Veröffentlichung in Nature Communications Molekulare Nanostrukturen lassen sich durch Ultraschall aktivieren

7.7.2026 - Bernd Schmidt | Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf

Forschenden der Heinrich-Heine-Universität Düsseldorf (HHU) ist ein wichtiger Schritt auf dem Weg zu intelligenten molekularen Materialien gelungen. Das Team um Dr. Bernd M. Schmidt (Institut für Organische Chemie und Makromolekulare Chemie) und Prof. Dr. Jan Meisner (Institut für Physikalische Chemie) konnte zeigen, dass sich komplexe molekulare Nanostrukturen gezielt durch Ultraschall aktivieren, kontrolliert zerlegen und sogar wieder zusammensetzen lassen. Die Ergebnisse wurden jetzt in der renommierten Fachzeitschrift Nature Communications veröffentlicht. Diese Erkenntnis könnte künftig zum Beispiel helfen, zielgerichtetere Krebsmedikamente herzustellen.

Supramolekulare Käfige gehören zu den faszinierendsten Strukturen der modernen Chemie. Sie bestehen aus einzelnen Molekülbausteinen, die sich selbst zu dreidimensionalen Architekturen organisieren. Solche Nanostrukturen werden unter anderem als molekulare Reaktionsräume, Sensoren oder potenzielle Wirkstofftransporter in Medikamenten erforscht. Während ihre gezielte Herstellung heute gut verstanden ist, ist der gezielte Abbau herausfordernd.

Genau hier setzt die Düsseldorfer Arbeit an, die nun in der renommierten Fachzeitschrift *Nature Communications* erschienen ist. Die Forschenden statteten molekularen Käfige, die auf dem chemischen Element Palladium basieren, mit flexiblen Polymerketten, also langen Molekülketten, aus. Werden diese Systeme mit Ultraschall behandelt, übertragen die Polymerketten mechanische Kräfte auf das Innere der Nanostrukturen. Dadurch können gezielt Bindungen gelöst und die Käfige kontrolliert geöffnet werden. Dieser Mechanismus ist etwa wichtig, um Wirkstoffe in Medikamenten gezielt im Körper einbringen zu können.

„Selbstassemblierte Moleküle werden häufig als dynamische Systeme beschrieben. Bisher fehlten jedoch Methoden, um gezielt mechanisch in diese Prozesse einzugreifen. Unsere Arbeit zeigt, dass Ultraschall ein äußerst effektives Werkzeug sein kann, um solche Nanostrukturen kontrolliert zu steuern“, erklärt Dr. Bernd M. Schmidt.

Besonders bemerkenswert ist, dass die Forschenden nicht nur den Zerfall der Strukturen beobachten konnten. Unter geeigneten Bedingungen gelang es ihnen auch, die aktivierten Systeme wieder vollständig zusammenzusetzen.

Den praktischen Nutzen erprobten die Forschenden unmittelbar in einem weiteren Schwerpunkt der Studie: Die kontrollierte Freisetzung des Krebsmedikaments Cisplatin. Das Medikament wurde zunächst in den molekularen Käfigen eingeschlossen. Anschließend führte die Ultraschallbehandlung dazu, dass die Käfige gezielt geöffnet und das Medikament freigesetzt werden konnte.

„Die Freisetzung von Cisplatin diente uns als Modellbeispiel, um zu zeigen, dass mechanische Kräfte genutzt werden können, um molekulare Fracht gezielt aus supramolekularen Nanostrukturen freizusetzen“, sagt Erstautor Tim David. „Damit eröffnen sich langfristig interessante Perspektiven für die Entwicklung intelligenter Transportsysteme.“

Um die experimentellen Beobachtungen auf molekularer Ebene zu verstehen, kombinierten die Forschenden ihre Experimente mit modernen Computersimulationen. Eine besondere Herausforderung bestand dabei in der Größe und Komplexität der untersuchten Systeme. Je nach Architektur bestehen die solvatisierten Strukturen aus mehreren hundert bis über 4.000 Atomen. Hierbei muss die Wechselwirkung zwischen diesen Atomen mit einer hohen Genauigkeit berechnet werden, um auch die durch die mechanische Kraft induzierten Bindungsbrüche korrekt zu beschreiben. Klassische Simulationsmethoden stoßen hier schnell an ihre Grenzen: Entweder sind sie für solche großen Systeme zu rechenintensiv oder können das Brechen von Bindungen schlicht nicht genau genug beschreiben.

Das Team von Prof. Dr. Jan Meisner nutzte deshalb ein spezielles maschinell gelerntes interatomares Potential, welches sie selbst explizit für die Beschreibung von Metall-Ligand-Bindungen optimierten. Dadurch konnten Simulationen realisiert werden, die deutlich schneller als konventionelle quantenchemische Rechnungen sind, aber dennoch chemische Reaktionen mit annähernd gleicher Genauigkeit abbilden können. So konnten die Forschenden nachvollziehen, bei welchen Kräften einzelne Palladium-Stickstoff-Bindungen brechen und wie der Zerfall der Käfige unter mechanischer Last abläuft.

„Mit den neuen Simulationen konnten wir nachvollziehen, welche Kräfte erforderlich sind, um einzelne Bindungen innerhalb der Käfige zu lösen“, erläutert Prof. Dr. Jan Meisner. „Das gibt uns einen direkten Einblick in Prozesse, die experimentell kaum beobachtbar sind. Der Einsatz von maschinellem Lernen ermöglichte uns hierbei, große und komplexe Systeme effizient zu simulieren und die mechanochemisch-induzierte Reaktivität zu untersuchen.“

Die Arbeit liefert damit grundlegende Erkenntnisse darüber, wie mechanische Kräfte auf supramolekulare Systeme übertragen werden können. Gleichzeitig eröffnet sie neue Möglichkeiten für die Entwicklung adaptiver Materialien, schaltbarer molekularer Systeme und zukünftiger Wirkstofftransporter.

Die Studie entstand am Institut für Organische Chemie und Makromolekulare Chemie sowie am Institut für Physikalische Chemie der HHU.

Originalpublikation

Mechanochemical disassembly pathways of self-assembled polymer-decorated PdnL2n supramolecular architectures
Tim David, Regina Lennarz, Jan A. Meissner, Anne Germann, Jan Meisner und Bernd M. Schmidt.
Nature Communications 2026

DOI: 10.1038/s41467-026-74561-4

Zum Volltext.

https://www.hhu.de/die-hhu/presse-und-marketing/aktuelles/pressemeldungen-der-hhu/news-detailansicht/molekulare-nanostrukturen-lassen-sich-durch-ultraschall-aktivieren