

## Химия молекулярная :

создание новых молекул за счет образования ковалентных, ионных связей;

создание новых материалов (полимеры, кристаллы).

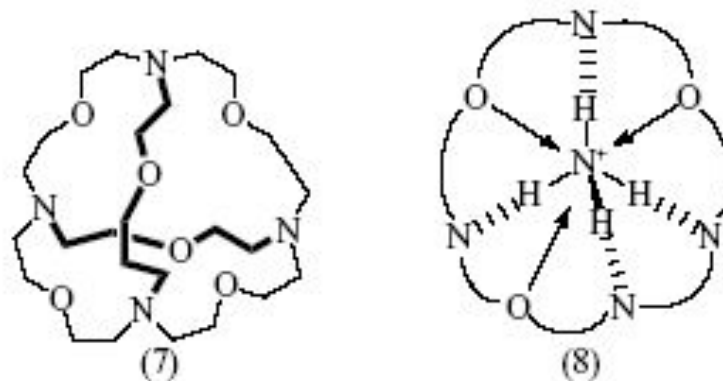
## Химия супрамолекулярная:

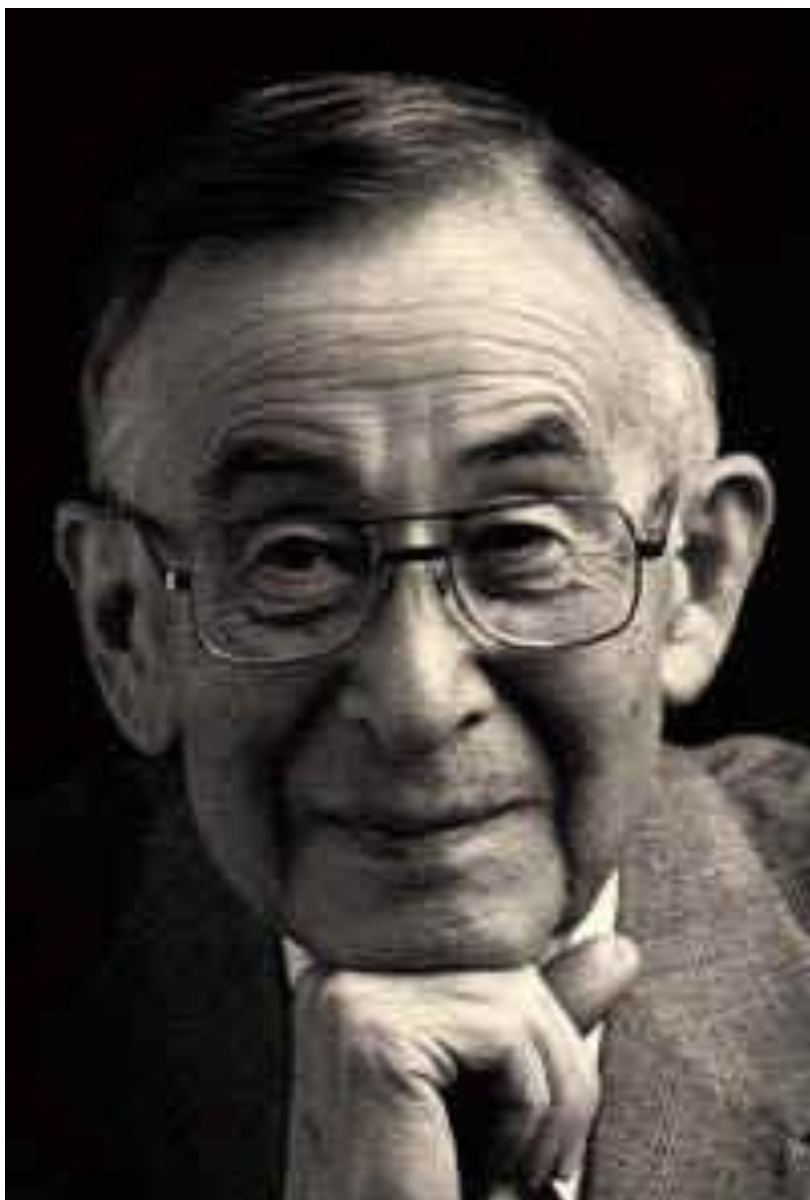
ансамбли органических молекул, комплексы неорганических молекул с органическими лигандами;

слабые нековалентные взаимодействия (электростатические взаимодействия, водородные связи, ван-дер-ваальсовы силы, стэкинг взаимодействие, координационные связи);

взаимодействия являются высокоспецифическими;

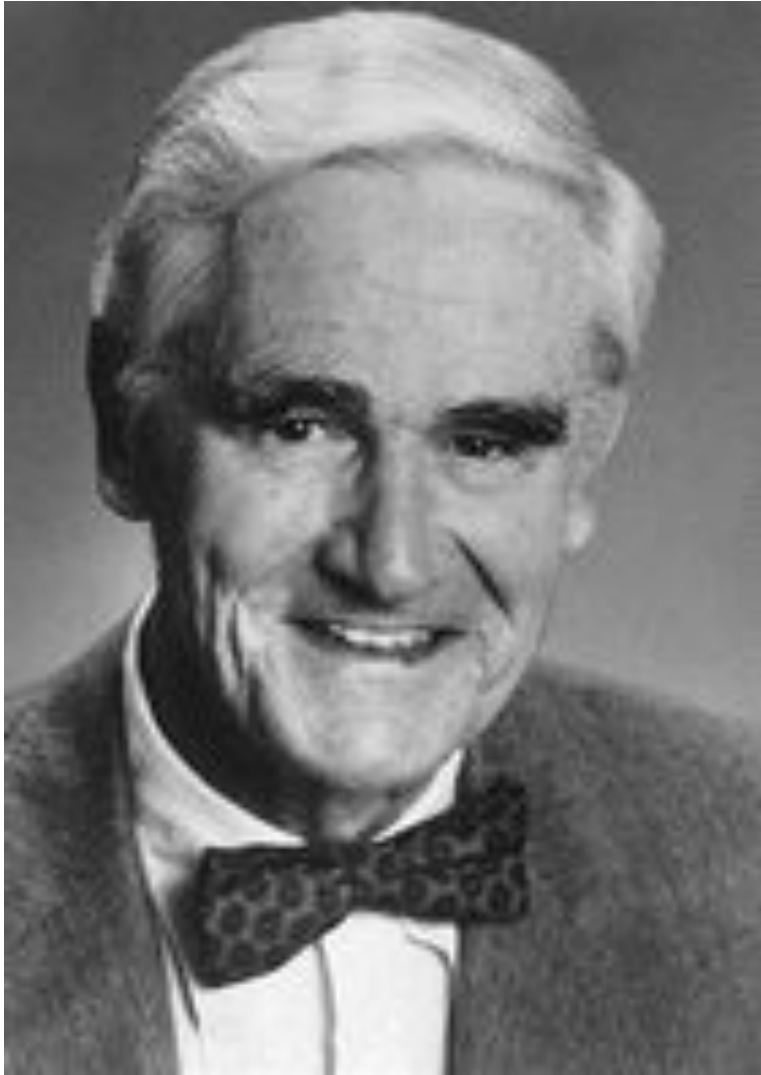
характерны процессы распознавания, реагирования, транспорта.





В 1987 работа Ч. Дж. Педресена была отмечена Нобелевской премией, вместе с Д.Крамом и Ж.-М.Леном «за разработку и применение молекул со структурно специфическими взаимодействиями с высокой селективностью».

Charles John Pedersen



Donald J. Cram



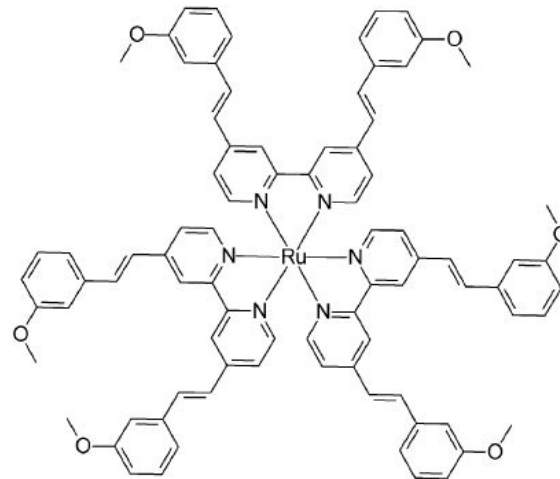
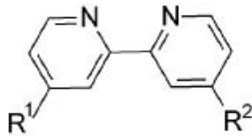
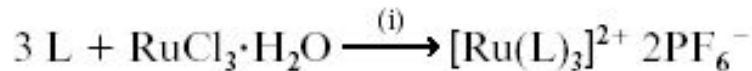
Jean-Marie Lehn

# Понятия супрамолекулярной химии

Рецептор (или лиганд) + субстрат - реагирующие частицы;

Соединения включения, клатраты, соединения типа гость-хозяин - супрамолекулы, продукты ассоциации молекул;

Самоорганизация, самоассоциация - процессы образования супрамолекул;



Молекулярное распознавание, превращение, перенос (транспорт) - функции супрамолекул;

Супрамолекулярная химия : Химия+Физика+Биология

## За счет каких сил происходит связывание молекул в ансамбли?

C-C 347 кДж моль<sup>-1</sup>

C=C 260 кДж моль<sup>-1</sup>

Координационная связь 50-70 кДж моль<sup>-1</sup>

Водородная связь 10-25 кДж моль<sup>-1</sup>

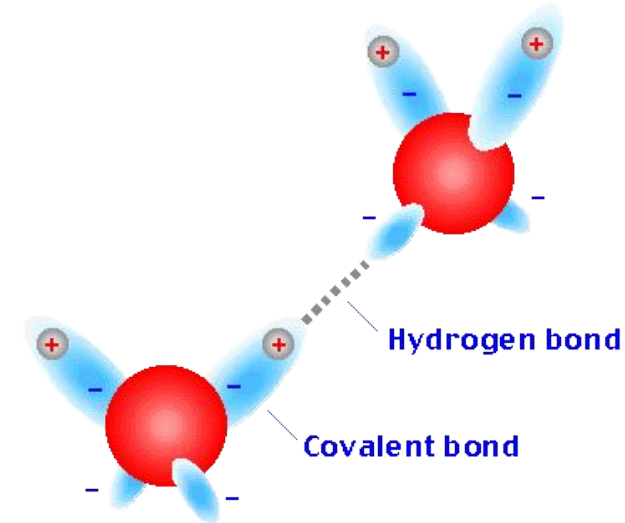
Диполь-дипольное взаимодействие 10-25 кДж моль<sup>-1</sup>

Силы Ван-дер-Ваальса 20-30 кДж моль<sup>-1</sup>:

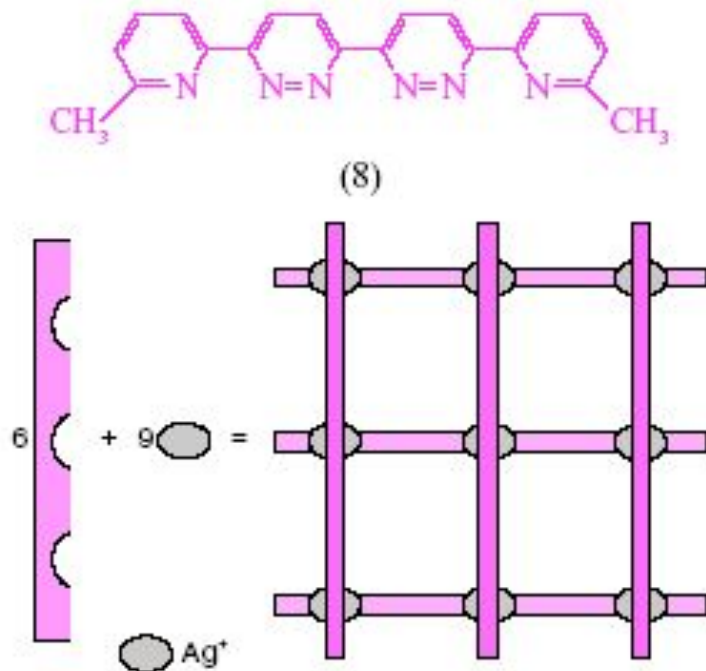
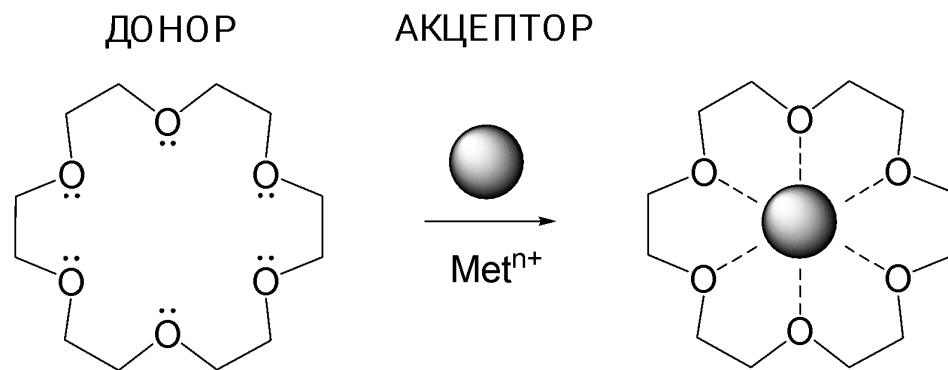
нейтральная молекула → индуцированная поляризация →  
взаимодействие с другой молекулой

### Как проявляются межмолекулярные связи:

увеличением температуры плавления или кипения агрегата по сравнению с исходной молекулой,  
поскольку необходимо потратить энергию на разрушение связи.



# Координационная связь



Пиридин    Пиридазин (1,2-дiazин)

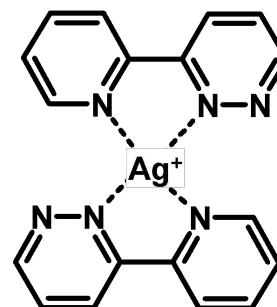
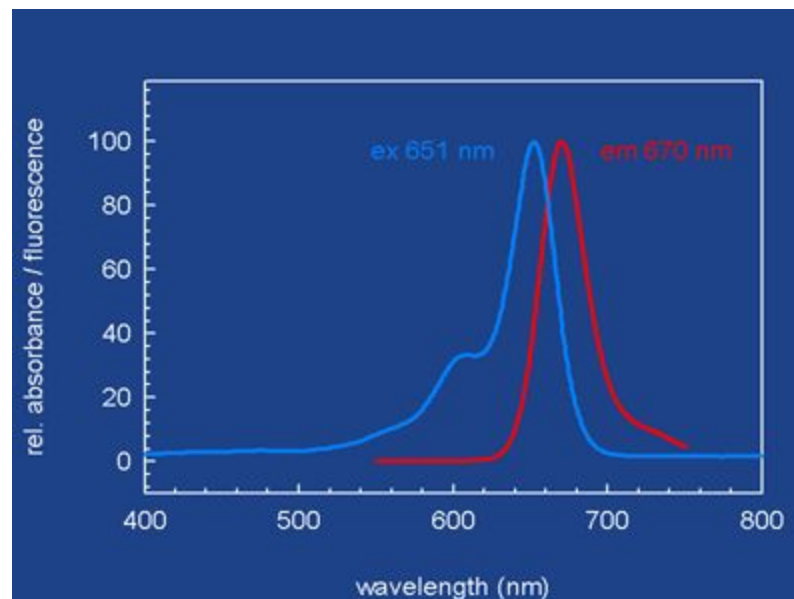
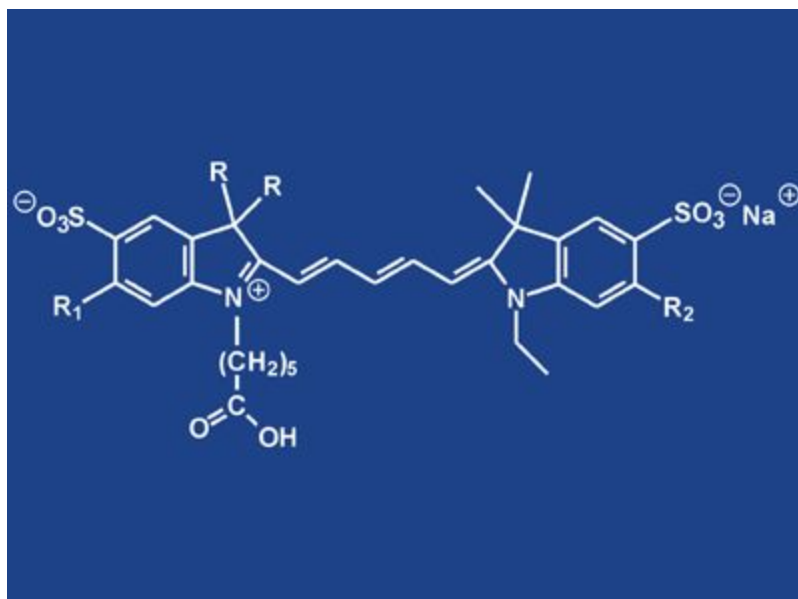
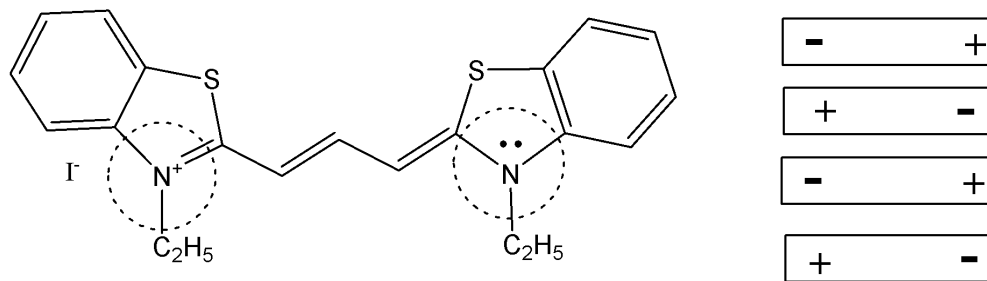


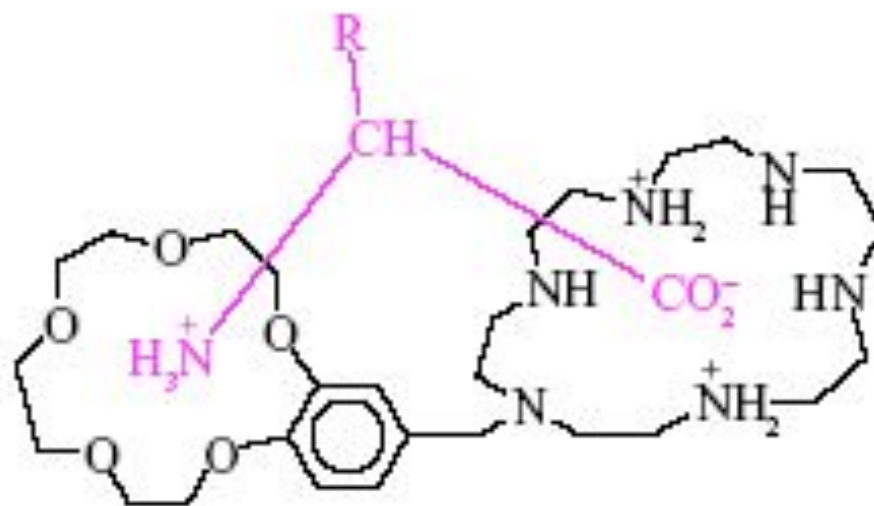
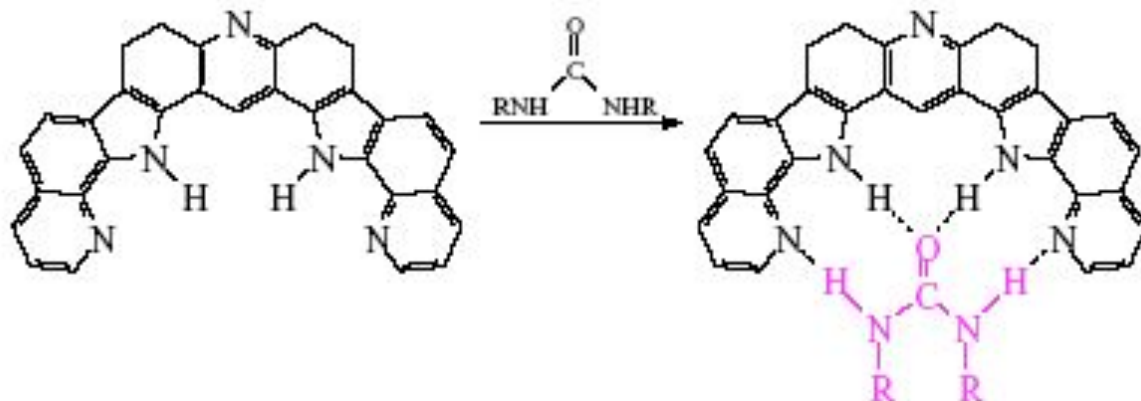
Рис. 4. Самоорганизация лиганда (8) и ионов серебра в решетчатую структуру  $3 \times 3$

# Диполь-дипольное взаимодействие





## Водородная связь



# Структура белков. Четыре уровня организации



Последовательность аминокислот

primary structure  
(amino acid sequence)



Конформация  
полипептидной цепи

Водородные связи

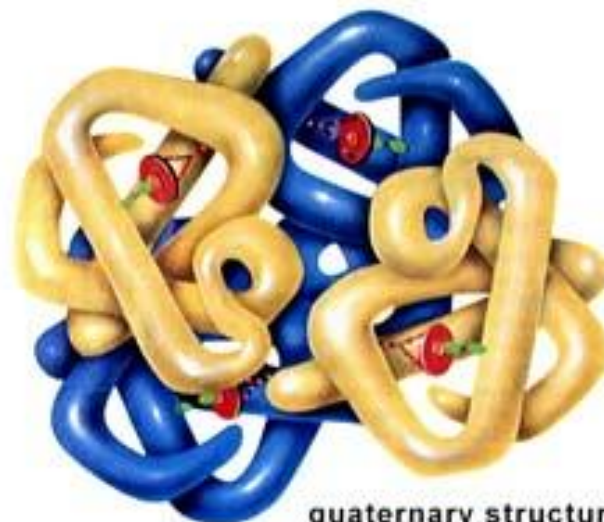
secondary structure  
( $\alpha$ -helix)



Пространственная  
упорядоченность,  
конформация  
полипептидной цепи

взаимодействия Ван-дер-Ваальса

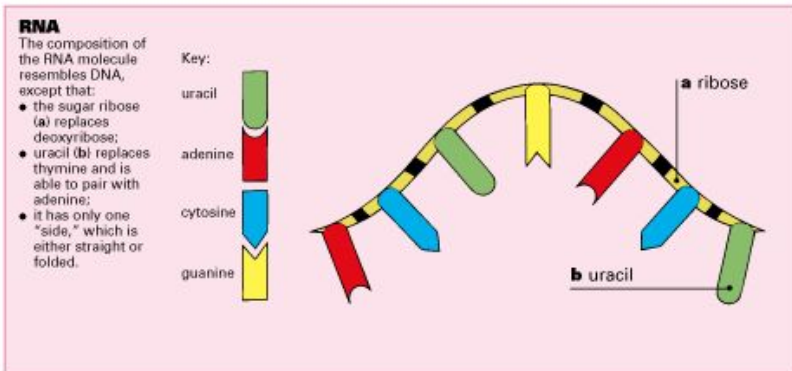
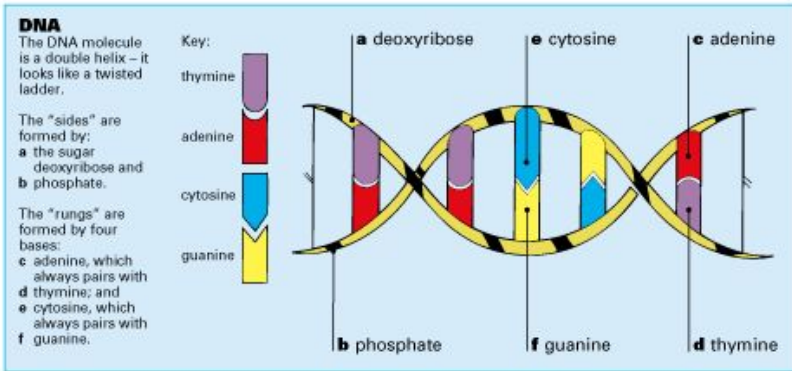
tertiary structure  
(folded individual peptide)



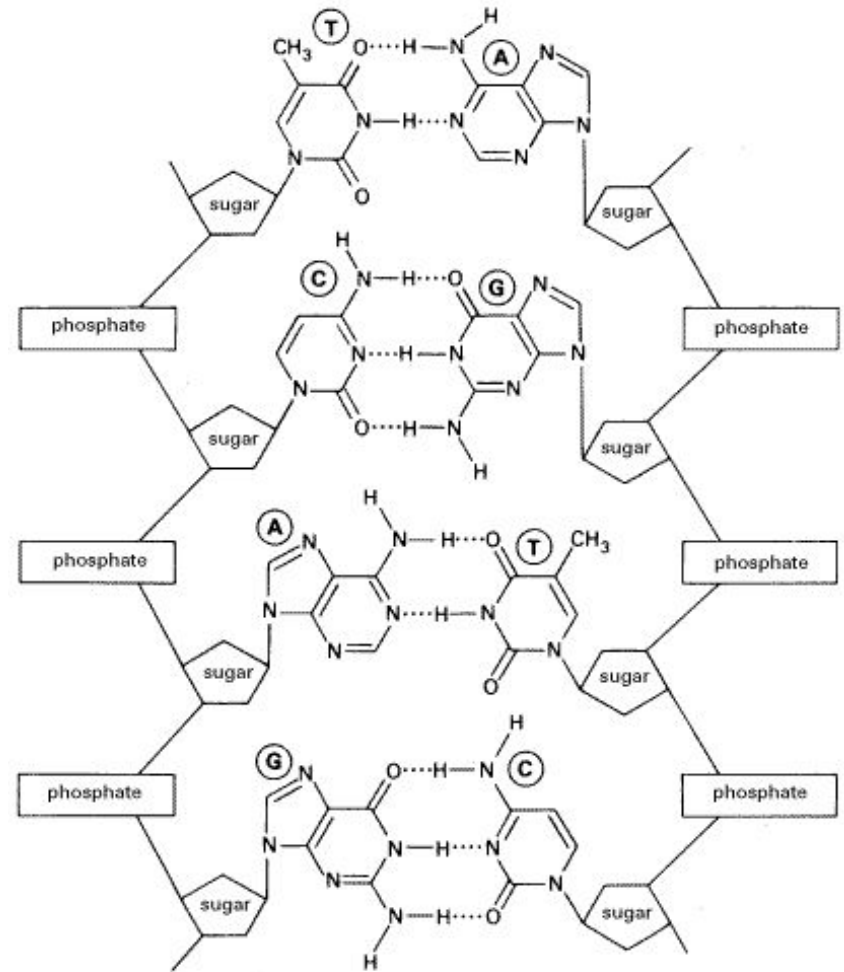
quaternary structure  
(aggregation of two or more peptides)

# ДНК и РНК

Deoxyribonucleic acid (DNA) and ribonucleic acid (RNA) are found in the nucleus (control center) of every cell.



Nucleic acid	Structure	Sugar	Complementary bases	Location
DNA	• two strands coiled into a double helix structure	deoxyribose	• adenine with thymine • cytosine with guanine	component of chromatin fibers of nucleus
RNA	• straight or folded single strand	ribose	• adenine with uracil • cytosine with guanine	component of ribosomes in cytoplasm and nucleoli in nucleus

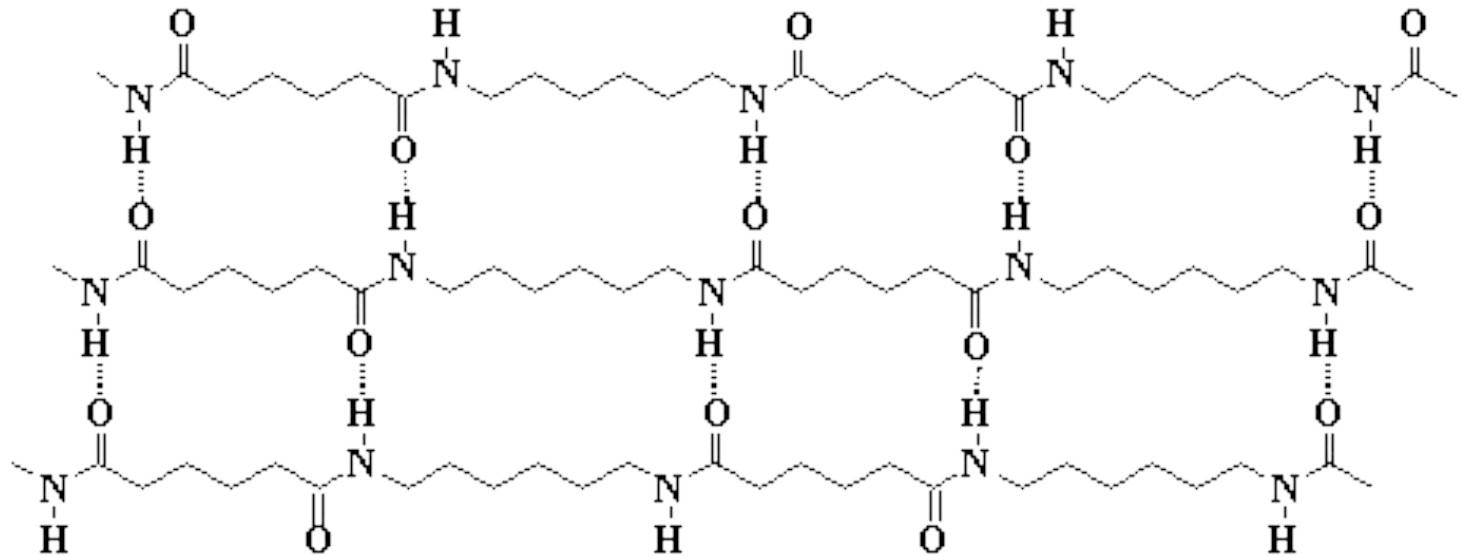
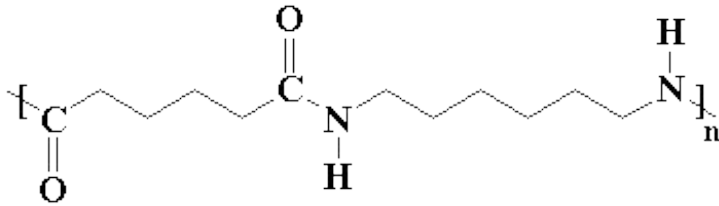


- KEY
- (A) adenine
  - (C) cytosine
  - (T) thymine
  - (G) guanine

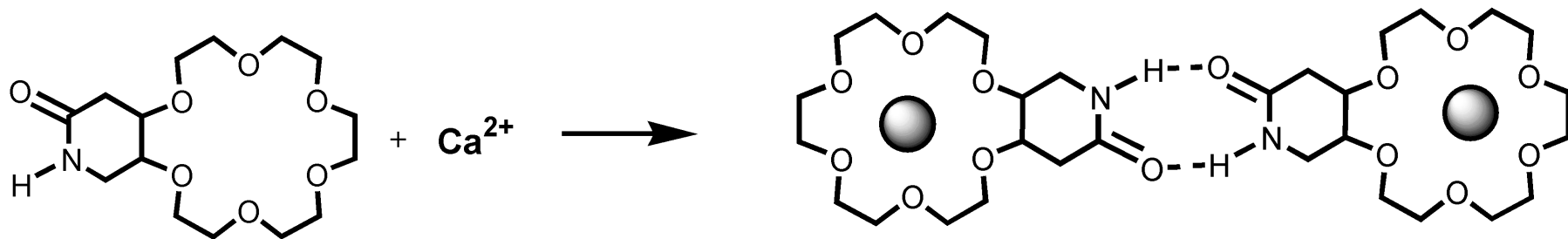
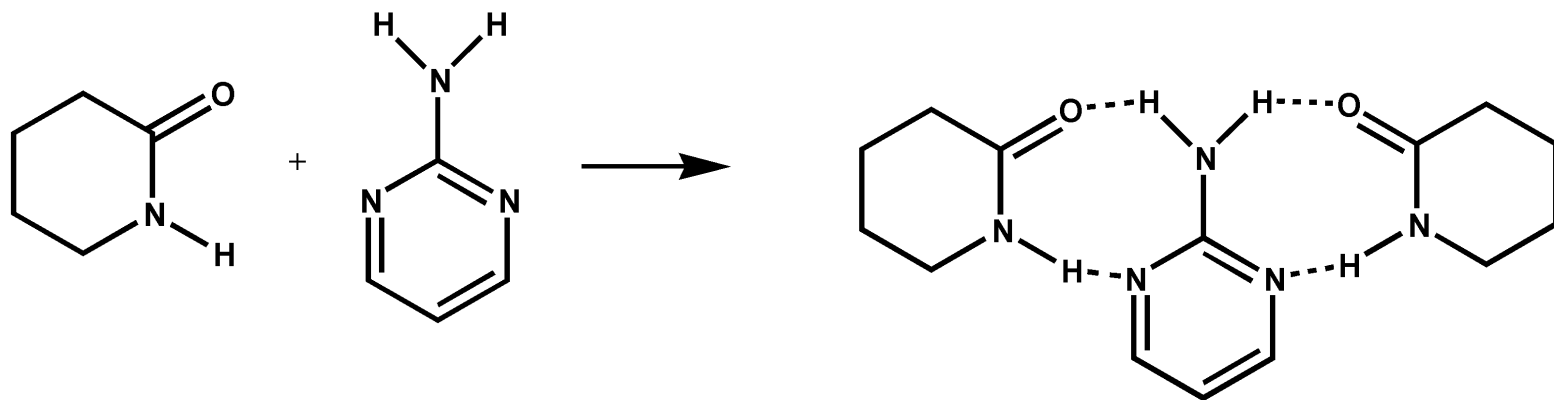
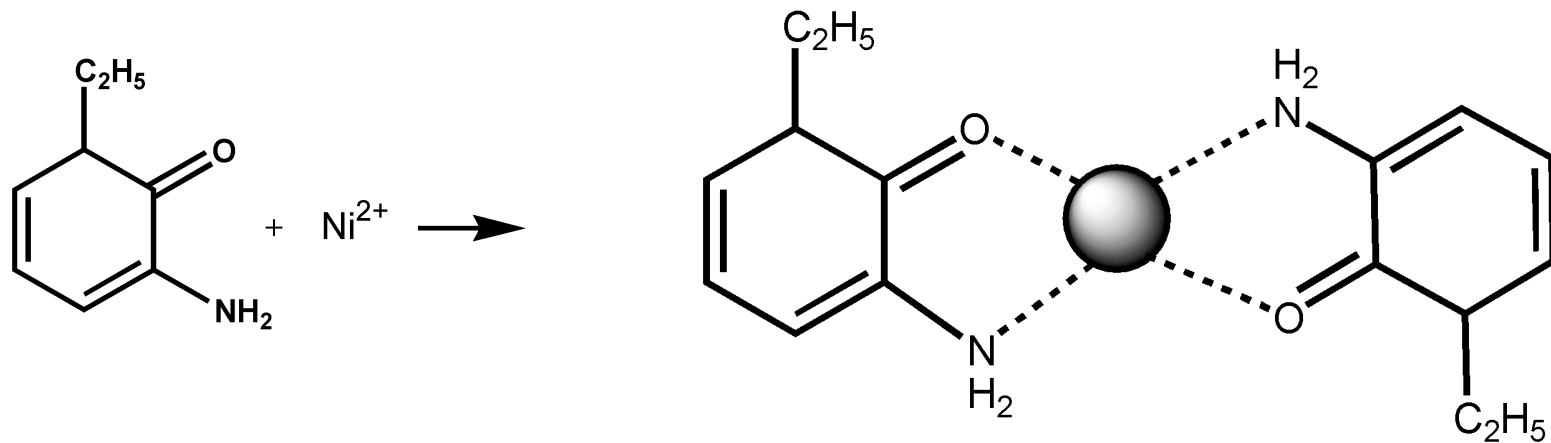
Part of the structure of DNA showing hydrogen bonding (dotted lines) between complementary bases

DNA

# Полимеры



In nylon 6,6, the carbonyl oxygens and amide hydrogens can hydrogen bond with each other. This allows the chains to line up in an orderly fashion to form fibers.



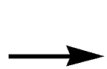
Методы классической органической химии для получения молекул-рецепторов

## Анализ структуры и функционирования супрамолекулярных систем

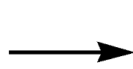
Определение температуры плавления, элементный анализ

**Рентгеноструктурный анализ супрамолекулярных систем.**

Рентгеновские  
лучи



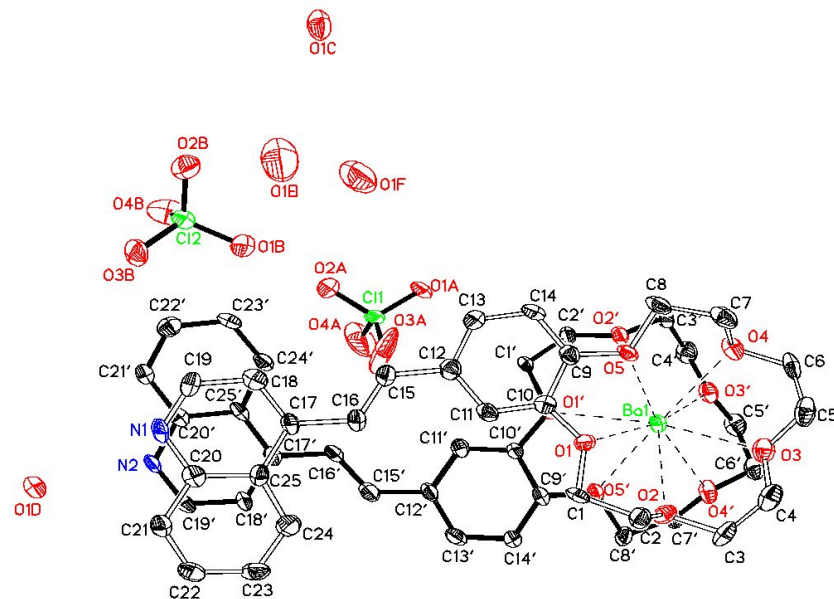
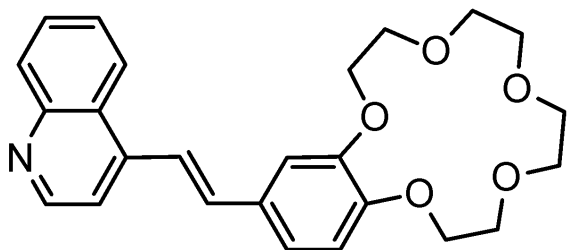
Кристалл



Дифракционная  
картина

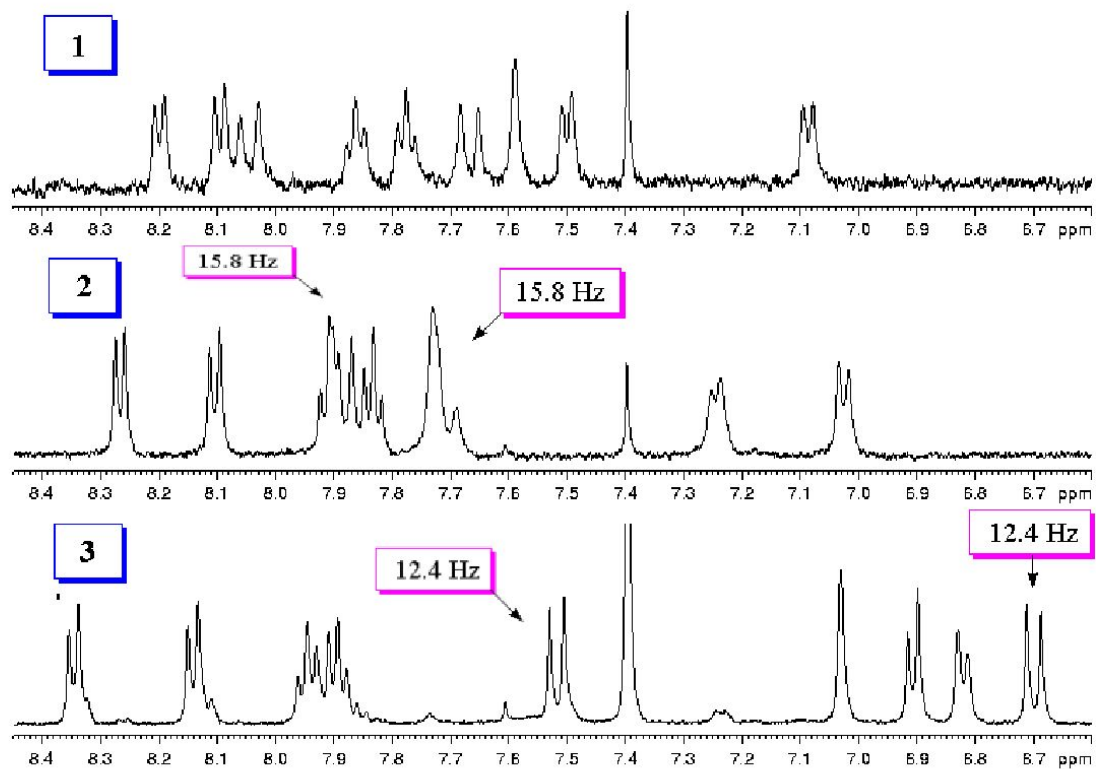
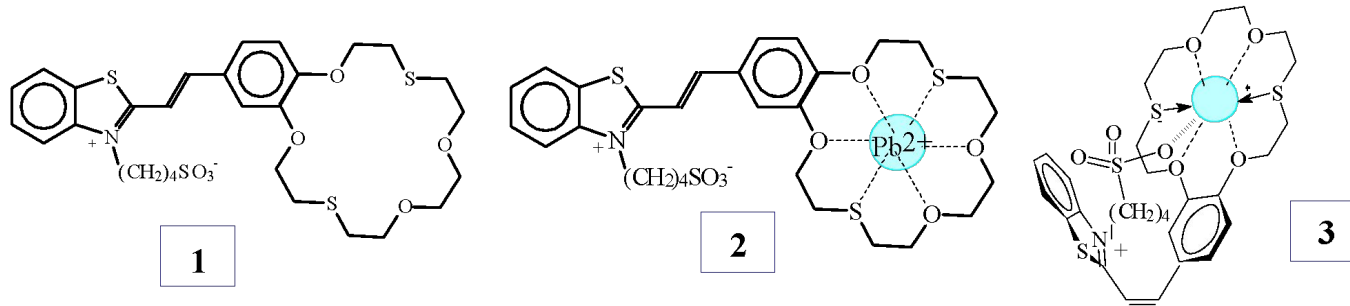


Кристаллическая  
структура

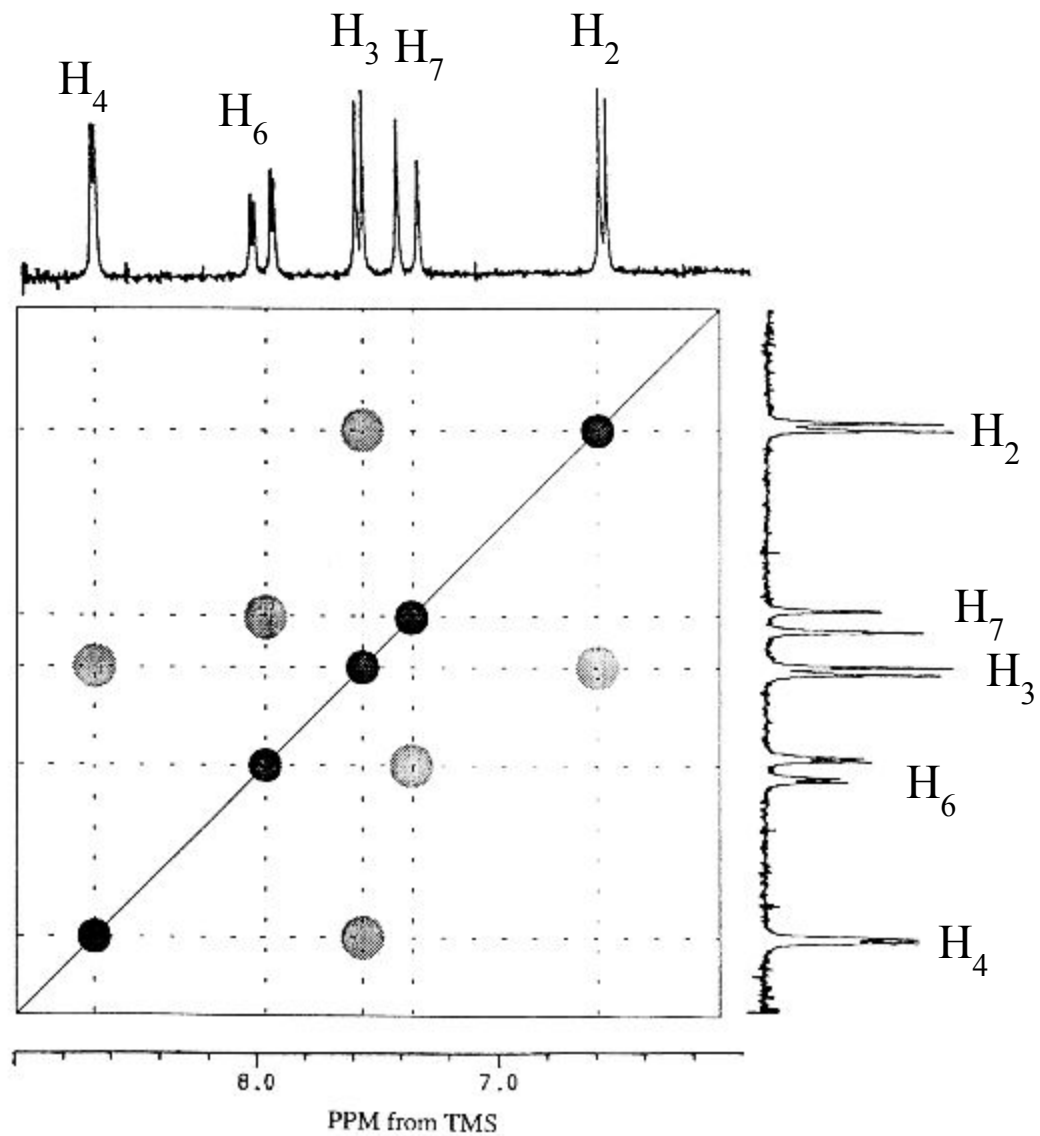
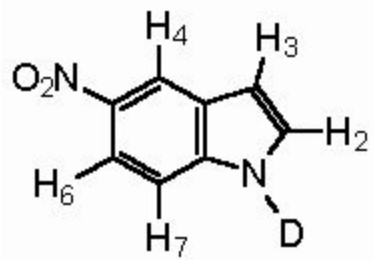


**«СТЭКИНГ»-ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ  
координационное взаимодействие**

# Метод ЯМР-спектроскопии

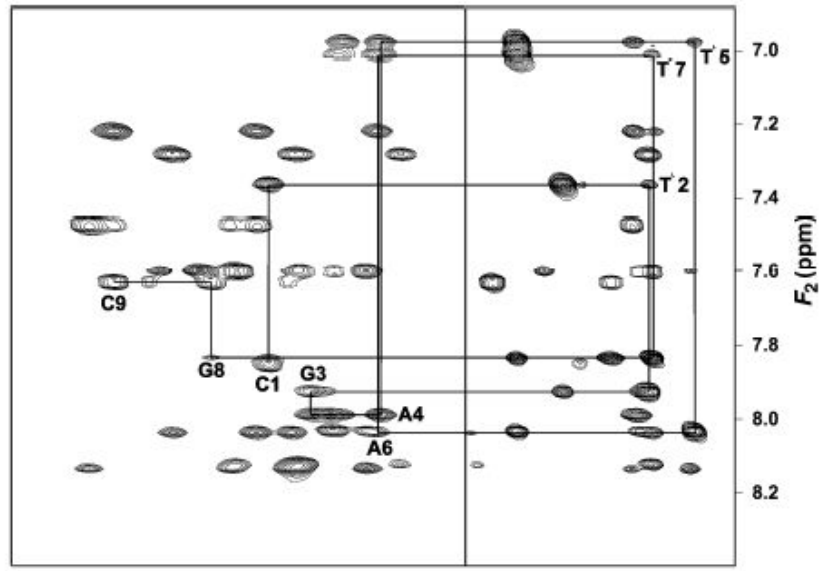


# COSY спектроскопия



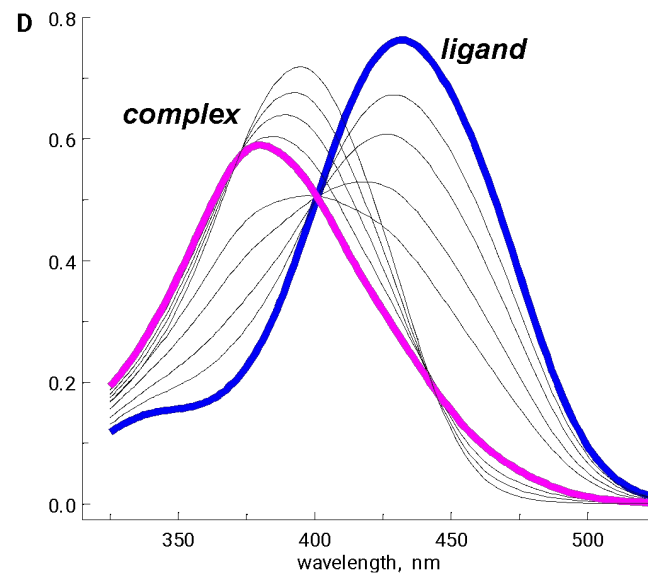
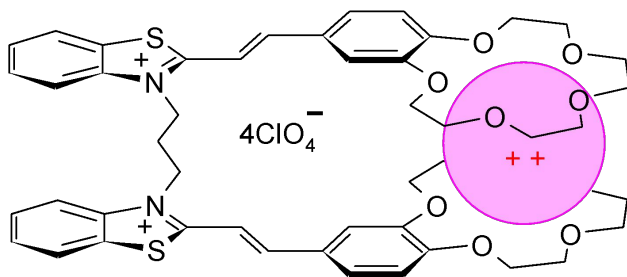
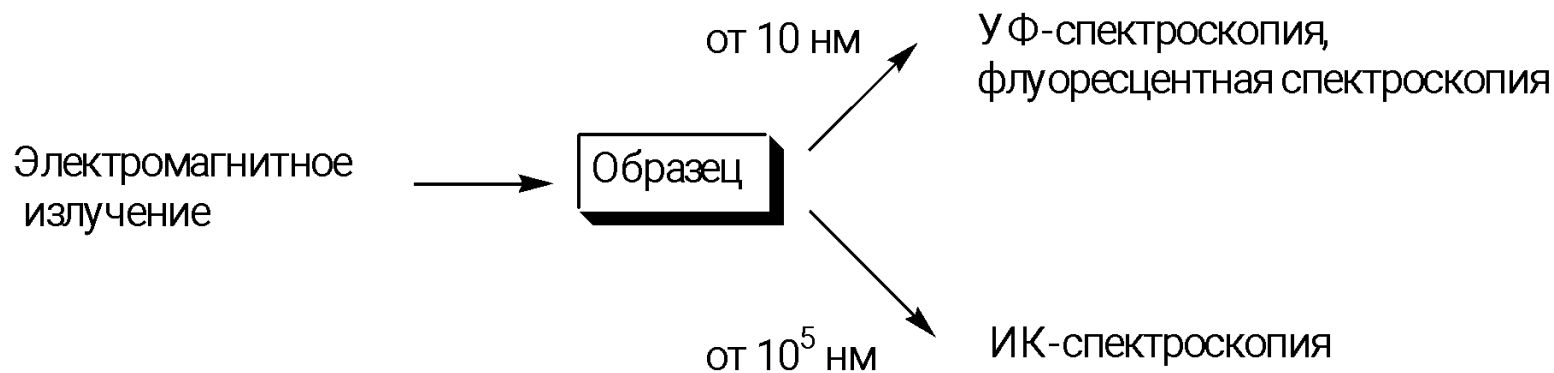


LNA:DNA



# Молекулярная спектроскопия

Длина волны



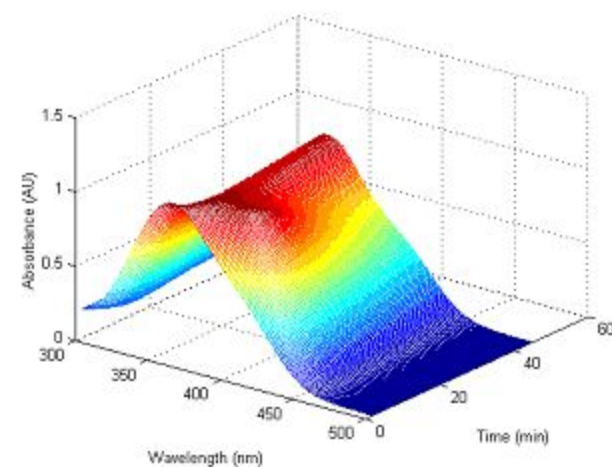
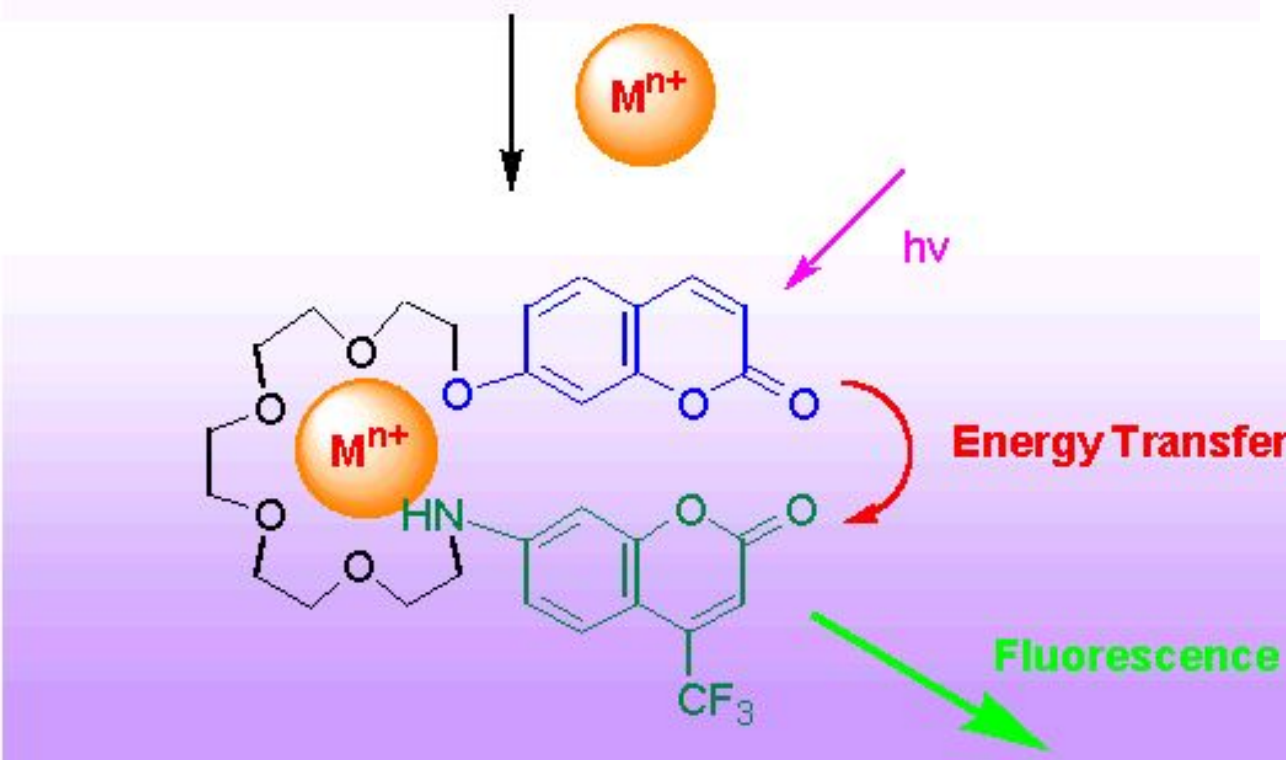
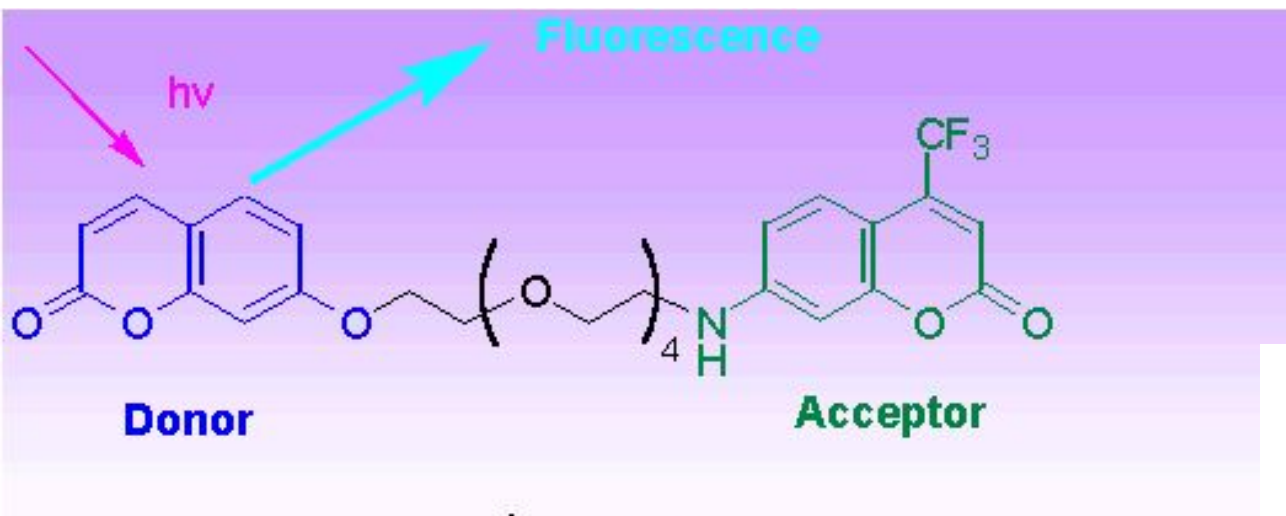
Спектральные измерения



Анализ изменений с использованием компьютерных программ

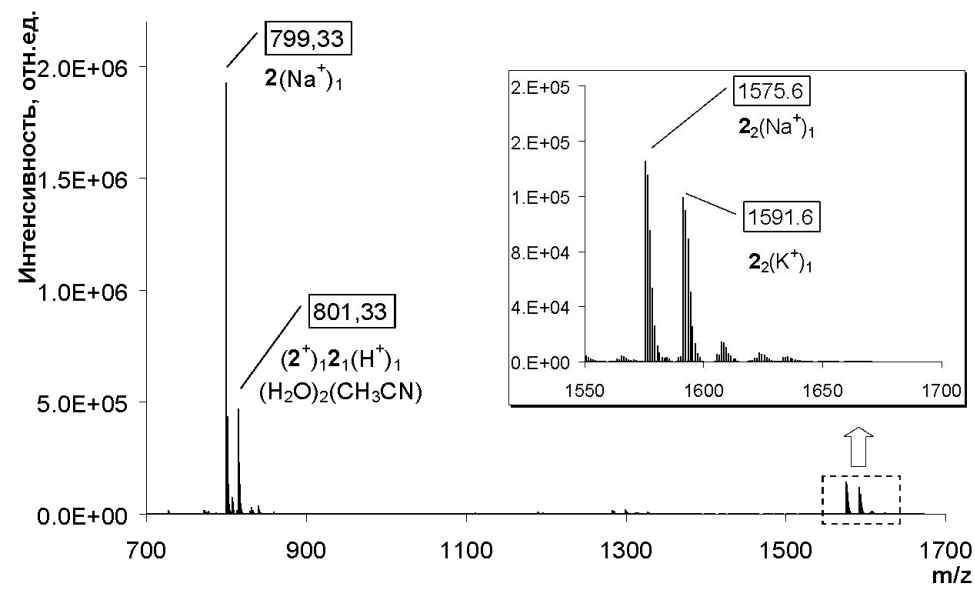


Данные о составе и устойчивости комплексов

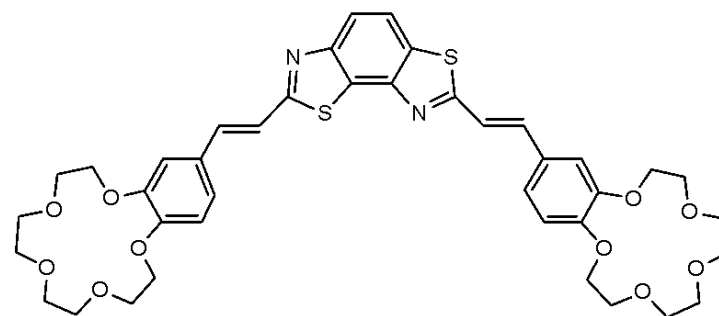


# Масс-спектрометрия

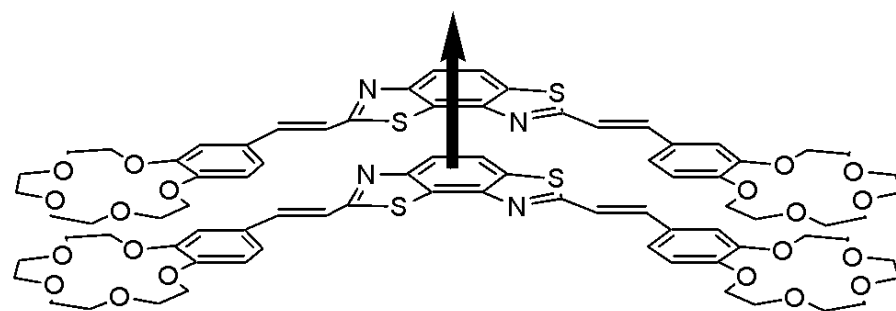
## Электроспрей-анализ (метод ЭРИАД)



Мономер



Димер



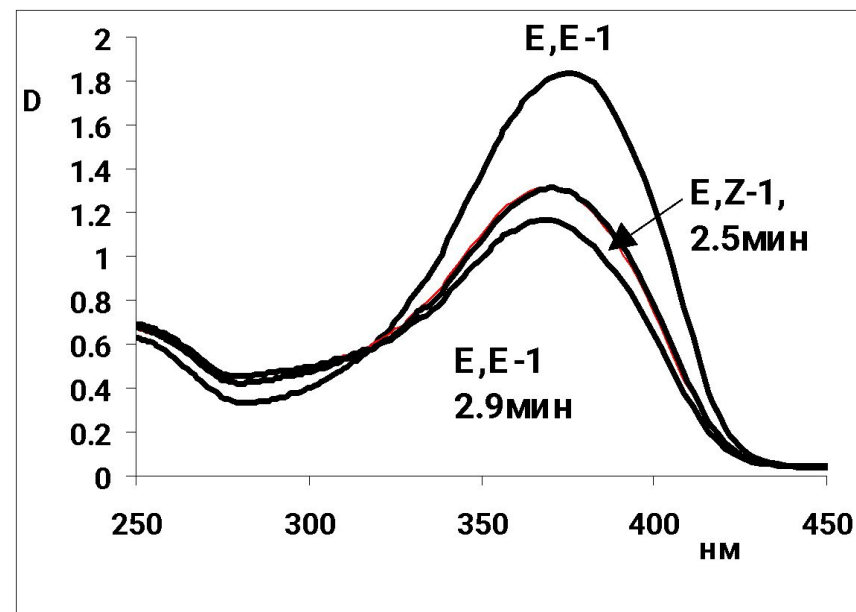
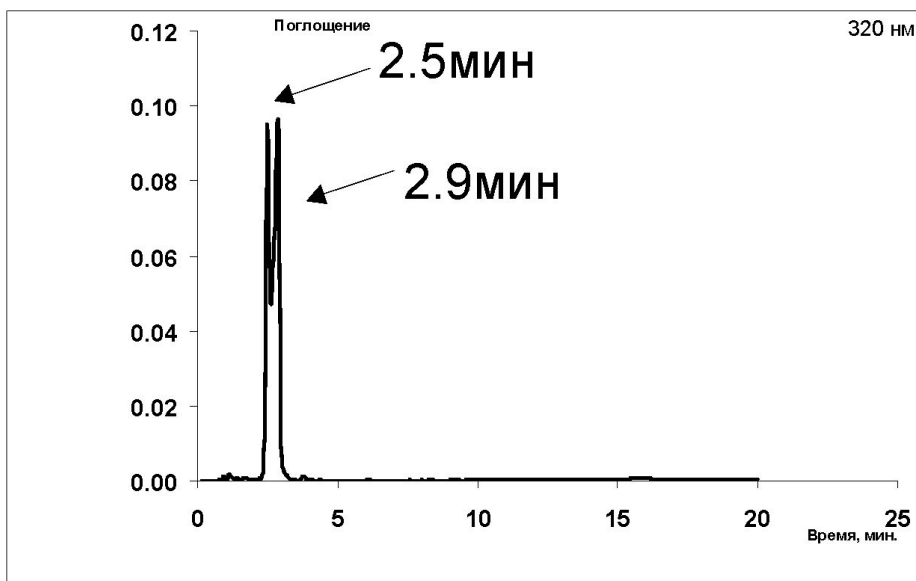
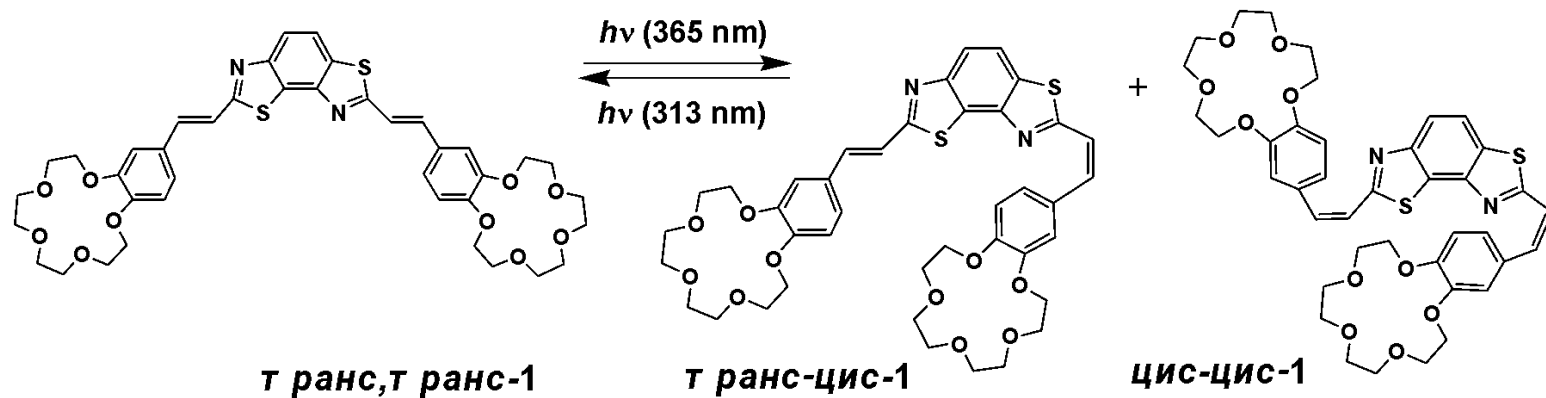
## **Электрохимические методы исследования**

Кондуктометрия (измерение электропроводности раствора)

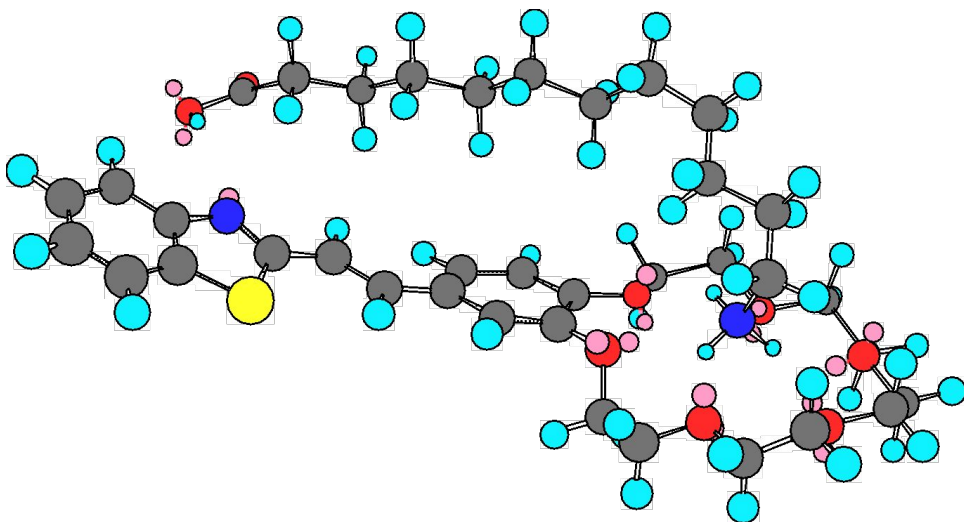
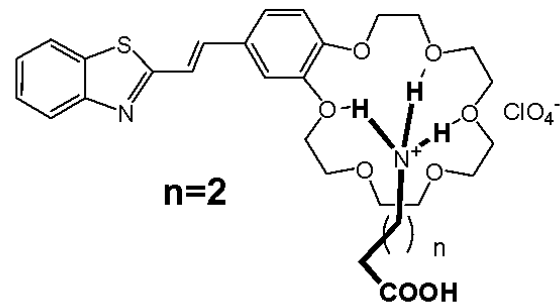
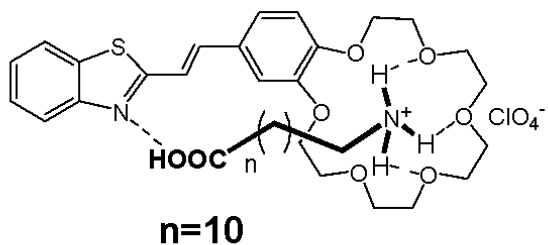
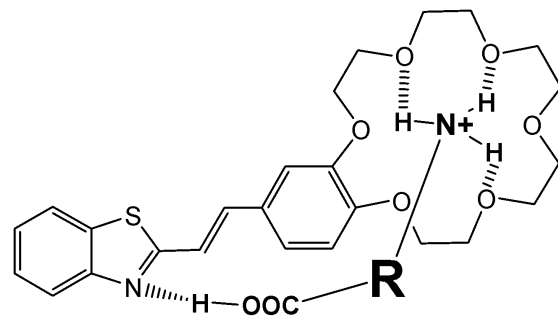
Полярография (измерение силы тока от приложенного напряжения раствора)

Потенциометрия (измерение окислительно-восстановительного потенциала раствора)

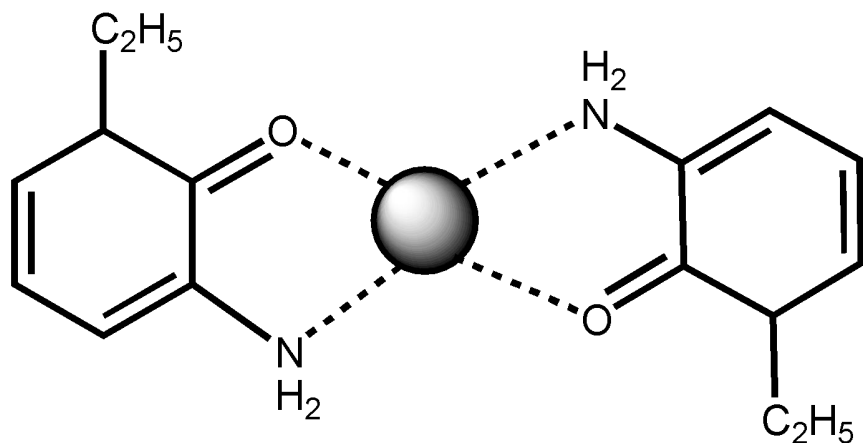
# ВЭЖХ: анализ состава и выделение соединений



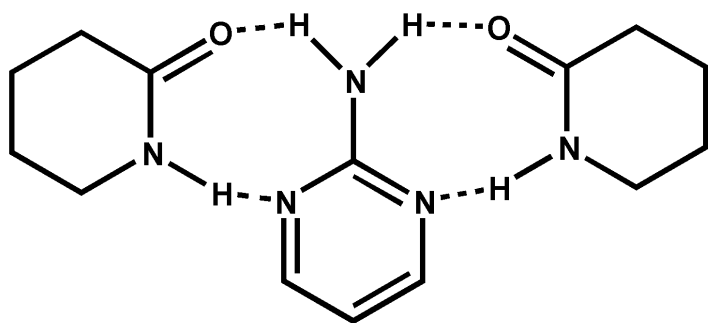
# Расчетные методы



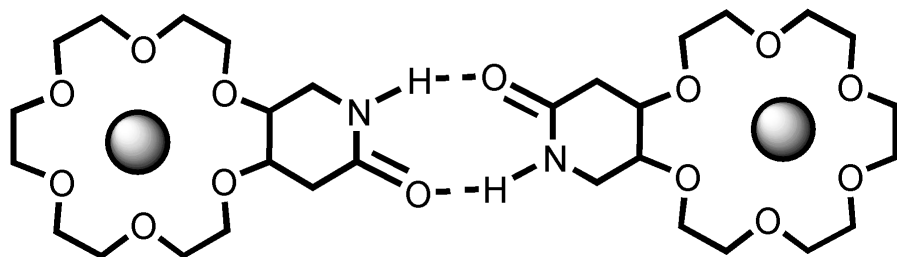
Hyperchem, MM2



**ЯМР-спектроскопия**  
**Масс-спектрометрия**  
**УФ-спектроскопия**  
**Электрохимические методы**  
**РСА**



**ЯМР-спектроскопия**  
**Масс-спектрометрия**  
**УФ-спектроскопия**  
**РСА**



**ЯМР-спектроскопия**  
**Масс-спектрометрия**  
**РСА**