra fókuszáló kutatásai, különösképpen azok, amik a kémiai részleges ionos jellegre utaltak a negativitás fogalmának felhasználásával [14]. 1969-ben Lehn és munkatársai [8] követték és folytatták Pedersen koronaéterekre vonatkozó elveit és vizsgálatait több hidat kapcsolva a koronaéterekhez, s háromdimenziós irányba fejlesztették még stabilabbá téve Pedersen síklapszerű komplexeit.

Kriptandok és szferandok

Ezeket a háromdimenziós policiklusos vegyületeket, mint már említettük, Lehn *kriptandoknak* [8, 9], illetve azok fémionokkal képzett vegyületeit *kriptátoknak*, illetve *kriptaplexeknek* nevezte (2. ábra). Röviddel azt követően, hogy Pedersen, aishkühösi érzelmek nyomán, felfedezte a koronaétereket, azaz vendégfogadásra,



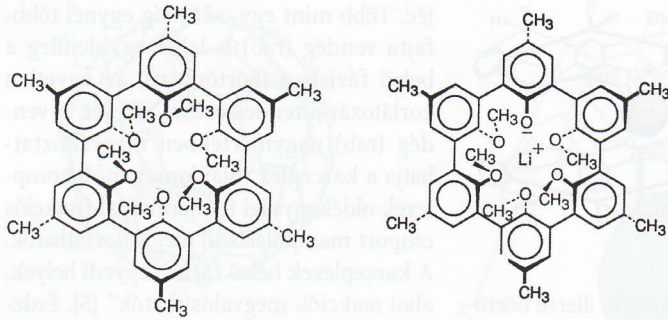
1. ábra. Koronaéterek, kriptátok és vendéglátó-vendég komplexeik [3, 5, 8, 10]

megkötésre szintetikus vendéglátó molekulákat, Lehn folytatta kutatásait újabb vendéglátók, a kriptandok szintézisével, majd 1987-ben újból Cram következett egy új vendéglátó család, a szferandok, illetve ugyancsak vendéglátó-vendég komplexeivel, a szferaplexek szintézisével [5, 12]. Tehát az aishkühösi vendéglátó sor immár a vendéglátó szívéllyesség kémiai megfelelőjével, a kötési affinitással jellemezve a *koronaéterek* < *kriptandok* < *szferandok* sort követte.

Már csak a fejlődés folyamatossága okán is hivatkozhatunk a Cram házaspár e dolgozat elején említett kijelentésére, miszerint a vendéglátó-vendég kapcsolatokhoz „egyszerű vendégek bőségesen állnak ren-

delkezésre, míg a vendéglátókat meg kell tervezni és szintetikus úton elő kell állítani” [4].

E gondolatok jegyében Cram és munkatársai egy csoport olyan új ligandumrendszert terveztek, amelyekben azok már a komplexképzést megelőzően előszerveződtek. Az ilyen előszerveződött vendéglátó-rendszereket Cram és munkatársai, mint már említettük, szferandoknak, illetve azok vendéglátó-vendég komplexeit szferaplexeknek nevezték [15]. A szferandok meglehetősen összetett szintézisének kérdéseivel itt nem kívánunk foglalkozni, de egy vendéglátó szferandmolekulát és egy vendéglátó-lítium vendégmolekulát a 2. ábrán bemutatunk.



2. ábra. Vendéglátó szferand-molekula és szferaplex vendéglátó-lítium komplex [5]

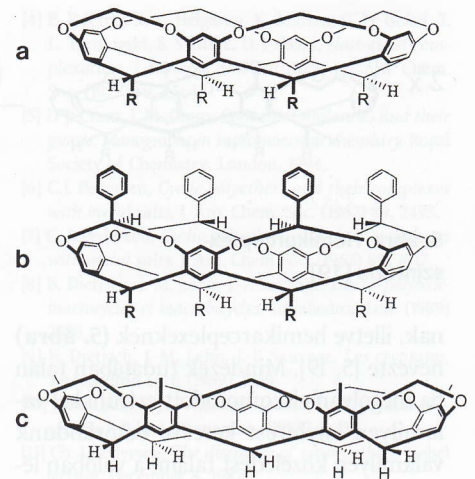
Kavitandok

A fentebb említett vendéglátó szívéllyességi affinitási sor további kiegészítéseként említést kell tegyünk Cram újabb vendéglátó molekuláiról, a kavitandokról. Ezek szintetikus szerves vegyületek, amiknek megerősített belső üregei (enforced cavities) eléggé nagyok ahhoz, hogy befogadjanak, komplexáljanak komplementer szerves vegyületeket vagy ionokat [5, 16]. Itt a két kulcsszó, azaz a „megerősített”-re és az „üreg”-re (cavity), kell hangsúlyozottan gondolni. Az előző, magasan előszervezett merev szerves molekulákra utal, azaz olyanokra, amelyek kevés konformációs vagy mozgási lehetőséggel rendelkeznek. Ebben az értelemben a kavitandok általában többszörös aromás gyűrűből képzett makrociklusos vegyületek, amik magasan konstrikatív módon, kovalensen kötődnek egymáshoz. Az „üreg” szó magától értetődően a topológiában egy egész idomsorra terjedhet ki a konkáv vagy tál alakútól egészen a teljesen bekapcsolt molekularis felületig. Amikor Cram bevezette az elnevezést, ő nem tett különbséget e két különböző (konvex-konkáv) görbület között [16]. Viszont a „tál” (bowl) alakú molekulák elterjedésével, azaz az olyan molekulákkal, amelyek tálszerűen teljesen magukba tudtak fogadni vendégmolekulákat, a kavitandófogalom a nyitott, konkáv alakú vendéglátók szinonimájává vált. A tál (bowl) alakú vendéglátók legkiemelkedőbb példáját a rezorci[4]arének és a ciklotrive-

ratrilének jelentik [5]. A 3. ábra tipikus vendéglátó kavitandokra mutat példát.

Karcerandok

Az előbbieken vázolt eredmények és megállapítások, mint írtuk, teljes összhangban lévőnek tűntek az ajszkhüloszi érzelmek alapjára épített vendéglátó-vendég (host-guest) kémiai elvekkel [17]. Azonban 1985-ben felhők kezdtek gyülekezni az ajszkhüloszi vendéglátó-vendég kémia egén. Ugyanis ebben az évben jelent meg Cram és munkatársainak a karcerandok és karceplexek felfedezéséről beszámoló cikke [18]. Cramék dolgozatából szó szerint idézve: „az eddig leírt több millió szerves vegyületen kívül léteznek olyan zárt felületű vendéglátók, amelyek megerősített, belső tere eléggé nagy ahhoz, hogy kovalens rácsok mögé olyan vendégeket tudjanak bebörtölnözni (incarcerate), melyeknek mérete a közönséges oldószer-molekuláknak felel meg. Erre a vegyületcsoportra a karcerandok megjelölést alkalmazzuk” (4. ábra). Az ajszkhüloszi érzelmi kapcsolatok feletti felhősödés a fentieket olvasva abból az ezúttal szívószerítő tényből származik, hogy a karcerandok és azok komplexei, a karceplexek esetében olyan kifejezések, mint „rács mögött tartás”, „bebörtönlés”, „fogoly” és a még elszomorítóbb „vendég rács mögött” kezdtek feltűnni a molekuláris konténervegyületekkel foglalkozó irodalomban. Ilyen esetekben definiálja Cram: a vendégmolekula vagy ion a kar-



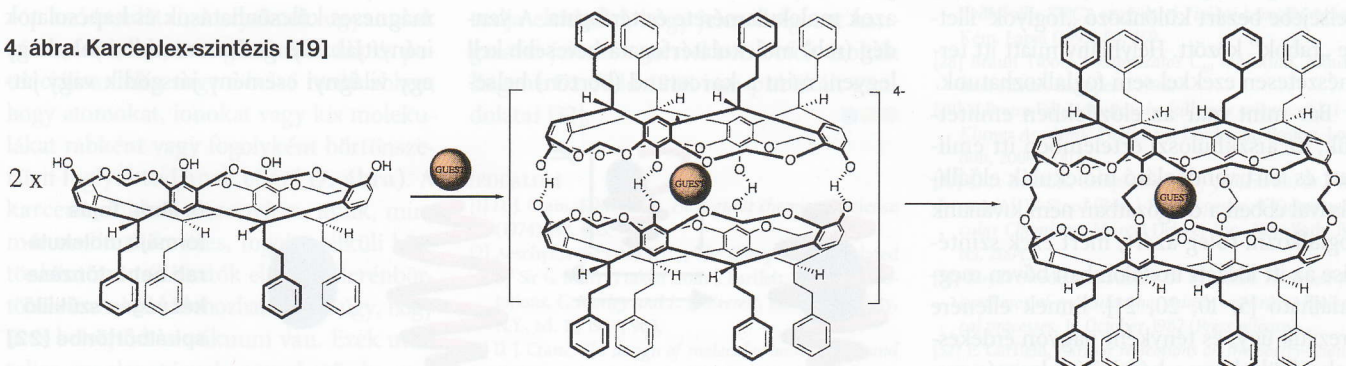
3. ábra. Tipikus vendéglátó kavitandok: a) szabályos kavitand, b) mély üregű kavitand, c) széles aljú kavitand [5]

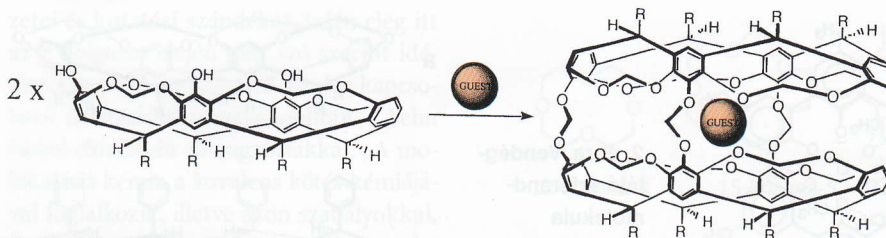
ceplexeiből csak köznapiasan mondva rácsfűrészeléssel, azaz kémiailag kovalens kötéstöréssel szabadulhat, s ezúttal már nem vendég, hanem rab (fogoly). Nem szükséges túl érzékeny és bonyolult magyarázó nevezéktan ahhoz, hogy az ilyen viszonyok már nem vagy csak nagyon nehezen tekinthetők ajszkhüloszi értelmezésben „kellemes érzelmi kapcsolatoknak”. Az olyan kapcsolatban, amiben a vendég nem tud szabadon jönni-menni, hanem ténylegesen „fogolyként” vagy „rabként” van jelen, azaz „rabul ejtett”, „rács mögötti” vagy bebörtönlött lesz, nem a kellemesség az uralkodó érzés.

Hemikarcerandok

Enyhítően hat mindezekre Cram továbbfejlesztése abban az irányban, hogy megalkotott és előállított olyan kavitandalapú, nagy üregű karcerandokat, amelyek eléggé nagy méretű réseket tartalmaztak ahhoz, hogy azokon keresztül magasabb hőmérsékleten a „vendégek” ezentúl már „rabok”, „foglyok” nem könnyen, de kiszabadulhassanak. Ezeket hemikarcerandok-

4. ábra. Karceplex-szintézis [19]





5. ábra. Hemikarceplex-szintézis [19]

nak, illetve hemikarceplexeknek (5. ábra) nevezte [5, 19]. Mindezek tudatában talán ha mégolyan elszomorodott szívünkkel valamilyen enyhítést keresve bátor kodunk valamilyen közeledést találni a valóban lélekemelő aiszkhüloszi érzelmek és a nem igazán szívderítő bebörtönzési törekvések közé, esetleg megtehetjük, hogy kétféle kapcsolati csoportosítást képzelünk el azáltal, hogy a két extrém állapot, azaz „vendég”, illetve „fogoly” közé a kémiát és a molekulákat is érintő, közbeeső helyzetet, állapotot iktatunk. Ennek értelmében a koraplexeket, kriptaplexeket, szferaplexeket, kriptaszferaplexeket, hemiszferaplexeket, kaviplexeket stb. [5] „látogató”, vagy ha akarjuk, „vizitand” (vizit: látogatás) kapcsolatú vegyületeknek tekinthetjük, mivel a „látogatás” folyamán a vendéglátó-vendég aiszkhüloszi kellemes „vizitelő” kapcsolata érvényesül. Ezzel szemben a karceplexek mint „kaptivand” (captivand) vegyületek jelennek meg, ahol a „foglár” molekulák a „foglyokat” a „börtön-rab” kapcsolatban „befogják”, és irreverzibilisen, kovalens rácsok mögött tartják nem igazán kellemes érzelmi, hanem szigorú „fogoly-foglár” érzelmetlen kapcsolatban.

A fentiek további kiterjesztésére feltétlenül megjegyzendő, hogy a „foglár-fogoly”, illetve „börtön-rab” kémia nemcsak az előbbiekben ismertetett különböző típusú és alakú karcerandok, molekulakonténerek, molekulakapszulák képződésével és tanulmányozásával foglalkozhat, hanem azzal az egyáltalán nem elhanyagolható kérdéssel is, hogy vajon milyen jellegű „belső kapcsolatok”, azaz kémiai reakciók játszódhatnak le a „foglár”, a „börtön” molekulák belsejébe bezárt különböző „foglyok” illetve „rabok” között. Helyhiány miatt itt természetesen ezekkel sem foglalkozhatunk.

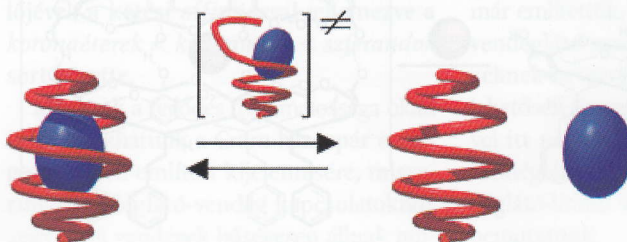
Bár mint már az előzőekben említettük, az aiszkhüloszi értelemben itt említett és leírt vendéglátó molekulák előállításával ebben a dolgozatban nem kívánunk foglalkozni főleg azért, mert ezek szintézise az itt idézett irodalomban bőven megtalálható [5, 10, 20, 21]. Ennek ellenére érezzük úgy, és tényként nagyon érdekesnek véljük, hogy a kémiai értelmezés sze-

rinti Cram-féle karcerandok, illetve börtönök egyikét sem sikerült „üresen”, azaz „rabok” vagy „foglyok” nélkül, illetve azok távollétében előállítani. Ennek Cram szerint entalpiás és entrópiás okai vannak [5]. Aiszkhüloszi értelmezésben a jó hír az, hogy az üres börtönök léte lélekmengetőbb jelenség, mint a rabokkal vagy foglyokkal töltöttek. A rossz hír sajnos azonban az, hogy ilyenek nem léteznek. De mint a megfelelő fentebbi fejezetben leírtuk, léteznek a hemikarcerandok (5. ábra) és ezeket talán börtön helyett átjárhatóbb, illetve enyhébb értelmezésben fogházaknak nevezhetnénk. Még mindig a karcerandok, illetve a börtönök körül időzve rendkívül érdekesnek tartjuk Cram erre vonatkozó összegező nézeteit, amiket a legcélszerűbbnek tartunk szó szerint idézni:

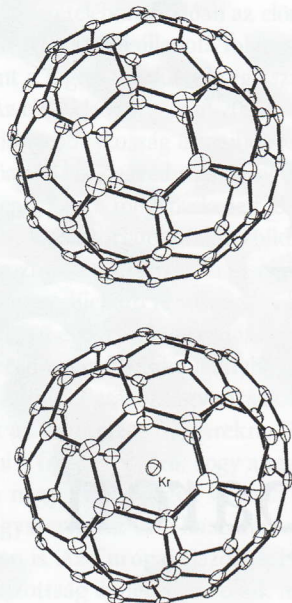
„A karceplexek belseje eléggé unikális, egyedi ahhoz, hogy azt az anyag egy új fázisának (a new phase of matter) nevezzük. Ezek a komplexek körvonalazható belsejű zárt molekuláris cellák, amik megtartják szerkezeti integritásukat szilárd anyagként, oldott szolútumként vagy még rövid életű (DC-MS-sel mért) gázokként is. Vendégei (jelen szerző szerint foglyai) kiszabadulni csak kovalens kötések feltörésével (jelen szerző szerint rácsfűrészeléssel) tudnak. A karceplexek olyan diszkrét molekuláris tulajdonságokkal rendelkeznek, mint molekulatömeg, térfogat, molekulaképlet, kromatográfiás retenció idő, és kristályszerkezet-vizsgálatoknak is alávetethetők. A karceplexek belseje szabad tér és vendég (jelen szerző szerint rab) által elfoglalt tér, és ezek relatív mennyisége megtervezhető. A bebörtönözhető vendégekre (rabokra) vonatkozó korlátozások azok molekulamérete és térfogata. A vendég (rab) molekulatérfogata kevesebb kell legyen, mint a karcerand (börtön) belse-

jéé. Több mint egy, sőt még egynél több-fajta vendég (rab) is lehet egyidejűleg a belsejében (börtönben), az egyetlen korlátozás a rendelkezésre álló tér. A vendég (rab) nagymértékben megváltoztathatja a karceplex tulajdonságait. E komplexek oldékonysági tulajdonságai funkcionális csoport manipulálással megváltoztathatók. A karceplexek belsejében egyedi helyek, ahol reakciók megvalósíthatók” [5]. Érdekességgé a karceplexekhez hasonlítható olyan börtön-rab kapcsolatot is megemlítenénk, ahol a börtön-üreg (cavity) nem gömbölyű, hanem a börtönrácsokat hámozott almahéjszerű (apple peel) börtönrács alkotja [22] (6. ábra).

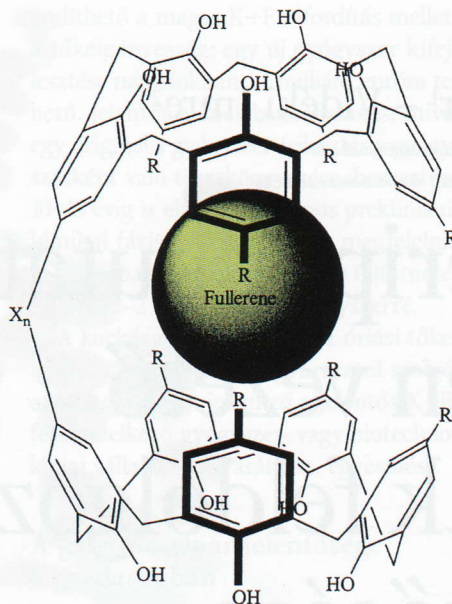
A vendéglátó-vendég, illetve börtön-rab szupramolekuláris kapcsolatok jelentőségét és alkalmazási lehetőségeit a kémiában és a biológiai folyamatok jobb megértésében, modellezésében itt nem kell külön hangsúlyoznunk, elég, ha utalunk a már említett 1987-es kémiai Nobel-díj laudációs szövegére. Ellenben szót érdemes és kell ejtenünk a fentiekben kiindult fejlesztésekről. Ezek jobb átlátásához és megértéséhez az újonnan kifejlesztett vegyületek kémiájához, tipológiájához átfogó némenklatúrát, rendszerezést is kidolgoztak [23]. Már csak a fentebb leírt karcerandokra, illetve molekuláris börtönökre vonatkoztatva a Cram által bevezetett konténermolekulák fogalmát, például könyve [5] címéből követve, a témára vonatkozó szakirodalom számos átfedő szinonim elnevezést, mint molekuláris cellák, molekuláris kapszulák, molekuláris edények és számos más is használ. És persze átfedően, illetve belefoglalóan tekintetbe kell venni az olyan fogalmakat is, mint például a molekuláris önszervezés (molecular self-assembly) [24] vagy molekuláris önfelismerés (molecular recognition) [25]. Ezáltal is világossá válik, hogy mindazt, amiről a fentiekben beszámoltunk, azaz az ismertetett molekulákat olyan nemkovalens erők, mint hidrogénkötés, fémion-koordinálás, hidrofobicitás, van der Waals-kötések, π - π kölcsönhatások és elektrosztatikus, valamint elektromágneses kölcsönhatások és kapcsolatok irányítják. Nyugodtan mondhatjuk, hogy egy világnyi esemény játszódik vagy ját-



6. ábra. Tojás formájú molekularab bebörtönzése két végén szűkülő spirálbörtönbe [22]



7. ábra. Buckminsterfullerén börtönmolekula és endohedrális kripton rab



8. ábra. Buckminsterfullerén börtön bebörtönzése hidazott kalix[5]arén börtönrácsok mögé [29]

szódhat le például azokban a molekuláris konténerekben (például kavítandokban vagy karcerandokban), amelyeket megfelelő körülmények között a kémiai kapcsolatok és mondhatjuk, mégiscsak aiszkhüloszi érzelmek hoznak létre [26].

Fullerénbörtönök és endohedrális fullerén börtön-fogoly kapcsolatok

A továbbiakban ismertetettéket csak azért említjük röviden itt, mert úgy véljük, hogy szervesen kapcsolódnak az előbbieken vázolt gondolatokhoz. A rövidséget az is indokolja, hogy ezekről más vonatkozásban már más helyen is beszámoltunk [27–29]. Ennek értelmében hivatkozunk itt egy másik eseményre, mely ugyancsak hozzájárult az Aiszkhülosz-ézelmi vendéglátó-vendég kémiai vonatkozások fent említett nevezéktani felhősödéséhez: ez a buckminsterfullerén és oligomerjeinek 1985-ben történt felfedezése volt. Ezek a szén új allotróp módosulatai, melyeknek ugyancsak zárt a felületük, üres gömb alakúak és potenciálisan elég nagy a belső terük ahhoz, hogy atomokat, ionokat vagy kis molekulákat rabként vagy fogolyként börtönszerűen foglyul tudjanak ejteni (7. ábra). A karcerandokhoz viszonyítva, amik, mint már említettük, üres, fogoly nélküli börtönként nem állíthatók elő, a fullerénbörtönök üresen is létrehozhatók, sőt úgy, hogy üres belsejükben vákuum van. Ezek után teljes meglepetésnek nevezhető, hogy a

börtön bebörtönzését is megvalósították [30], mint az a 8. ábrán látható.

Végszó

Befejezésül vissza kell térnünk Pedersen, Cram és Lehn e dolgozatban már említett, 1987-beli kémiai Nobel-díjának indoklására, és azt ki kell egészítenünk szó szerinti idézésben a következőkkel: „A díjazottak kutatásai nagy jelentőségűek a koordinációs kémia, a szerves szintézis, az analitikai kémia és a bioszerves, valamint a bioszervetlen kémia fejlődésére, és ezáltal alapjait képezték a kémián belüli interdiszciplináris területnek, ami jelenleg eljutott oda, hogy vendéglátó-vendég vagy szupramolekuláris kémiának nevezhető” [31]. Úgy véljük, hogy ezeknek a felfedezéseknek és azok továbbfejlesztésének az ebben a dolgozatban bemutatott megközelítése mindennapi emberi érzelmi hangsúlyt ad vagy adhat az azokra vonatkozó kémiai felfedezéseknek. E sorok szerzője azt sem tudja eltitkolni, hogy jelen dolgozat hangulatát jelentős mértékben befolyásolták Eugene Garfield 1986-ban publikált gondolatai [32].

IRODALOM

- [1] D. J. Cram, J. M. Cram, *Host-guest chemistry*, Science (1974) 183, 803.
- [2] Aeschylus (525–416 B.C.), *The Choephore* (translated by Sir G. Murray) taken from J. Bartlett, *Familiar Quotations*, C. Morley and L. D. Everett, Eds. Garden City, N.Y., ed. 11, 1944, 963.
- [3] D. J. Cram, *The design of molecular hosts, guests and their complexes*, Science (1988) 240, 760.

- [4] E. P. Kyba, R. C. Helgeson, K. Madan, G. W. Gokel, T. L. Tarnowski, S. S. More, D. J. Cram, *Host-guest complexation. 1. Concept and illustration*, J. Am. Chem. Soc. (1977) 99, 2564.
- [5] D. J. Cram, J. M. Cram, *Container molecules and their guests. Monographs in supramolecular chemistry*, Royal Society of Chemistry, London, 1994.
- [6] C. J. Pedersen, *Cyclic polyethers and their complexes with metal salts*, J. Am. Chem. Soc. (1967) 89, 2495.
- [7] C. J. Pedersen, *Cyclic polyethers and their complexes with metal salts*, J. Am. Chem. Soc. (1967) 89, 7017.
- [8] B. Dietrich, J.-M. Lehn, J.-P. Sauvage, *Diaza-polyoxa-macrocycles et macrobicycles*, Tetrahedron Lett. (1989) 2885.
- [9] B. Dietrich, J.-M. Lehn, J.-P. Sauvage, *Les cryptates*, Tetrahedron Lett. (1969) 2889.
- [10] J.-M. Lehn, *Supramolecular chemistry. Scope and perspectives*, J. Incl. Phenom. (1988) 6, 351.
- [11] Ch. J. Pedersen, *The discovery of crown ethers*, Nobel lecture, December 8, 1987.
- [12] D. J. Cram, *The design of molecular hosts, guests, and their complexes*, Nobel lecture, 8 December, 1987.
- [13] J.-M. Lehn, *Supramolecular chemistry, scope and perspectives. Molecules, supramolecules, and molecular devices*, Nobel lecture, 8 December, 1987.
- [14] L. Pauling, *The Nature of the Chemical Bond and the Structure of Molecules and Crystals: An Introduction to Modern Structural Chemistry*, Cornell University Press, Ithaca, NY, 1960.
- [15] D. J. Cram, T. Kaneda, R. C. Helgeson, S. B. Brown, C. B. Knobler, E. F. Maverick, K. N. Trueblood, *Host-guest complexation. 35. Spherands, the first completely pre-organized ligand systems*, J. Am. Chem. Soc. (1985) 107, 3645.
- [16] J. R. Moran, S. Karbach, D. J. Cram, *Cavitands: synthetic molecular vessels*, J. Am. Chem. Soc. (1982) 104, 5826.
- [17] F. Vögtle, E. L. Böschke (Eds.), *Host-guest chemistry, in Topics in Current Series*, vol. 1–3, Springer, Berlin, 1982–1984.
- [18] S. Karbach, Y. H. Kim, L. Baczyński, G. W. Kallmeyn, *Shell closure of two cavitands forms carcerand complexes with components of the medium as permanent guests*, J. Am. Chem. Soc. (1985), 107, 2575.
- [19] B. C. Gibb, *Carcerands and Hemicarcerands*, in *Encyclopedia of Supramolecular Chemistry*, Eds. Atwood, J. W. Steed, J. Marcel Dekker Inc., New York, Basel, 2004, 189.
- [20] J. Atwood, J. W. Steed (Eds.), *Encyclopedia of Supramolecular Chemistry*, Marcel Dekker Inc., New York, Basel, 2004.
- [21] J. A. Bryant, M. T. Blanda, D. J. Cram, *Host-guest complexation. 55. Guest capture during shell closure*, J. Am. Chem. Soc. (1991) 113, 2167.
- [22] J. Garric, J.-M. Léger, I. Huc, *Molecular Apple Peels*, Angew. Chem. Int. Ed. (2005) 44, 1954.
- [23] E. Weber, *Classification and Nomenclature of Supramolecular Compounds*, in J. Atwood, J. W. Steed (Eds.), *Encyclopedia of Supramolecular Chemistry*, Marcel Dekker Inc., New York, Basel, 2004.
- [24] <https://en.wikipedia.org/wiki/Self-assembly>
- [25] https://en.wikipedia.org/wiki/Molecular_recognition
- [26] R. J. Hooley, J. Rebek Jr., *Chemistry and catalysis in functional cavitands*, Chem Biol. (2009) 16, 255.
- [27] Braun Tibor, *A fullerénkalitkák belvilága és az endohedrális X@C_{2n} vegyületek fizikai kémiája*, Magy. Kém. Lapja (1995) 50, 369.
- [28] Braun Tibor, *A káprázatos C₆₀ molekula*, Akadémiai Kiadó, Budapest, 1996.
- [29] T. Braun Ed., *Advances in fullerene science*, vol. 1–6, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, Boston, London, 2000–2007.
- [30] C. L. Ralston, *Complexation of fullerenes*, in J. Atwood, J. W. Steed (Eds.), *Encyclopedia of Supramolecular Chemistry*, Marcel Dekker Inc., New York, Basel, 2004.
- [31] Royal Swedish Academy of Sciences. *Awarded for syntheses of molecules that mimic important biological processes*. 14 October 1987 (Press release)
- [32] E. Garfield, *Further reflections on the poetry-science connection*, Current Contents (1986) 7, 3.