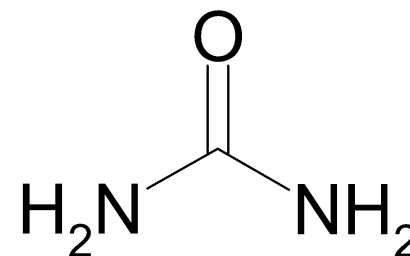


Химия молекулярная :

создание новых молекул за счет образования ковалентных, ионных связей;

создание новых материалов (полимеры, кристаллы).



АТОМЫ

Êî âàëäí òí û ä ñâÿçè



Ì î ëäêóëû

Биоорганическая химия :

межмолекулярные слабые нековалентные взаимодействия
(водородные связи, ван-дер-ваальсовы силы, электростатические взаимодействия и т.п.)

Высокоспецифические процессы:
распознавания, реагирования, транспорт, регуляция.

Протекающие в биологических системах процессы:
связывание субстрата с белком-рецептором,
ферментативные реакции,
иммунологическая ассоциация антиген-антитело,
распознавание на клеточном уровне и т.д.

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, катализа.

Химия супрамолекулярная:

ансамбли органических молекул,

отличающиеся по свойствам от исходных составляющих молекул;

объединяет органическую химию, биохимию и физическую химию;

является самостоятельной ветвью развития органической химии;

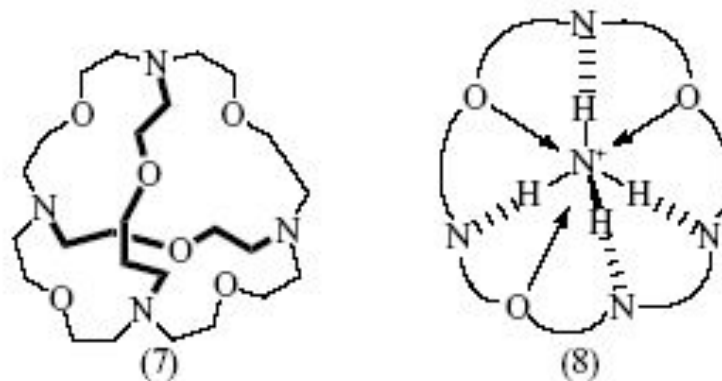
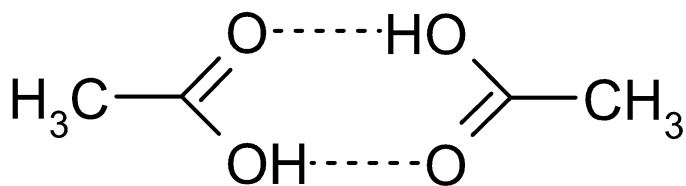
возникновение новой области органической химии возможно благодаря:

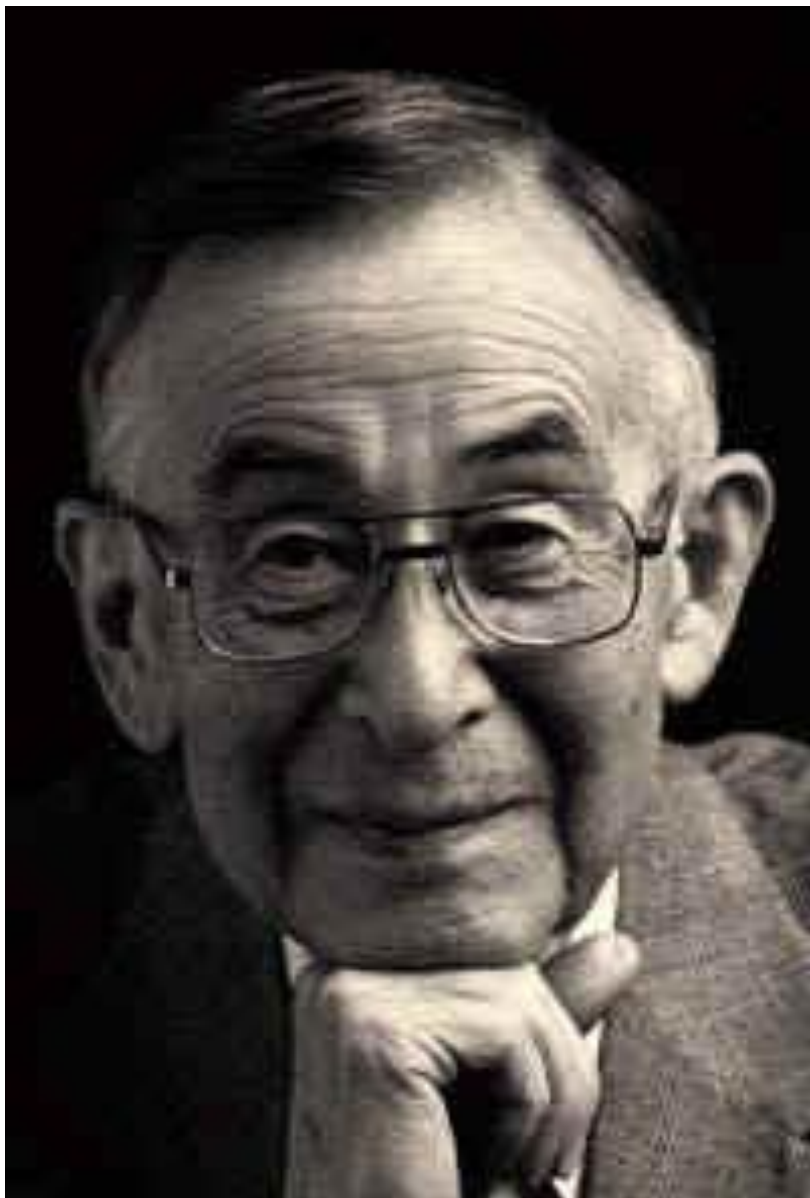
а) высокому развитию органического синтеза,

б) открытию законов, управляющих биологическими процессами,

в) развитию координационной химии,

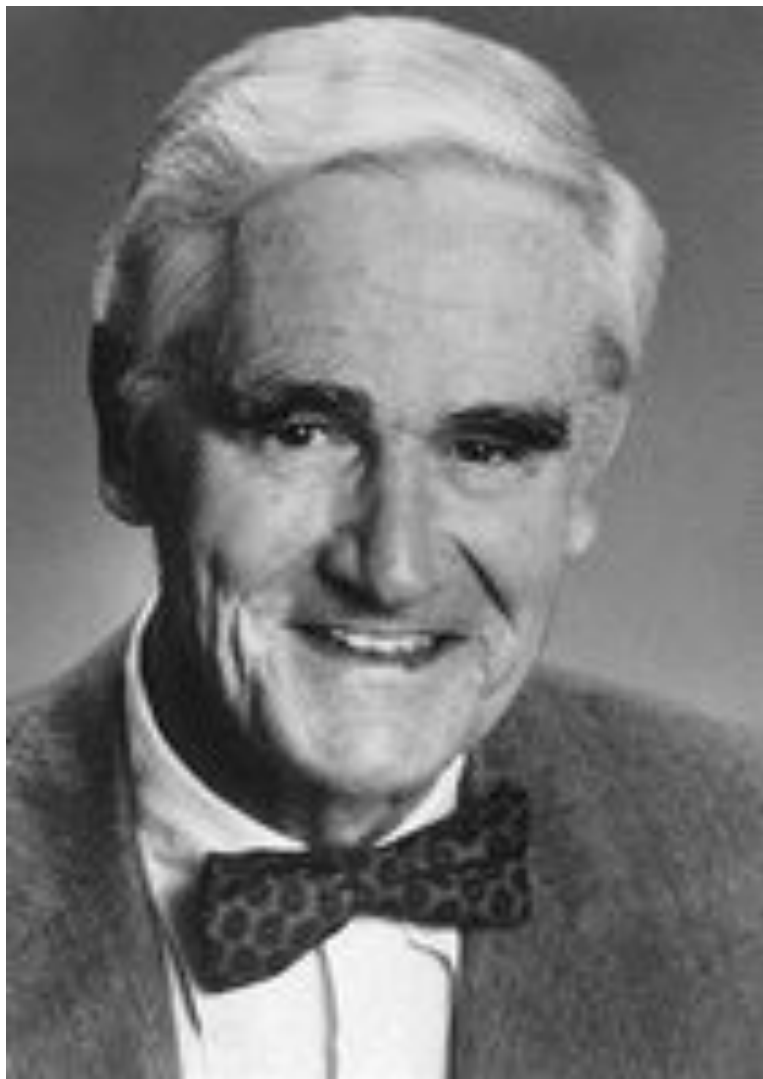
г) развитие современных методов исследования структуры и свойств соединений (ИК-, УФ-, ЯМР-спектроскопии, масс-спектрометрии, рентгеноструктурный анализ, квантово-химические методы расчета и др.)





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

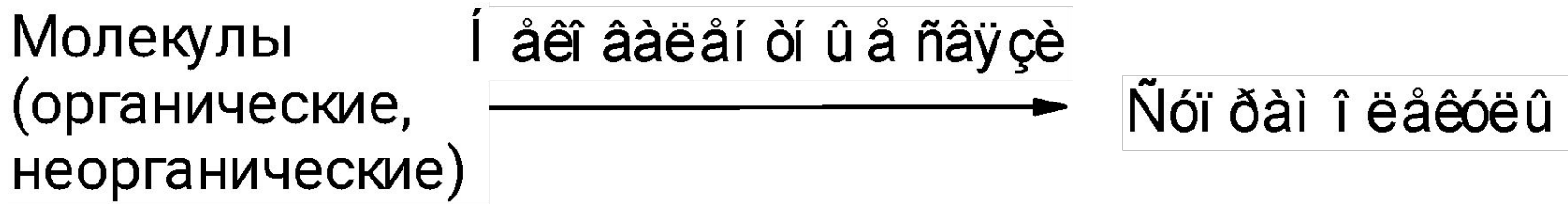


Donald J. Cram



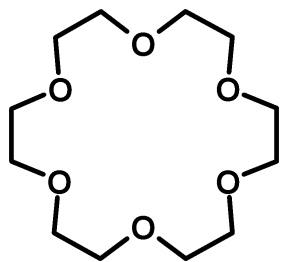
Jean-Marie Lehn

Понятия супрамолекулярной химии

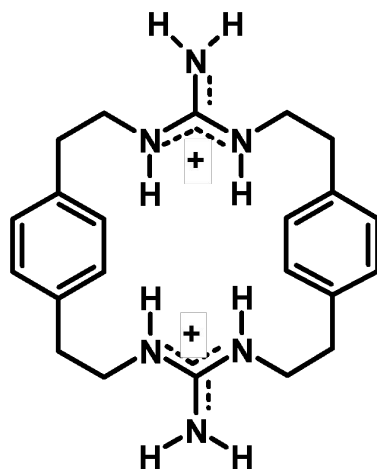


Понятия супрамолекулярной химии

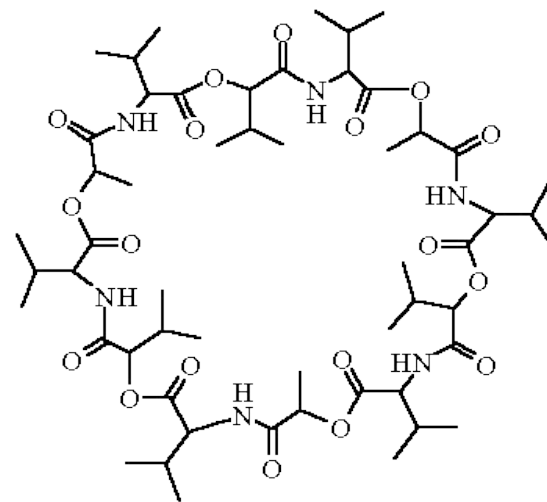
Рецептор (или лиганд) + субстрат - реагирующие частицы;



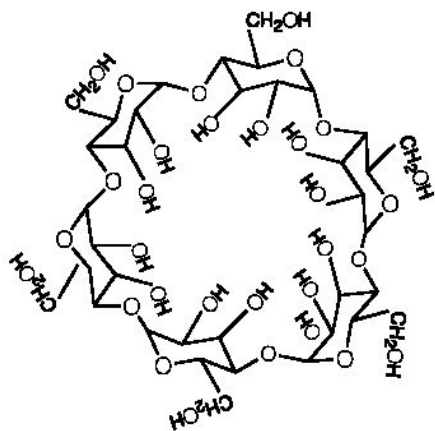
Краун-эфир



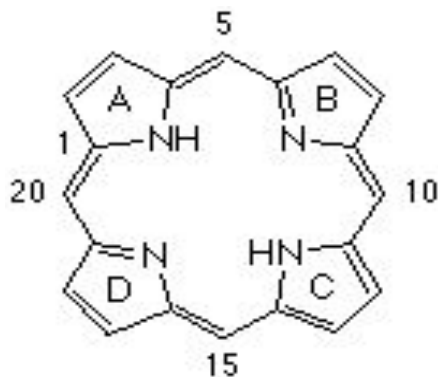
Циклический полиамин



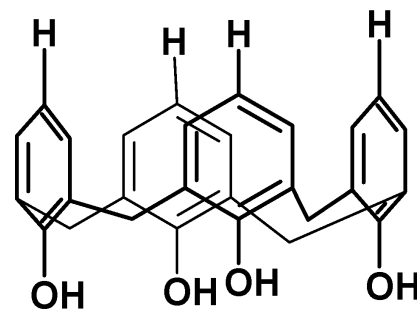
Валиномицин



1
 α -циклодекстрин



Porphyrin



Каликсарен

Понятия супрамолекулярной химии

Рецептор (или лиганд) + субстрат - реагирующие частицы;

Катионы металлов,

Катионы аммония,

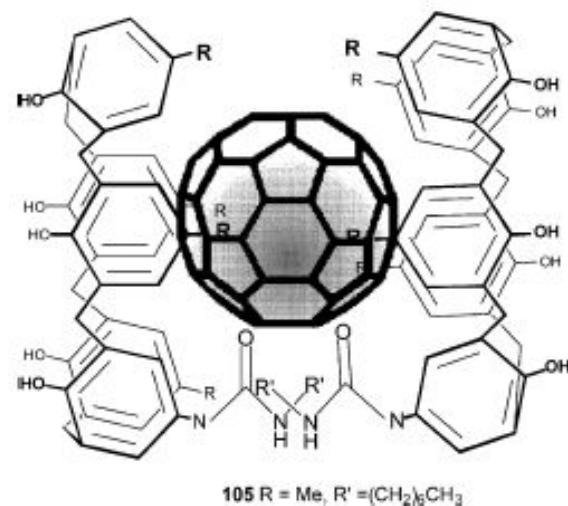
Органические молекулы,

Полимеры, содержащие определенные функциональные группы,

Биоорганические молекулы

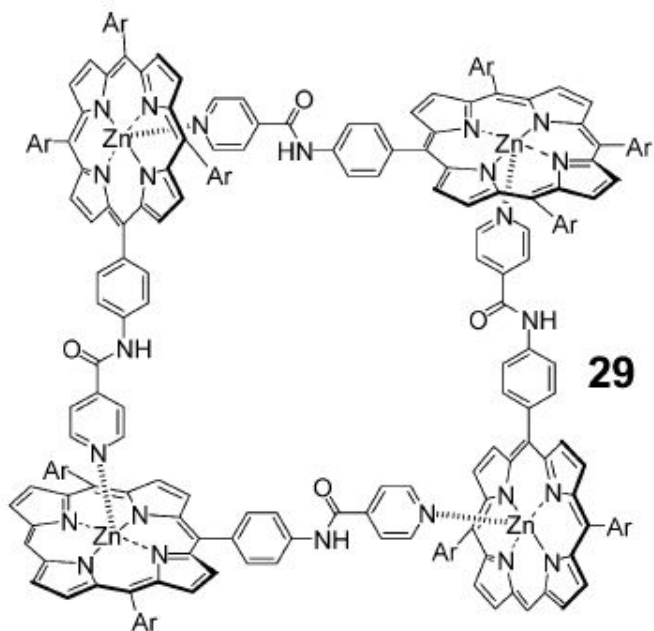
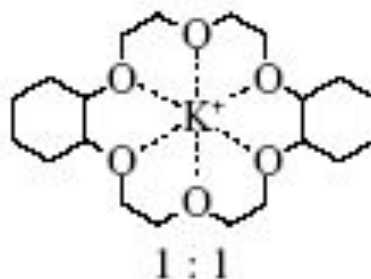
Table 4. Binding Constants of Nitrophenols and Nitrophenolates with α -Cyclodextrin²³⁰

Substrate	K_{11}/M^{-1}	Substrate	K_{11}/M^{-1}
	190		0
	2130		26
	60		0
	1180		0



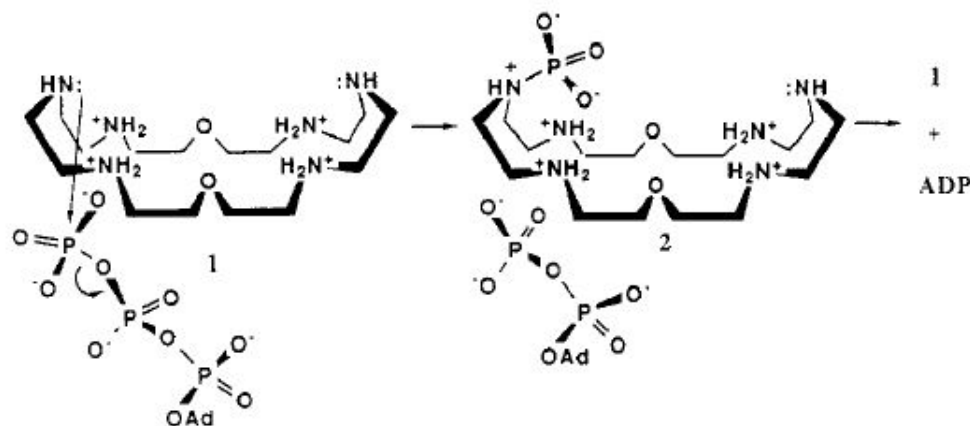
Понятия супрамолекулярной химии

Самоорганизация, самоассоциация - процессы образования супрамолекул



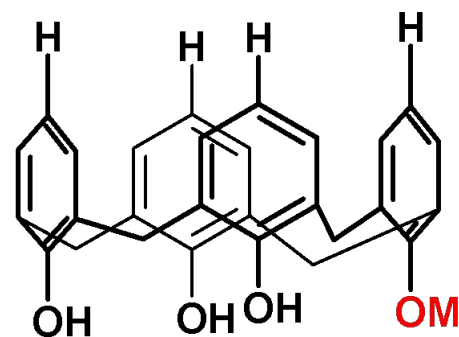
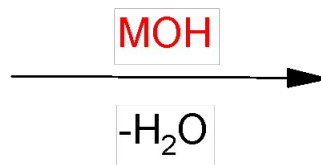
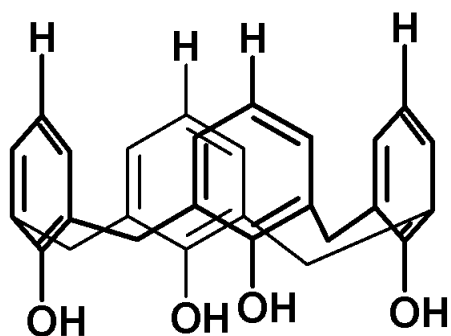
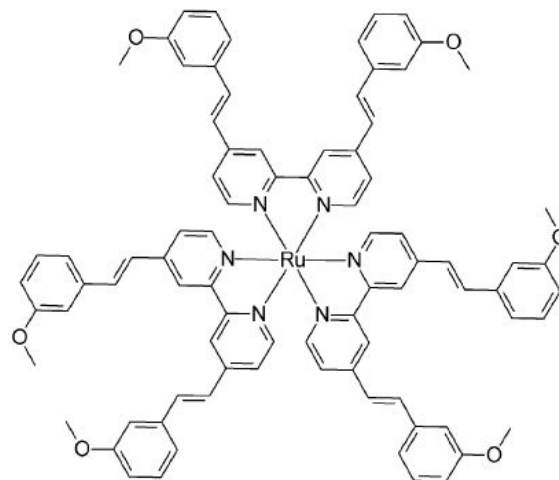
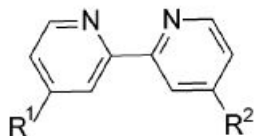
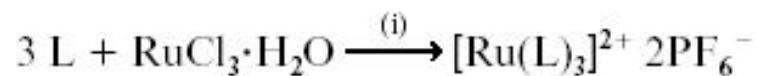
$K = 9 \times 10^{12} \text{ M}^{-3}$ in CH_2Cl_2 , UV-vis/NMR

Scheme I



Понятия супрамолекулярной химии

Самоорганизация, самоассоциация - процессы образования супрамолекул;



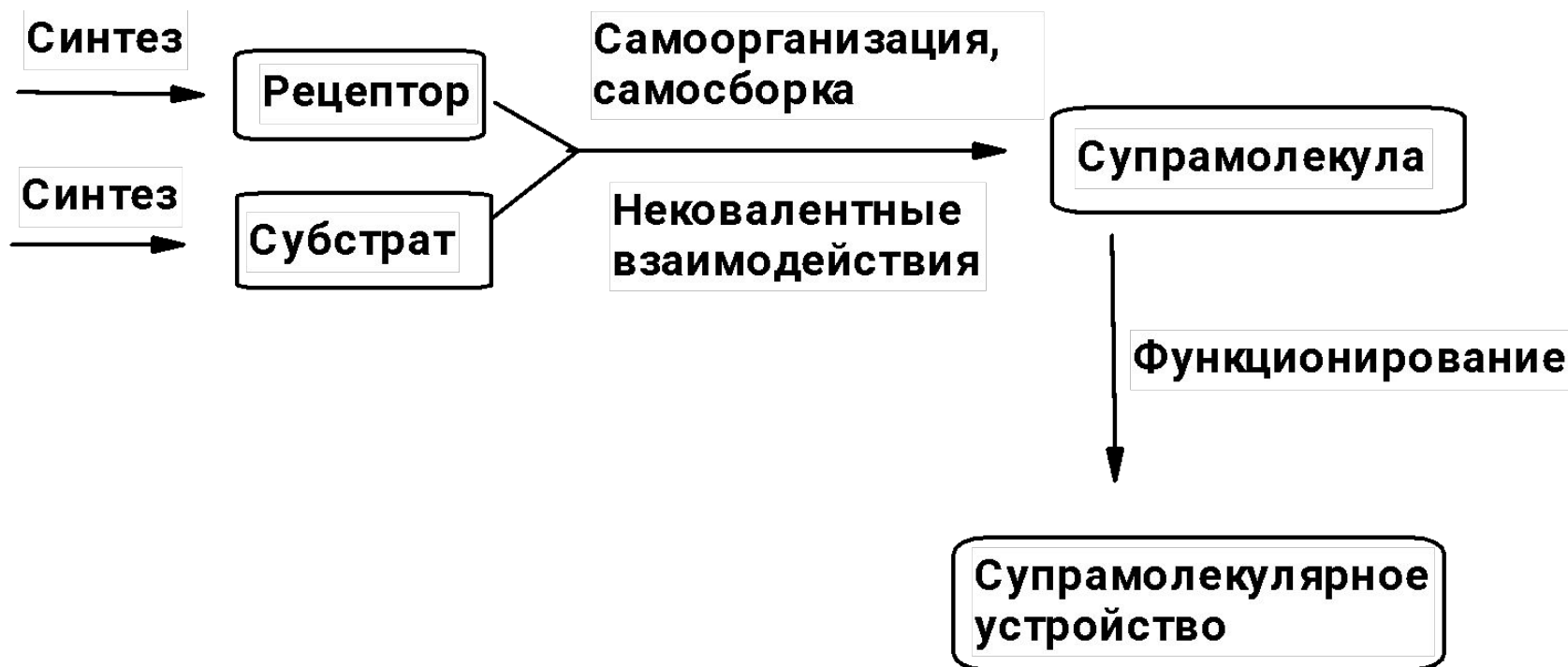
AKIOM

Понятия супрамолекулярной химии

Соединения включения, комплексы, ассоциаты, клатраты, соединения типа гость-хозяин, супрамолекулярные ансамбли - супрамолекулы, продукты ассоциации молекул;

Молекулярное распознавание (селективное связывание);
превращение (протекание превращений, типичных только для
данной супрамолекулы);
перенос (транспорт);
катализ;
функции супрамолекул

Супрамолекулярная химия



За счет каких сил происходит связывание молекул в ансамбли?

C-C 347 кДж моль⁻¹

C=C 607 кДж моль⁻¹

Как проявляются межмолекулярные связи:

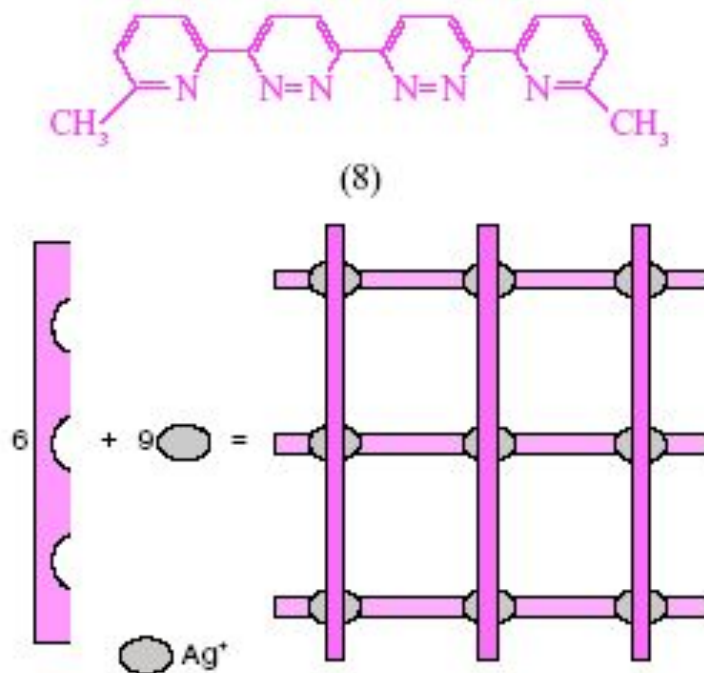
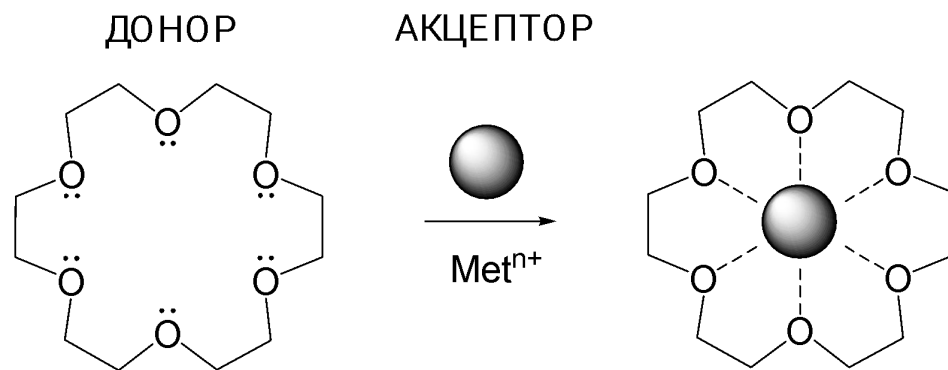
увеличением температуры плавления или кипения агрегата по сравнению с исходной молекулой, поскольку необходимо потратить энергию на разрушение связи

Координационная связь (донорно-акцепторная) 50-70 кДж моль⁻¹

Доноры электронной пары: O, N, S, P, C=C

Акцепторы электронов: катионы металлов, протоны, переходные металлы

Координационная связь



Пиридин Пиридазин (1,2-дiazин)

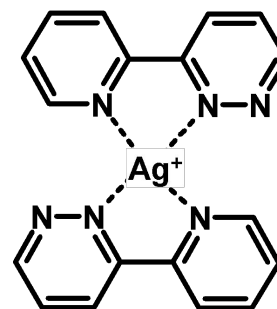
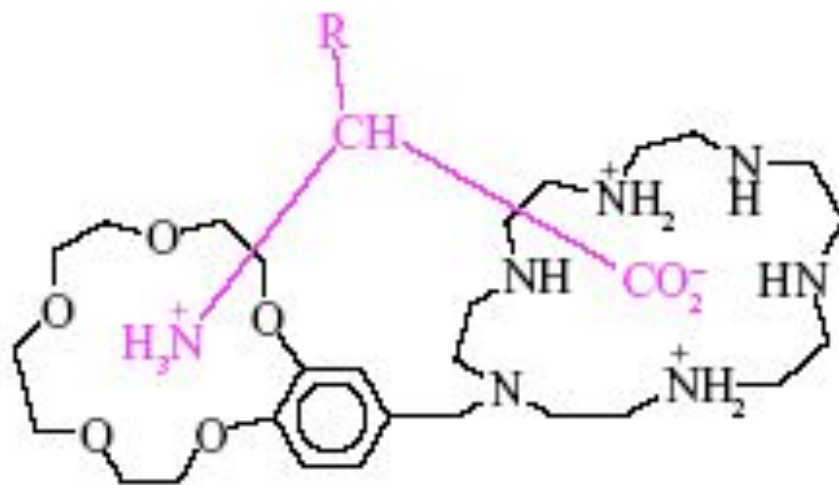
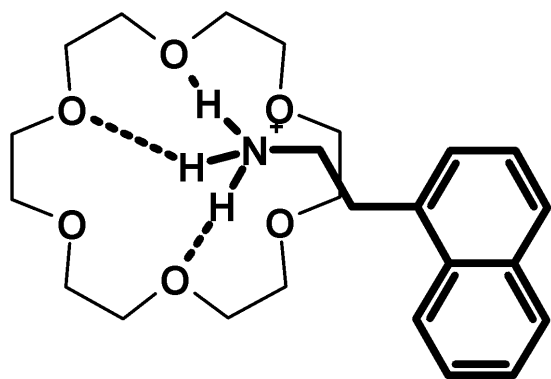
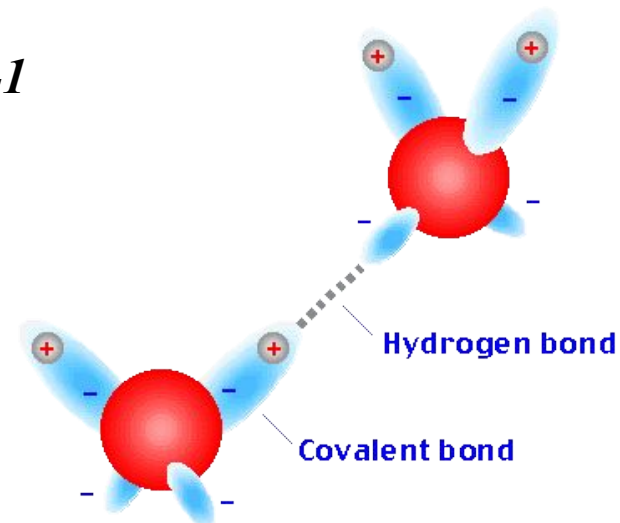
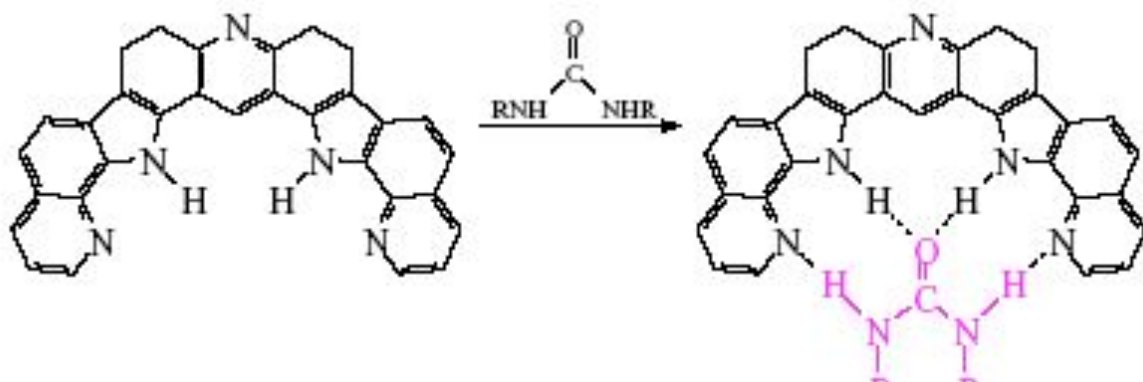
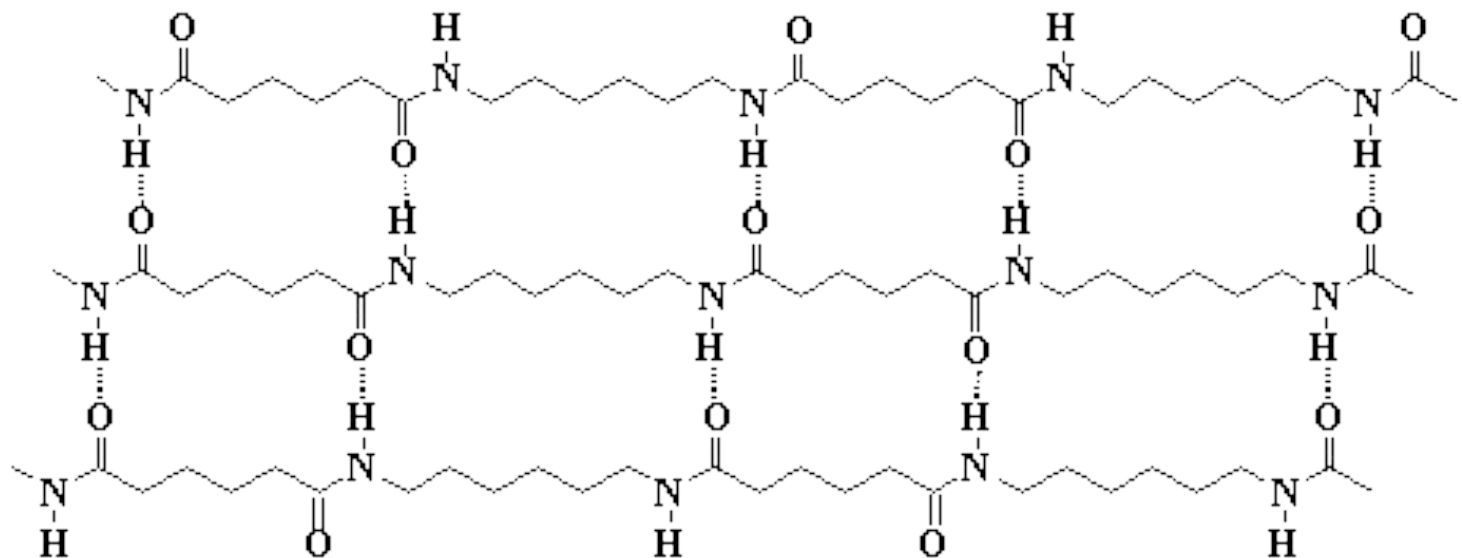
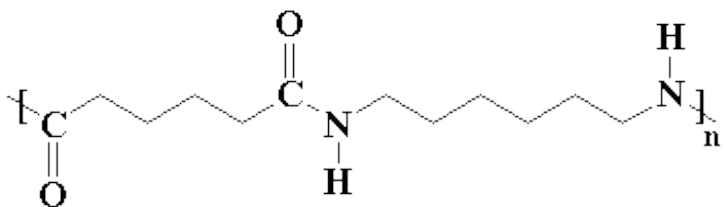


Рис. 4. Самоорганизация лиганда (8) и ионов серебра в решетчатую структуру 3×3

Водородная связь $10\text{-}25 \text{ кДж моль}^{-1}$



Полимеры

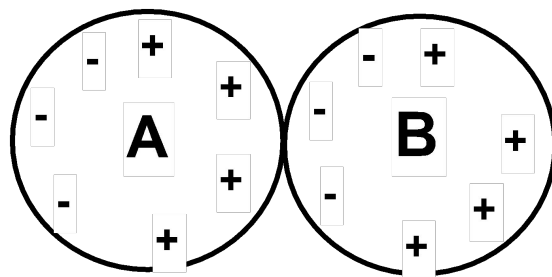


In nylon 6,6, the carbonyl oxygens and amide hydrogens can hydrogen bond with each other. This allows the chains to line up in an orderly fashion to form fibers.

Силы Ван-дер-Ваальса $15-20 \text{ кДж моль}^{-1}$:

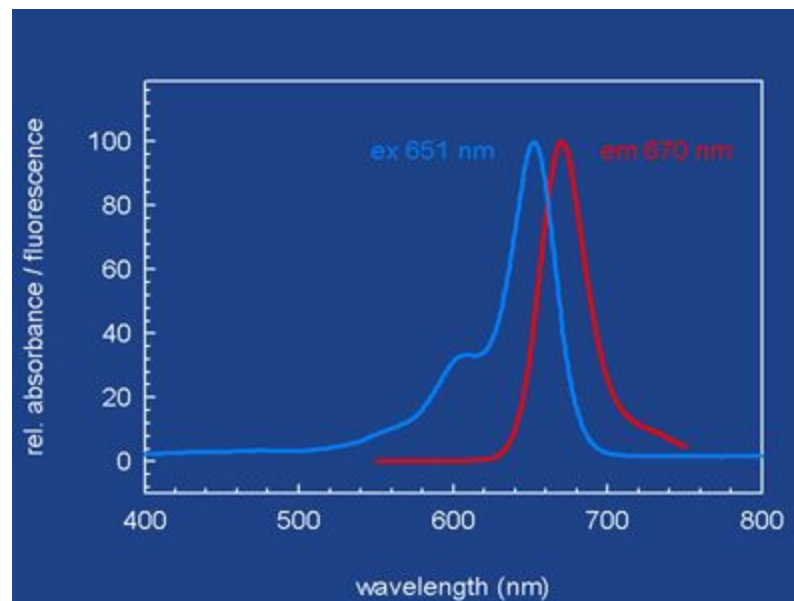
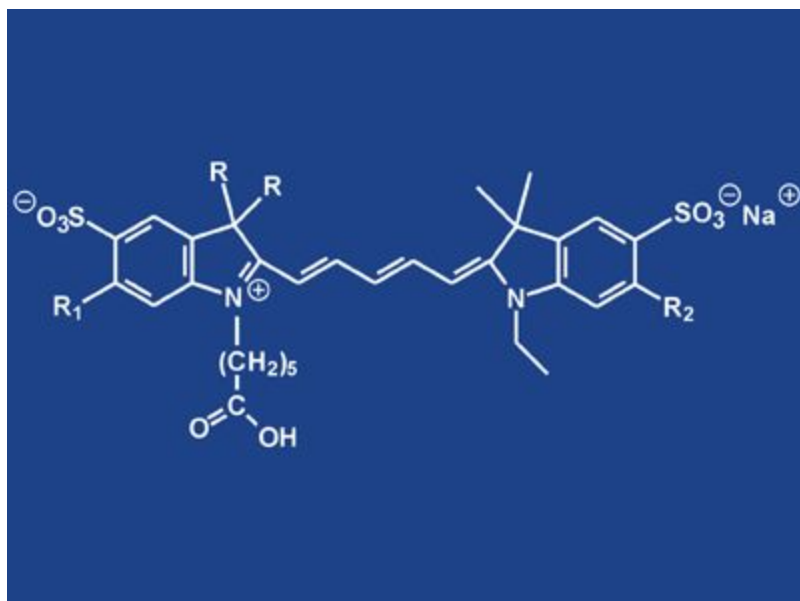
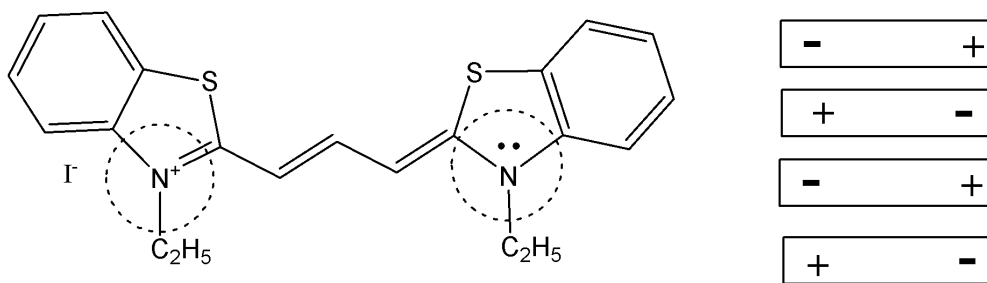
Взаимодействие между нейтральными молекулами - дисперсионные или лондовские силы.

нейтральная молекула $\rightarrow$ индуцированная поляризация $\rightarrow$ взаимодействие с другой молекулой

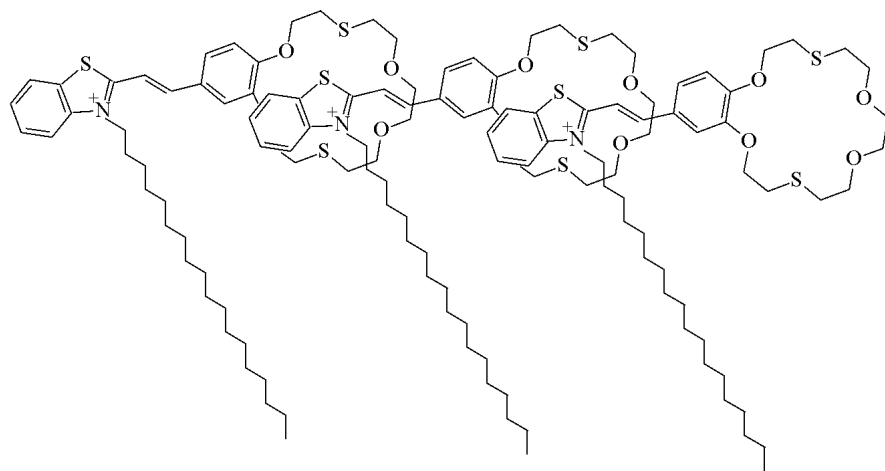
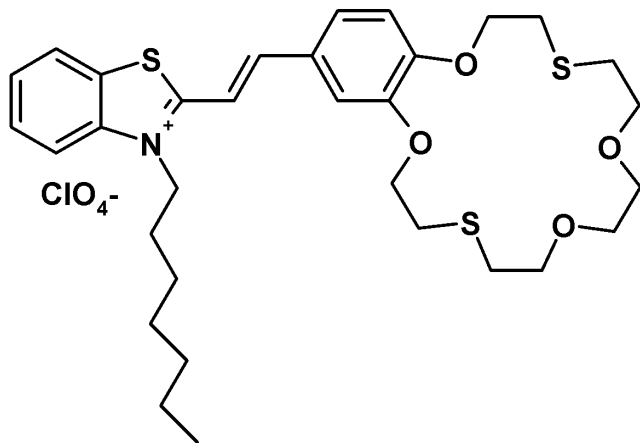


Полиэтилен - прочный материал, полимерные нити выстраиваются в пространстве рядом с друг другом, вследствие чего возникают сильные ван-дер-ваальсовы взаимодействия.

Диполь-дипольное взаимодействие

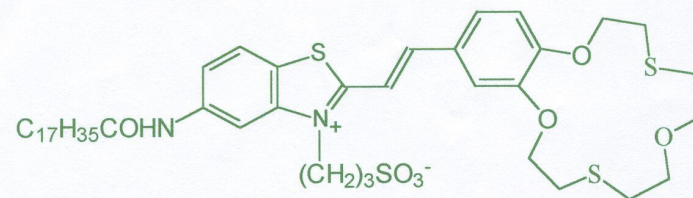


Стэкинг- взаимодействие

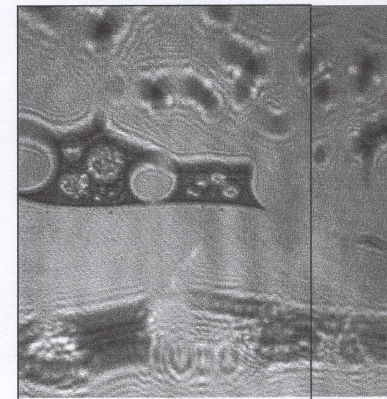


Amphiphilic benzothiacrown ethers

ABTC



Brewster Angle Microscopy micrographs of ABTC monolayer on water (1) and 1mM solution of $\text{Hg}(\text{ClO}_4)_2$ (2)

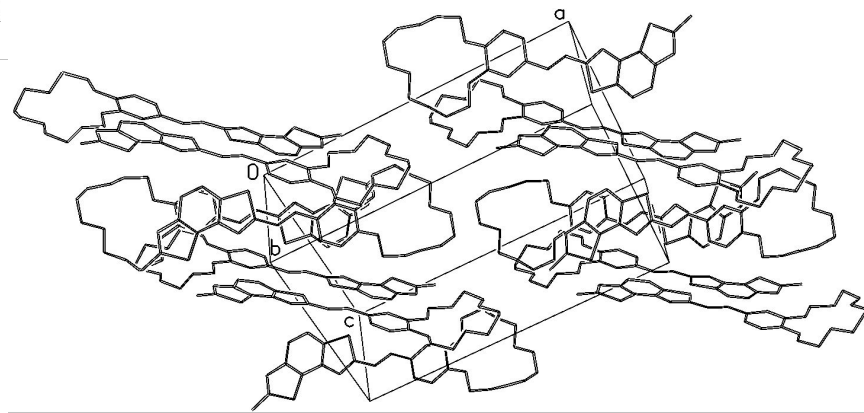
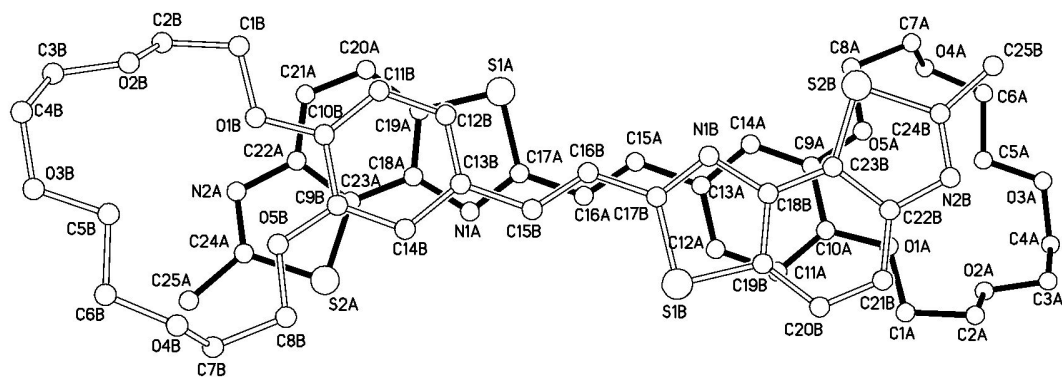
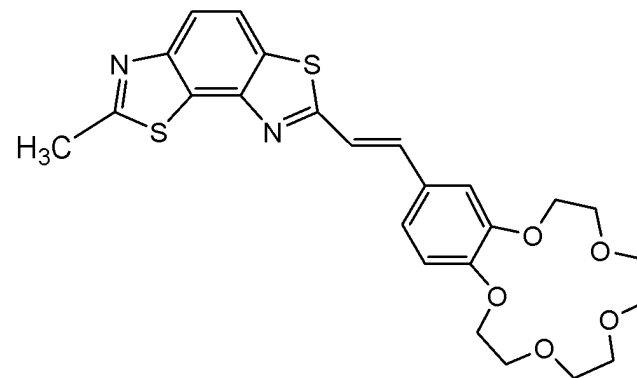
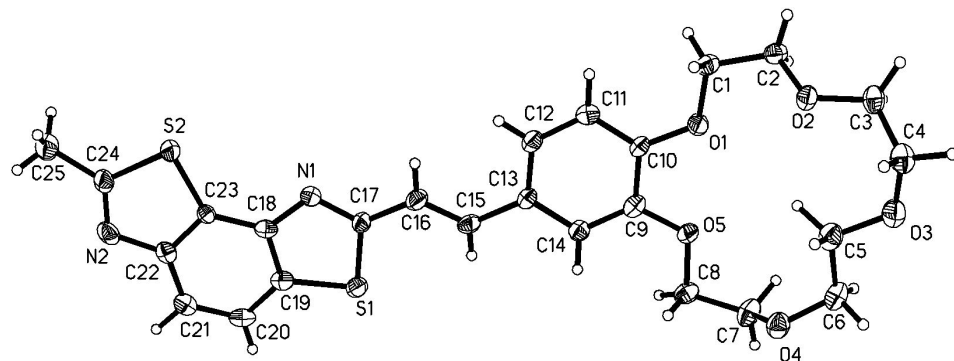


1

surface pressure - 1 mN/m surface pressure - 1.5 mN/m area per molecule - 0.82 nm² area per molecule - 0.82 nm²

2

Стэкинг- взаимодействие

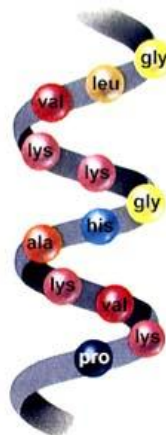


Структура белков. Четыре уровня организации



Последовательность аминокислот

primary structure
(amino acid sequence)



Конформация
полипептидной цепи

Водородные связи

secondary structure
(α -helix)



Пространственная
упорядоченность,
конформация
полипептидной цепи

взаимодействия Ван-дер-Ваальса

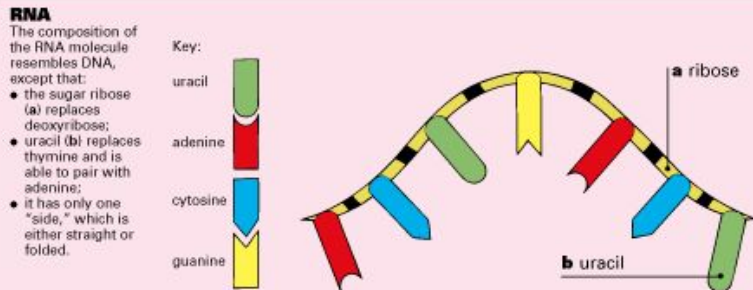
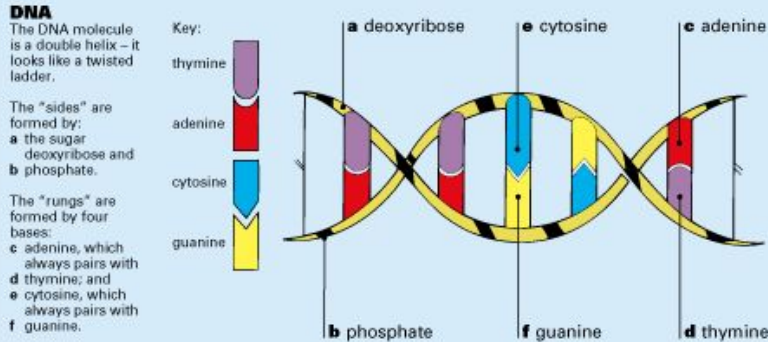
tertiary structure
(folded individual peptide)



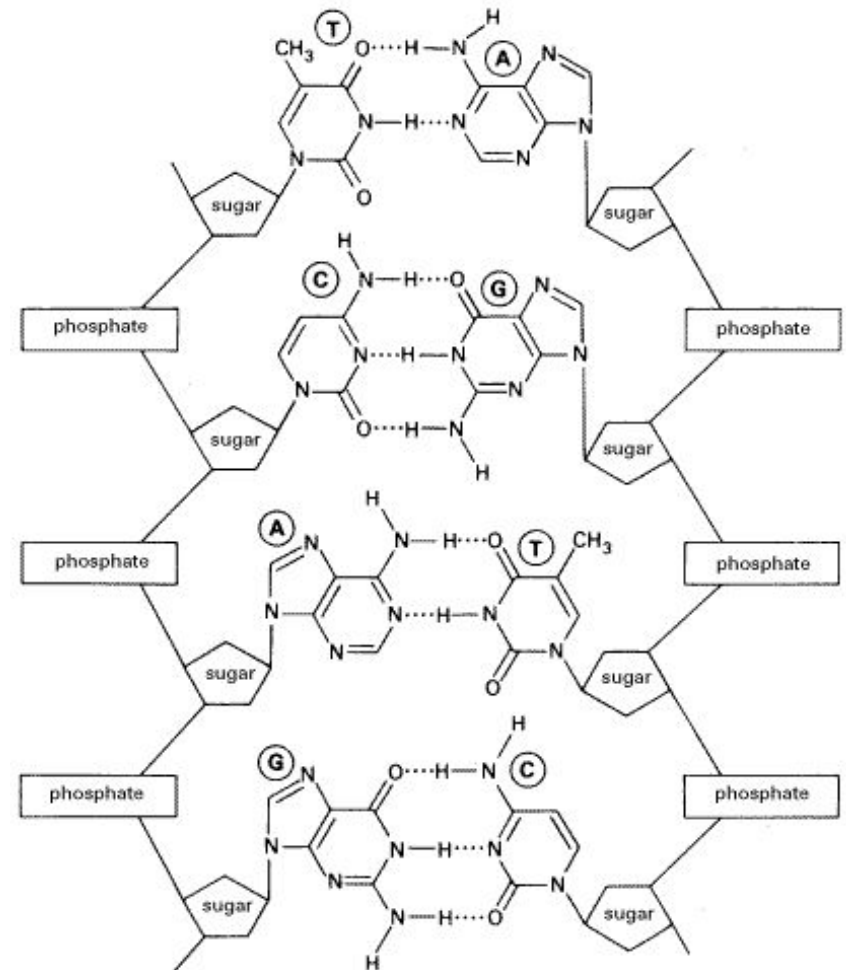
quaternary structure
(aggregation of two or more peptides)

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

