

**КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ  
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА**

**Хімічний факультет**  
Кафедра органічної хімії  
Кафедра аналітичної хімії

**«ЗАТВЕРДЖУЮ»**

Заступник декана  
навчальної роботи



Наталія УСЕНКО

30 » 00 2022 року

**РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ  
СУПРАМОЛЕКУЛЯРНА ХІМІЯ**

для здобувачів освіти

галузь знань	10 Природничі науки
спеціальність	102 Хімія
освітній рівень	магістр
освітня програма	Хімія
вид дисципліни	обов'язкова

Форма навчання	денна
Навчальний рік	2022-2023
Семестр	1
Кількість кредитів	5
Мова викладання, навчання та оцінювання	українська
Форма заключного контролю	іспит

Викладачі (лектори): д.хім.н, професор Пивоваренко Василь Георгійович  
к.хім.н., доцент Куліченко Сергій Анатолійович

Пролонговано: на 2023/2024 н. р. \_\_\_\_\_ (\_\_\_\_\_) «\_\_» \_\_\_\_\_ 20\_\_ р.

на 2024/2025 н. р. \_\_\_\_\_ (\_\_\_\_\_) «\_\_» \_\_\_\_\_ 20\_\_ р.

**КИЇВ – 2022**

Розробники:

**Пивоваренко Василь Георгійович**, д.х.н, професор, професор кафедри органічної хімії

**Куліченко Сергій Анатолійович**, к.х.н, доцент, доцент кафедри аналітичної хімії

ЗАТВЕРДЖЕНО


Завідувач кафедри органічної хімії

 Володимир ХИЛЯ

Протокол № 14 від 3 червня 2022 року

ЗАТВЕРДЖЕНО

Зав. кафедри аналітичної хімії

 Оксана ТАНАНАЙКО

Протокол № 12 від 22 червня 2022 року

Схвалено науково-методичною комісією хімічного факультету

Протокол №7 від 29 червня 2022 року

Голова науково-методичної комісії  Олександр РОЇК

« 29 » червня 2022 року

**1. Мета дисципліни** – ознайомлення студентів із особливостями просторової будови і властивостей супермолекул, класифікацією супрамолекулярних комплексів, теорією та практикою молекулярного розпізнавання та детекції супрамолекулярних взаємодій; вивчення складу, властивостей, специфіки будови організованих середовищ та систем на основі дифільних молекул, явища та природи солубілізації, перебігу кислотно-основних та рівноваг асоціації у таких системах, прояву в них ефектів вибіркового зв'язування субстрату по типу «гість-хазяїн».

**2. Попередні вимоги до опанування навчальної дисципліни:**

- 2.1. Знати загальну хімію на рівні бакалавра за спеціальністю «Хімія».
- 2.2. Знати аналітичну хімію на рівні бакалавра за спеціальністю «Хімія».
- 2.3. Знати неорганічну хімію на рівні бакалавра за спеціальністю «Хімія».
- 2.4. Знати органічну хімію на рівні бакалавра за спеціальністю «Хімія».
- 2.5. Володіти комп'ютерними програмами, пов'язаними із обробкою та представленням результатів досліджень супрамолекулярних комплексів.
- 2.6. Володіти навиками пошуку необхідної інформації в науковій літературі, наукометричних базах та інтернет-просторі.

**3. Анотація навчальної дисципліни.** Призначена для вивчення студентами природи міжмолекулярних взаємодій та особливостей просторової будови і властивостей супермолекул. Ознайомлення з класами супрамолекулярних структур, теорією та практикою молекулярного розпізнавання та детекції супрамолекулярних взаємодій; методами вивчення складу, властивостей, специфіки просторової будови організованих середовищ та систем на основі дифільних молекул, явища та природи солубілізації, перебігу кислотно-основних та рівноваг асоціації у таких системах, прояву в них ефектів вибіркового зв'язування субстрату за типом «гість-хазяїн».

**4. Завдання:** розвиток теоретичних уявлень студентів про будову та закономірності взаємодії великих молекул, їх поведінку і властивості в організованих системах та набуття студентами навичок у вивченні супрамолекулярних взаємодій.

ЗК1 (знання та розуміння предметної області та розуміння професійної діяльності), ЗК2 (здатність вчитися і оволодівати сучасними знаннями), ЗК4 (здатність застосовувати знання у практичних ситуаціях), ЗК6 (здатність генерувати нові ідеї (креативність)), ЗК8 (здатність оцінювати та забезпечувати якість виконуваних робіт), ФК1 (здатність використовувати закони, теорії та концепції хімії у поєднанні із відповідними математичними інструментами для опису природних явищ), ФК4 (здатність інтерпретувати, об'єктивно оцінювати і презентувати результати свого дослідження), ФК5 (здатність застосовувати методи комп'ютерного моделювання для вирішення наукових, хіміко-технологічних проблем та проблем хімічного матеріалознавства), ФК6 (здатність здобувати нові знання в галузі хімії та інтегрувати їх із уже наявними), ФК8 (здатність формулювати нові гіпотези та наукові задачі в галузі хімії, вибирати напрями та відповідні методи для їх розв'язання на основі розуміння сучасної проблематики досліджень в галузі хімії та беручи до уваги наявні ресурси).

**5. Результати навчання за дисципліною**

Код	Результат навчання (1 – знати; 2 – вміти; 3 – комунікація; 4 – автономність та відповідальність)	Форми (та/або методи і технології) викладання і навчання	Методи оцінювання поточний контроль (активність під час занять та виконання дом. роботи ПтК1, написання КР ПтК-2), підсумковий контроль ПсК	Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни
1.1	Знати місце курсу «Супрамолекулярна хімія» в системі сучасної хімічної науки	лекції, практичні, самостійні	ПтК-2, ПтК-3, ПсК	5

1.2	Знати природу та силу міжмолекулярних взаємодій	лекції, практичні, самостійні	ПтК-2, ПтК-3, ПсК	10
1.3	Знати вплив просторової та хімічної комплементарності на енергетику міжмолекулярних взаємодій	лекції, практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-3, ПсК	25
2.1	Уміти аналізувати просторову будову молекулярних комплексів	практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПтК-3, ПсК	10
2.2	Уміти розраховувати міцність молекулярних комплексів	практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПтК-3, ПсК	15
2.3	Уміти аналізувати конформаційну обмеженість складних молекул	лекції, практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПтК-3, ПсК	15
3.1	Здатність використовувати сучасні інформаційно-комунікаційні технології при спілкуванні, а також у зборі, аналізі, обробці та інтерпретації даних, отриманих у ході виконання практичних завдань	лекції, практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПтК-3, ПсК	5
3.2	Здатність виконувати передбачені навчальною програмою завдання та операції у співпраці з іншими виконавцями	практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-3, ПсК	5
4.1	Уміти самостійно реєструвати, пояснити та відтворити результати експерименту	практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-3, ПсК	5
4.2	Дотримуватися правил техніки безпеки при роботі в хімічній лабораторії	практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-3, ПсК	5

**6. Співвідношення результатів навчання дисципліни (РНД) із програмними результатами навчання (ПРН):**

ПРН	РНД (код)										
	1.1	1.2	1.3	2.1	2.2	2.3	3.1	3.2	4.1	4.2	
Р1. Знати та розуміти наукові концепції та сучасні теорії хімії, а також фундаментальні основи суміжних наук.	+	+	+	+							
Р2. Глибоко розуміти основні факти, концепції, принципи і теорії, що стосуються предметної області, опанованої у ході магістерської програми, використовувати їх для розв'язання складних задач і проблем, а також проведення досліджень з відповідного напрямку хімії.	+	+	+								
Р3. Застосовувати отримані знання і розуміння для вирішення нових якісних та кількісних задач хімії.	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+

ПРН	РНД (код)										
	1.1	1.2	1.3	2.1	2.2	2.3	3.1	3.2	4.1	4.2	
P7. Вільно спілкуватися англійською та (за можливості) іншою іноземною мовою з професійних питань, усно і письмово презентувати результати досліджень з хімії іноземною мовою, брати участь в обговоренні проблем хімії.	+	+	+				+	+			
P9. Збирати, оцінювати та аналізувати дані, необхідні для розв'язання складних задач хімії, використовуючи відповідні методи та інструменти роботи з даними.				+	+	+	+	+	+	+	+
P10. Планувати, організувати та здійснювати експериментальні дослідження з хімії з використанням сучасного обладнання, грамотно обробляти їх результати та робити обґрунтовані висновки.				+	+	+	+	+	+	+	+
P14. Інтерпретувати експериментально отримані дані та співвідносити їх з відповідними теоріями в хімії.	+	+	+	+	+	+			+	+	

## 7.1. Форми оцінювання студентів:

### Семестрове оцінювання:

Максимальна/мінімальна кількість балів, які можуть бути отримані студентом: **60 балів / 36 балів**, а саме:

- 1.1. усна відповідь (колоквіум) під час практичного заняття: **10 балів**;
- 1.2. активність під час практичних занять: **10 балів**;
- 1.3. виконання домашньої самостійної роботи: **10 балів**;
- 1.4. написання контрольної роботи та підсумкової контрольної роботи – 2 по **15 балів**.

### Підсумкове оцінювання (у формі іспиту):

Максимальна/мінімальна кількість балів, які можуть бути отримані студентом: **40 балів / 24 бали**.

Результати навчання які будуть оцінюватись: РН 1.1, 1.2, 1.3, 2.1, 2.3, 3.1, 3.2, 4.1, 4.2.

Форма проведення: письмова робота.

Для отримання загальної позитивної оцінки з дисципліни оцінка за іспит не може бути меншою **24 балів**.

Студент допускається до іспиту, якщо протягом семестру він:

- набрав не менше, ніж **36 балів**;
- виконав усі види робіт з переліку семестрового оцінювання;
- написав передбачені планом контрольні роботи.

## 7.2. Організація оцінювання:

Терміни проведення оцінювання:

Оцінювання активності, практичних занять і самостійної роботи: впродовж семестру.

Контрольна робота: не раніше 4 тижня семестру;

Студенти мають право на одне перескладання контрольної роботи у визначений викладачем термін.

### 7.3. Шкала відповідності оцінок

Оцінка (за національною шкалою) / National grade	Рівень досягнень / Marks
<b>Відмінно</b> / Excellent	90-100
<b>Добре</b> / Good	75-89
<b>Задовільно</b> / Satisfactory	60-74
<b>Незадовільно</b> / Fail	0-59

### 8. Структура навчальної дисципліни. Тематичний план лекцій

№ лекції	Назва лекції	лекції	прак-тичні заняття	самоств. робота
<b>ЧАСТИНА 1. ТЕОРЕТИЧНІ ОСНОВИ СУПРАМОЛЕКУЛЯРНОЇ ХІМІЇ</b>				
1	Вступ. Принципи утворення супрамолекулярних структур	2	4	10
2	Молекулярне розпізнавання	2	4	15
3	Детекція супрамолекулярних взаємодій.	2	4	24
4	Сучасні уявлення про структуру води та сполук включення на її основі. Контрольна робота 1	2	2	4
<b>ЧАСТИНА 2. СУПРАМОЛЕКУЛЯРНА ХІМІЯ ОРГАНІЗОВАНИХ СЕРЕДОВИЩ</b>				
5	Предмет та завдання супрамолекулярної хімії організованих середовищ.	2	3	10
6	Основні типи організованих середовищ та систем на основі дифільних органічних молекул.	2	4	15
7	Солюбілізація в організованих середовищах. Кислотно-основні властивості солюбілізованих субстратів.	2	3	15
8	Асоціація і комплексоутворення в організованих середовищах. Практичне застосування здобутків галузі в Україні та в світі. Підсумкова контрольна робота	3	4	12
	<b>УСЬОГО</b>	<b>15</b>	<b>30</b>	<b>105</b>

Загальний обсяг 150 год., в тому числі:

Лекції – 15 год.

Практичні заняття – 30 год.

Самостійна робота – 105 год.

Консультації – 0 год.

### 9. Рекомендовані джерела

#### Основні:

1. Пивоваренко В.Г. Основи супрамолекулярної хімії. (Частина 1 рукопису) 2022. – 104 с.  
<https://drive.google.com/drive/folders/1ABLG2YiwO0NvGDx-bOp6qWkRQ6u-sE14>
2. Куліченко С.А., Дорошук В.О. Організовані середовища поверхнево-активних речовин в аналізі: навч. посіб. для студ. вищ. навч. закл. – К.: ВПЦ "Київський університет", 2010. – 108 с.

3. Demchenko A.P. Introduction to Fluorescence Sensing. – Springer, 2015. – 816 p.
4. Ariga K., Kunitake T. Supramolecular Chemistry – Fundamentals and Applications. – Springer Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2006. – 208 p.
5. Steed J., Atwood J. Supramolecular Chemistry. Second ed. Vol. 1, 2. – Wiley, 2013. – 1056 p.

#### **Додаткові:**

1. Balzani V., Scandola F. Supramolecular photochemistry. Chichester: Elis Horwood, 1991, 458 p.
2. Balzani V., Credi A., Venturi M. Molecular Devices and Machines. WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA Weinheim, 2003, 494 P.
3. Atwood J., Steed J. Encyclopedia Supramolecular Chemistry. Vol. 1, 2. CRC Press, 2004 - 1670 p.
4. T. Steiner. The Hydrogen Bond in the Solid State. Angew. Chem. Int. Ed. 2002, 41, 48-76
5. E.D. Glowacki, M. Irimia-Vladu, S. Bauer, N.S. Sariciftci. Hydrogen-bonds in molecular solids—from biological systems to organic electronics. *J. Mater. Chem. B*, 2013, **1**, 3742-3753.
6. V. Russell, M. Scudder, I. Dance. The crystal supramolecularity of metal phenanthroline complexes. *J. Chem. Soc., Dalton Trans.*, 2001, 789–799.
7. M. Alonso, T. Woller, F.J. Martin-Martinez, J. Contreras-Garcia, P. Geerlings, F. De Proft. Understanding the Fundamental Role of  $\pi/\pi$ ,  $\sigma/\sigma$  and  $\sigma/\pi$  Dispersion Interactions in Shaping Carbon-Based Materials. *Chem. Eur. J.*, 2014, 20, 4931–4941.
8. C. A. Hunter and J. K. M. Sanders. The Nature of  $\pi - \pi$  Interactions. *J. Am. Chem. Soc.* 1990, 112, 5525-5534.
9. C. Janiak. A critical account on  $\pi - \pi$  stacking in metal complexes with aromatic nitrogen-containing ligands. *J. Chem. Soc., Dalton Trans.*, 2000, 3885–3896
10. T. K. Mandal, S. Samanta, S. Chakraborty, A. Datta. An Interplay of Cooperativity between Cation $\cdots\pi$ , Anion $\cdots\pi$  and C-H $\cdots$ Anion Interactions. *ChemPhysChem* 2013, 14, 1149 – 1154
11. E. T. Kool. HYDROGEN BONDING, BASE STACKING, AND STERIC EFFECTS IN DNA REPLICATION. *Ann. Rev. Biophys. Biomol. Struct.* 2001. 30:1–22.
12. R. Chakrabarty, P. S. Mukherjee, P. J. Stang. Supramolecular Coordination: Self-Assembly of Finite Two- and Three-Dimensional Ensembles. *Chem. Rev.* 2011, 111, 6810–6918.
13. S. Durot, J. Taesch, V. Heit. Multiporphyrinic Cages: Architectures and Functions. *Chem. Rev.*, 2014, 114 (17), pp 8542–8578.
14. H. Amouri, C. Desmarests, J. Moussa. Confined Nanospaces in Metallogages: Guest Molecules, Weakly Encapsulated Anions, and Catalyst Sequestration. *Chem. Rev.* 2012, 112, 2015–2041.
15. N. Ahmad, A. H. Chughtai, H. A. Younus, F. Verpoort. Discrete metal-carboxylate self-assembled cages: Design, synthesis and applications. *Coord. Chem. Rev.* 2014, 280, 1–27.
16. S. J. Dalgarno, N. P. Power, J. L. Atwood. Metallo-supramolecular capsules. *Coord. Chem. Rev.* 2008, 252, 825–841.
17. P. Jin, S. J. Dalgarno, J. L. Atwood. Mixed metal-organic nanocapsules. *Coord. Chem. Rev.* 2010, 254, 1760–1768.
18. P. Pallavicini, Y. A. Diaz-Fernandez, L. Pasotti. Micelles as nanosized containers for the self-assembly of multicomponent fluorescent sensors. *Coord. Chem. Rev.* 2009, 253, 2226–2240.
19. B. Ballesteros, T. B. Faust, C.-F. Lee, D. A. Leigh, C. A. Muryn, R. G. Pritchard, D. Schultz, S. J. Teat, G. A. Timco, R. E. P. Winpenny. Synthesis, Structure, and Dynamic Properties of Hybrid Organic-Inorganic Rotaxanes. *J. AM. CHEM. SOC.* 2010, 132, 15435–15444.
20. G. A. Timco, T. B. Faust, F. Tuna, R. E. P. Winpenny. Linking heterometallic rings for quantum information processing and amusement. *Chem. Soc. Rev.*, 2011, 40, 3067–3075.
21. Fernandez, E. Moreno Pineda, J. Ferrando-Soria, E. J. L. McInnes, G.A. Timco and R. E. P. Winpenny. A hybrid organic–inorganic molecular daisy chain. *Chem. Commun.* 2015, DOI: 10.1039/c5cc02216a.
22. C.-F. Lee, D. A. Leigh, R. G. Pritchard, D. Schultz, S. J. Teat, G. A. Timco, R. E. P. Winpenny. Hybrid organic–inorganic rotaxanes and molecular shuttles. *Nature*, 2009, 458, 314 – 318.
23. J. Ferrando-Soria, A. Fernandez, E. M. Pineda, S. A. Varey, R. W. Adams, I. J. Vitorica-Yrezabal, F.

- Tuna, G. A. Timco, C. A. Muryn, R. E. P. Winpenny. Controlled Synthesis of Nanoscopic Metal Cages. *J. Am. Chem. Soc.* 2015, 137 (24), pp 7644–7647.
24. G. A. Timco, A. S. Batsanov, F. K. Larsen, C. A. Muryn, J. Overgaard, S. J. Teat, R. E. P. Winpenny. Influencing the nuclearity and constitution of heterometallic rings via templates. *Chem. Commun.*, 2005, 3649–3651.
25. J. Tasiopoulos, A. Vinslava, W. Wernsdorfer, K. A. Abboud, G. Christou. Giant Single-Molecule Magnets: A {Mn<sub>8</sub>} Torus and Its Supramolecular Nanotubes. *Angew. Chem.* 2004, 116, 2169–2173.
26. P. Gutlich, H. A. Goodwin. Spin Crossover – An Overall Perspective. *Top Curr Chem* (2004) 233:1–47.
27. Y.-T. Wang, S.-T. Li, S.-Q. Wu, A.-L. Cui, D.-Z. Shen, H.-Z. Kou. Spin Transitions in Fe(II) Metalloids Modulated by Substituents, Counteranions, and Solvents. *J. Am. Chem. Soc.* 2013, 135, 5942–5945.

## 10. Додаткові ресурси:

Електронні підручники та графічний і звуковий супровід лекцій, що доступні для студентів за ел. адресою <https://drive.google.com/drive/folders/11sjAvokRL96LZ4bi6OIMucn5x1LK3Lo2>

### ДЕТАЛЬНА ТЕМАТИЧНА ПРОГРАМА КУРСУ «СУПРАМОЛЕКУЛЯРНА ХІМІЯ»

**Вступ.** Предмет супрамолекулярної хімії. Історія становлення наукового напрямку. Основні принципи утворення супрамолекулярних комплексів: хімічна і просторова комплементарність у комплексі «гість-хазяїн», кооперативність взаємодій. Типи міжмолекулярних взаємодій, їх енергетичні характеристики та кооперативний вклад у випадку складних молекул. Комплементарність молекул за хімічною та просторовою будовою. Термодинамічна і кінетична складові селективності супрамолекулярних взаємодій. Вплив конформаційної обмеженості молекул на селективність міжмолекулярних взаємодій та стабільність утвореного комплексу. Приклади конформаційно обмежених гостей (нуклеїнові основи, стероїди, циклічні пептиди, алкалоїди, антибіотики, вітаміни, яди і токсини).

Приклади супрамолекулярних ансамблів на основі різних рецепторів. Хелатори, коронанди, поданди, криптанди, каліксарени, карцеранди, катенани, ротоксани, куркубітурили, дендримери. Природні супрамолекулярні структури на основі порфіринів. Конформація та реакційна здатність. Конформаційна обмеженість та структурна жорсткість молекул і супрамолекулярних комплексів, їх вплив на кінетику утворення та міцність супрамолекулярних комплексів. Конформація та ліпофільність молекули. Значення нековалентних взаємодій у біологічних процесах. Авідин-біотин та стрептавідин-біотинові комплекси.

**Фізичні методи дослідження супрамолекулярних структур.** Рентгеноструктурний аналіз. Електронна мікроскопія. ЯМР спектроскопія. Атомна силова мікроскопія та скануючи тунельна мікроскопія. Оптичні методи: спектрофотометрія, флуориметрія, круговий дихроїзм.

#### **Принципи розпізнавання та будова молекулярних рецепторів**

Рецептори катіонів металів Na<sup>+</sup>, K<sup>+</sup>, Mg<sup>2+</sup>, Ca<sup>2+</sup>, Zn<sup>2+</sup>. Рецептори однозарядних (F<sup>-</sup>, Cl<sup>-</sup>), та багатозарядних аніонів (АТФ). Розпізнавання складних молекул та іонів (холестерин, АТФ, триптофан, лінійні дикатіони та діаніони). Селективність та афінітет у розпізнаванні. Вплив середовища на селективність та афінітет. Методи розпізнавання та детекції супрамолекулярних взаємодій.



### **Колективні коливання у розчинах та їх вплив на хімічні процеси**

Парадокс причини броунівського руху в рідинах. Термальний шум у рідинах: розподіл амплітуди та енергії коливань за частотою. Фонон - квант коливального руху. Повздовжні та поперечні хвилі в рідині. Розсіювання фононів та фононний обмін у рідині. Солітон. Утворення та розповсюдження солітонів у рідині. Методи реєстрації фононів у розчинах. Будова розчину і вплив фононів на його складові. Механізм формування нанолокацій високого та низького тиску. Вплив колективних коливань на міжмолекулярні комплекси у хімічних реакціях та у процесах дифузії, плавлення, випаровування та розчинення.

### **Клатратні сполуки**

Клітинні, каналні та пошарові клатрати. Мономолекулярні клатрати. Макромолекулярні сполуки включення. Клатратокомплекси (поданди, коронанди, криптанди, карцеранди та їх комплекси, природні йонофори). Селективність та афінитет до гостя у залежності від будови хазяїна та природи середовища.

Структура води та клатратні гідрати. Гексагональний лід та водні кластери. Вода високої та низької густини. Структура водних розчинів. «H-bond making» та «H-bond braking» сполуки. Типи полостей у воді та характер їх заповнення гостями.

### **Ліпідні структури**

Моношари, бішари, кубічні та гексагональні фази. Принципи самозбирання, механічна та термічна стабільність. Окремі фізикохімічні властивості бішарових структур.

### **Супрамолекулярні структури нуклеїнових кислот (НК).**

Просторова будова нуклеїнових кислот як результат комплементарності нуклеїнових основ. Спіральні та глобулярні структури НК: шпилька, дуплекс, триплекс, квадруплекс, суперспіралізація. Стекінг та інтеркаляція ароматичних молекул в структури НК. Реплікація, транскрипція та трансляція як приклади супрамолекулярних хімічних перетворень. Хроматин, рибосоми та віруси як супрамолекулярні структури.

Технології, що базуються на супрамолекулярних структурах НК. Афінна хроматографія, олігонуклеотидні чіпи, системи молекулярної детекції. Полімеразна ланцюгова реакція (PCR).

### **Білкові структури**

Глобулярні та фібрилярні структури білків. Спіралі, вигини, складчасті шари, цинкові «пальці». Вплив оточення на конформацію молекул білків. Авідин-біотин та стрептавідин-біотинові комплекси.

### **Предмет та завдання супрамолекулярної хімії організованих середовищ.**

Історичні відомості: формування основних понять, ідей, мети та предмету супрамолекулярної хімії. Супрамолекулярна хімія і вирішення проблеми хімічної спорідненості та вибірковості взаємодій. «М'які» асоціати і організовані середовища як іманентні складові об'єктів супрамолекулярної хімії. Становлення супрамолекулярної хімії організованих середовищ. Основні типи організованих середовищ: розчини молекул-рецепторів, молекулярні ансамблі і міцелярні системи на основі дифільних органічних молекул. Природа, специфічні та загальні властивості мікрогетерогенних організованих середовищ.

Вода і її структура: модель двох станів, модель двох структур. Взаємодії між водою та розчиненою речовиною. Гідрофільна та гідрофобна гідратація розчиненої речовини. Гідратація поверхнево-активних речовин у водних розчинах. Гідрофобне зв'язування та гідрофобні взаємодії. Енергетика гідрофобного зв'язування.

Дифільні органічні молекули як структуроутворювачі організованих середовищ. Структурно-молекулярні та функціональні ознаки ПАР. Класифікації поверхнево-активних речовин. Типи ПАР для створення організованих середовищ. Характерні представники: властивості, синтез, очистка. Гідрофільно-гідрофобний баланс ПАР.

### ***Основні типи організованих середовищ та систем на основі дифільних органічних молекул.***

Поведінка дифільних органічних речовин у водних та неводних розчинах. Розчинність і фазова діаграма розчинів ПАР. Міцелоутворення у розчинах ПАР, критична концентрація міцелоутворення (ККМ), методи визначення, фактори впливу. Точка (температура) Крафта. Температура помутніння у розчинах неіонних та іонних ПАР.

Поліморфізм міцел, їх природа та будова. Сукупність критичних концентрацій міцелоутворення. Сферичні, еліпсоїдальні, циліндричні та ламелярні міцели ПАР, везикули, ліпосоми, наносоми, рідкокристалічні фази ПАР. Прямі та обернені міцелярні структури.

Організація розчинів високомолекулярних сполук (ВМС). Стан катіонних, аніонних та амфолітних ВМС у розчинах, ізоелектрична точка амфолітних ВМС.

Дендримери, їх природа, властивості, способи отримання, напрямки використання.

Емульсійні середовища. Макро-, міні- та мікроемульсії: склад, стійкість, приготування, структура, властивості. Прямі і обернені мікроемульсійні середовища. Аналогії мікроемульсійних і міцелярних систем.

Міцелярні макрофази ПАР. Фазове розшарування у розчинах ПАР при зміні температури. Індуковані міцелярні макрофази, чинники впливу на фазоутворення у розчинах ПАР. Зв'язування органічних субстратів міцелярними макрофазами ПАР. Природа і використання міцелярно-екстракційних систем.

Організовані системи дифільних молекул на твердих поверхнях. Адміцели. Плівки Ленгмюра-Блоджет (ПЛБ). Утворення, типи, природа, властивості та основні напрямки використання ПЛБ.

Здатність до вибіркового зв'язування субстрату («гість-хазяїн») як іманентна особливість організованих середовищ та супрамолекулярних систем. Молекулярне розпізнавання в організованих середовищах.

### ***Солюбілізація. Кислотно-основні властивості солюбілізованих субстратів. Швидкість хімічних реакцій в організованих середовищах.***

Явище і природа солюбілізації; кількісні характеристики. Локалізація субстратів у міцелах. Вплив солюбілізації на властивості органічних субстратів. Мікроконцентрування компонентів хімічної реакції при солюбілізації. Багатофункціональна й багатоцентрична взаємодія мікрофази з солюбілізованим субстратом. Орієнтовані сорбція та солюбілізація. Способи впливу на перебіг реакцій в організованих середовищах. Регулювання ефективності зв'язування субстратів при солюбілізації. Показник ГЛБ для передбачення ефективності солюбілізації в організованих середовищах ПАР. Переваги та проблеми використання неводних розчинників в хімії. Солюбілізація як раціональна альтернатива екстракції органічними розчинниками.

Кислотно-основні властивості органічних протолітів в організованих середовищах. Протолітичні рівноваги органічних реагентів у до- та міцелярних розчинах. Вплив іонної асоціації на кислотно-основні властивості реагентів в організованих системах. Вплив катіонних, аніонних та неіонних ПАР на кислотно-основні властивості кислотних та основних протолітів. Диференційований вплив міцелярних, мікроемульсійних та емульсійних середовищ на кислотно-основні характеристики протолітів у залежності від їх гідрофобності.

Швидкість хімічних реакцій в організованих середовищах. Міжфазний каталіз та його різновиди. Основи міцелярного каталізу; основні чинники впливу. Кінетична теорія міцелярного каталізу.

### ***Асоціація і комплексоутворення в організованих середовищах.***

Асоціація у розчинах великих органічних молекул. Оптичні характеристики, розчинність та стійкість асоціатів органічних субстратів і ПАР. Методи дослідження і колоїдно-хімічний стан розчинів асоціатів. Основні форми асоціатів реагентів з протиіонами ПАР у розчинах: електронейтральні, субстехіометричні та солюбілізовані асоціати. Підсилення гідрофобного зв'язування при електростатичному притяганні частинок. Асоціати хромофорних органічних реагентів з протиіонами ПАР. Електроліти, органічні розчинники та неіонні ПАР у системах реагент – протиіон ПАР. Ефекти гість-хазяїн при асоціації в організованих розчинах. «Комплексні» ПАР.

Комплексоутворення органічних реагентів з іонами металів в організованих середовищах. Оптичні властивості комплексів органічних реагентів з іонами металів в організованих середовищах ПАР. Специфіка комплексоутворення органічних реагентів в організованих середовищах ПАР. Збільшення числа координованих лігандів при комплексоутворенні органічних реагентів з іонами металів. Багатоцентрова взаємодія полідентатних реагентів з іонами металів в організованих системах. Активація комплексоутворення реагентів в сильноокислих організованих середовищах. Підвищення стійкості металокомплексів органічних реагентів в організованих середовищах. Вплив четвертого компоненту: модифікація комплексів типу іонних асоціатів електролітами та сумішами ПАР різних типів. Аналітичний сигнал та метрологічні показники вимірювань в організованих середовищах.

**Прикладні аспекти використання організованих середовищ в Україні та світі.** Застосування організованих середовищ у методах атомної та молекулярної спектроскопії, електрохімічних методах, хроматографії, методах розділення та концентрування.

### **Контрольні запитання та завдання до частини 1:**

1. Перелічити типи специфічних і неспецифічних міжмолекулярних взаємодій.
2. Чисельні значення енергій міжмолекулярних взаємодій кожного з типів.
3. Приклади супрамолекул та супрамолекулярних комплексів у хімії.
4. Приклади супрамолекул та супрамолекулярних комплексів у біології.
5. Що таке комплементарність молекул за хімічною та просторовою будовою (хімічна та просторова комплементарність)?
6. Типи міжмолекулярних комплексів та їх будова. Навести приклади молекул-донорів електронної густини:  $n$ ,  $\pi$  та  $\sigma$ -типу. Навести приклади молекул-акцепторів електронної густини:  $\nu$ ,  $\pi$  та  $\sigma$ -типу.
7. Що таке конформаційна обмеженість молекули? Як можна порівняти конформаційну обмеженість сегментів однієї молекули чи сегментів різних молекул?
8. Що таке структурна жорсткість молекули і чим вона відрізняється від конформаційної обмеженості?
9. Як змінюється конформаційна обмеженість рецептора при утворенні комплексу з субстратом, і чому?
10. Приклади структурно жорстких конформацій полімерних молекул.
11. Приклади конформаційно обмежених субстратів (у хімії та біології).
12. Приклади конформаційно обмежених рецепторів (у хімії та біології).
13. Приклади впливу конформаційної обмеженості молекули на селективність міжмолекулярних взаємодій та стабільність утвореного комплексу.
14. Дати означення терміну «молекулярне розпізнавання».
15. Чому конформаційно обмежені субстрати утворюють міцніші комплекси з рецепторами?
16. Дві характеристики взаємодій у молекулярному розпізнаванні.
17. Від яких просторових і фізичних характеристик рецептора і субстрату залежить стабільність комплексу?
18. Від яких просторових і фізичних характеристик рецептора і субстрату залежить селективність їх взаємодії?
19. Як змінюється селективність взаємодії з рецептором при зростанні конформаційної обмеженості субстрату, і чому?
20. Дати означення наступним супермолекулам: «хелатор», «коронанд», «поданд», «криптаннд», «кавітаннд», «сферанд», «карцеранд», «каліксарен», «фуллерен», «порфірин», «ротаксан», «катенан», «дендример», «циклодекстрин», «куркубітурил», «рибонуклеїнова кислота», «дезоксирибонуклеїнова кислота», «рибонуклеотид», «дезоксирибонуклеотид», «дуплекс ДНК», «триплекс ДНК», «квадруплекс», «плазміда», «хромосома», «протеїн», «протеїн-нуклеїнова кислота» (ПНК), «міцела», «ліпосома», «целюлоза», «амілоза».

21. Який з кальцієвих хелаторів має більшу конформаційну обмеженість: «Quin-2» чи «ВАРТА»? Який з цього практичний наслідок?
22. Чому селективність  $\text{Ca}^{2+}/\text{Mg}^{2+}$  у «Quin-2» нижча, ніж у «ВАРТА»?
23. Як зміниться афінитет до катіонів  $\text{Ca}^{2+}$  та селективність  $\text{Ca}^{2+}/\text{Mg}^{2+}$  хелатору «ВАРТА» при збільшенні іонної сили розчину? При підвищенні рН розчину? При зниженні рН розчину?
24. Як зменшити афінитет кальцієвого хелатору до ліпідів та білків у розчині?
25. Який вплив на селективність і афінитет чинить кожна риса, що складає різницю у будові хелаторів двовалентних іонів  $\text{Ca}^{2+}$  та  $\text{Zn}^{2+}$ : «ВАРТА» та «FLUO-Zn3», призначених для роботи у водних розчинах, рН 7?
26. Який прийом використано у будові рецепторів катіонів  $\text{Ca}^{2+}$ ,  $\text{Mg}^{2+}$ ,  $\text{Zn}^{2+}$ ,  $\text{Na}^{+}$  та  $\text{K}^{+}$ , для зменшення їх чутливості до рН розчину?
27. Як зміниться афінитет і селективність коронандів до катіонів  $\text{Na}^{+}$  та  $\text{K}^{+}$  при переході від водних розчинів до метанольних? При переході від метанольних до ацетонітрильних? Пояснити причини змін.
28. Чому афінитет і селективність коронандів до катіонів  $\text{Na}^{+}$  та  $\text{K}^{+}$  вища, ніж у подандів?
29. Пояснити, за рахунок яких типів міжмолекулярних взаємодій тримається структура міцел і ліпосом? Які взаємодії вносять основний вклад?
30. Пояснити, за рахунок яких типів міжмолекулярних взаємодій тримається структура ДНК? Які взаємодії вносять основний вклад?
31. Чому переважна більшість пептидів у водних розчинах перебувають у конформації статистичної глобули, а у присутності етанолу, міцел чи ліпідних мембран приймають конформацію  $\alpha$ -спіралі?
32. Чому целюлоза утворює фібрилярні структури, а амілоза – спіральні?
33. Перелічіть типи  $\pi$ - $\pi$  стекінг взаємодій.
34. Яка природа виникнення  $\pi$ - $\pi$  стекінг взаємодій?
35. Яка серед можливих за типом  $\pi$ - $\pi$  стекінг взаємодій є найбільш енергетично вигідною і чому?
36. Яким чином наявність  $\pi$ - $\pi$  стекінг взаємодій може впливати на оптичні властивості сполук?
37. Наведіть приклади взаємодій типу  $\pi$ -аніон та  $\pi$ -катіон.
38. Яка енергія типова для взаємодій типу  $\pi$ -аніон та  $\pi$ -катіон?
39. Наведіть приклади взаємодій типу  $\pi$ --H-X.
40. Енергія взаємодій типу  $\pi$ --H-X, від чого вона залежить.
41. Наведіть приклади  $\pi$ - $\pi$ ,  $\pi$ -аніон та  $\pi$ -катіон,  $\pi$ --H-X взаємодій у біохімії
42. Вкажіть типи водневих зв'язків.
43. Наведіть приклади одно-, дво- та трицентрових водневих зв'язків.
44. Від яких факторів залежить енергія водневих зв'язків.
45. Наведіть класифікацію водневих зв'язків по їх енергії.
46. Наведіть приклади впливу водневих зв'язків на будову макромолекул.
47. У чому різниця між speculative та corroborative моделями металопротеїнів?
48. Вкажіть відмінності у четвертинній будові міоглобіну та гемоглобіну.
49. Вкажіть причини відмінності у зв'язуванні молекули кисню гемоглобіном і міоглобіном.
50. Наведіть приклади модельних сполук, що імітують поведінку міоглобіну.
51. Наведіть приклади модельних сполук, що імітують поведінку гемоглобіну.
52. Наведіть приклади модельних сполук, що імітують поведінку гемоціаніну.
53. Наведіть приклади модельних сполук, що імітують поведінку уреаз.
54. Наведіть приклади модельних сполук, що імітують поведінку карбоксипептидази.
55. Наведіть приклади молекулярних контейнерів.
56. На чому базується класифікація молекулярних контейнерів?
57. Наведіть приклади застосування молекулярних контейнерів.
58. Наведіть приклади селективної сорбції молекулярними холодильниками.

59. На чому базується можливість використання молекулярних холодильників для розділення субстратів.
60. Наведіть приклади використання молекулярних контейнерів у каталітичних процесах.
61. Наведіть приклади використання молекулярних контейнерів у якості сенсорів.
62. Дайте визначення та наведіть приклади сполук типу «молекулярні колеса»
63. Наведіть фактори, що впливають на ядерність «молекулярних колес»
64. Яким чином лінійний розмір темплату визначає будову «молекулярних колес»?
65. Які синтетичні особливості отримання гетеробіметальних молекулярних колес?
66. Яка причина хіральності «молекулярних колес», отриманих на основі оптично неактивних лігандних систем?
67. Наведіть приклади утворення дендримерів і ротаксанів на основі «молекулярних колес».
68. Дайте визначення класу сполук «молекулярні решітки».
69. Які види молекулярних решіток Ви знаєте?
70. Наведіть приклади дефектів у будові молекулярних решіток.
71. Наведіть можливі приклади ізомерії у молекулярних решітках

### Питання контрольної роботи №1

1. Перелічити типи специфічних і неспецифічних міжмолекулярних взаємодій.
2. Чисельні значення енергій міжмолекулярних взаємодій кожного з типів.
3. Приклади супрамолекул та супрамолекулярних комплексів у хімії.
4. Приклади супрамолекул та супрамолекулярних комплексів у біології.
5. Що таке комплементарність молекул за хімічною та просторовою будовою (хімічна та просторова комплементарність)?.
6. Типи міжмолекулярних комплексів та їх будова. Навести приклади молекул-донорів електронної густини:  $n$ ,  $\pi$  та  $\sigma$ -типу. Навести приклади молекул-акцепторів електронної густини:  $v$ ,  $\pi$  та  $\sigma$ -типу.
7. Що таке конформаційна обмеженість молекули? Як можна порівняти конформаційну обмеженість сегментів однієї молекули чи сегментів різних молекул?
8. Що таке структурна жорсткість молекули і чим вона відрізняється від конформаційної обмеженості?
9. Як змінюється конформаційна обмеженість рецептора при утворенні комплексу з субстратом, і чому?
10. Приклади структурно жорстких конформацій полімерних молекул.
11. Приклади конформаційно обмежених субстратів (у хімії та біології).
12. Приклади конформаційно обмежених рецепторів (у хімії та біології).
13. Приклади впливу конформаційної обмеженості молекули на селективність міжмолекулярних взаємодій та стабільність утвореного комплексу.
14. Дати означення терміну «молекулярне розпізнавання».
15. Чому конформаційно обмежені субстрати утворюють міцніші комплекси з рецепторами?
16. Дві характеристики взаємодій у молекулярному розпізнаванні.
17. Від яких просторових і фізичних характеристик рецептора і субстрату залежить стабільність комплексу?
18. Від яких просторових і фізичних характеристик рецептора і субстрату залежить селективність їх взаємодії?
19. Як змінюється селективність взаємодії з рецептором при зростанні конформаційної обмеженості субстрату, і чому?
20. Дати означення наступним супермолекулам: «хелатор», «коронанд», «поданд», «криптаннд», «кавітаннд», «сферанд», «карцеранд», «каліксарен», «фуллерен», «порфірин», «ротаксан», «катенан», «дендример», «циклодекстрин», «куркубітурил», «рибонуклеїнова кислота», «дезоксирибонуклеїнова кислота», «рибонуклеотид», «дезоксирибонуклеотид», «дуплекс ДНК», «триплекс ДНК», «квадруплекс», «плазміда», «хромосома», «протеїн», «протеїн-нуклеїнова кислота» (ПНК), «міцела», «ліпосома», «целюлоза», «амілоза».

21. Який з кальцієвих хелаторів має більшу конформаційну обмеженість: «Quin-2» чи «ВАРТА»? Який з цього практичний наслідок?
22. Чому селективність  $\text{Ca}^{2+}/\text{Mg}^{2+}$  у «Quin-2» нижча, ніж у «ВАРТА»?
23. Як зміниться афінитет до катіонів  $\text{Ca}^{2+}$  та селективність  $\text{Ca}^{2+}/\text{Mg}^{2+}$  хелатору «ВАРТА» при збільшенні іонної сили розчину? При підвищенні рН розчину? При зниженні рН розчину?
24. Як зменшити афінитет кальцієвого хелатору до ліпідів та білків у розчині?
25. Який вплив на селективність і афінитет чинить кожна риса, що складає різницю у будові хелаторів двовалентних іонів  $\text{Ca}^{2+}$  та  $\text{Zn}^{2+}$ : «ВАРТА» та «FLUO-Zn3», призначених для роботи у водних розчинах, рН 7?
26. Який прийом використано у будові рецепторів катіонів  $\text{Ca}^{2+}$ ,  $\text{Mg}^{2+}$ ,  $\text{Zn}^{2+}$ ,  $\text{Na}^{+}$  та  $\text{K}^{+}$ , для зменшення їх чутливості до рН розчину?
27. Як зміниться афінитет і селективність коронандів до катіонів  $\text{Na}^{+}$  та  $\text{K}^{+}$  при переході від водних розчинів до метанольних? При переході від метанольних до ацетонітрильних? Пояснити причини змін.
28. Чому афінитет і селективність коронандів до катіонів  $\text{Na}^{+}$  та  $\text{K}^{+}$  вища, ніж у подандів?
29. Пояснити, за рахунок яких типів міжмолекулярних взаємодій тримається структура міцел і ліпосом? Які взаємодії вносять основний вклад?
30. Пояснити, за рахунок яких типів міжмолекулярних взаємодій тримається структура ДНК? Які взаємодії вносять основний вклад?
31. Чому переважна більшість пептидів у водних розчинах перебувають у конформації статистичної глобули, а у присутності етанолу, міцел чи ліпідних мембран приймають конформацію  $\alpha$ -спіралі?
32. Чому целюлоза утворює фібрилярні структури, а амілоза – спіральні?

### Контрольні запитання та завдання до частини 2:

1. Чим відрізняються розчини супермолекул від рідких організованих середовищ?
2. Яка природа гідратації великих органічних молекул у водних розчинах?
3. Охарактеризуйте природу гідрофобних взаємодій. Чому гідрофобні взаємодії відносять до універсальних?
4. Порівняйте енергію гідрофобного зв'язування з енергією зв'язків інших типів.
5. У чому вбачають особливості організованих супрамолекулярних середовищ?
6. Моделі для описання структури рідкої води, у чому специфіка?
7. У чому різниця та специфіка гідрофільної та гідрофобної гідратації розчинених речовин у водних розчинах?
8. Чи можна назвати цукор або оцтову кислоту поверхнево-активними речовинами? Охарактеризуйте структурно-молекулярні та функціональні ознаки ПАР.
9. Назвіть основні можливі критерії класифікацій ПАР. Наведіть приклади та охарактеризуйте властивості найбільш поширених катіонних, аніонних, неіонних, амфотерних, полімерних та високомолекулярних ПАР.
10. Що характеризує показник гідрофільно-ліпофільного балансу ПАР? Шкали ГЛБ?
11. Назвіть основні етапи організації систем та середовищ на основі ПАР.
12. Назвіть основні чинники впливу на критичну концентрацію міцелоутворення.
13. Дайте визначення точці (температурі) Крафта. Назвіть основні чинники впливу на цей показник.
14. У чому різниця діаграм розчинності іонних та неіонних ПАР?
15. Охарактеризуйте температуру помутніння розчинів неіонних ПАР.
16. Назвіть основні структурні форми міцелярних агрегатів при зміні концентрації ПАР.
17. Розміри, числа агрегації, полярність прямих та обернених міцел?
18. Природа  $\text{KKM}_2$ ,  $\text{KKM}_3$ , ....
19. Охарактеризуйте основні типи міцелярних агрегатів.
20. Охарактеризуйте основні чинники зміни форми міцел. Як природа молекули ПАР впливає

- на форму міцелярних агрегатів.
21. Чим відрізняються за ступенем дисперсності розчини високомолекулярних сполук і міцелярні розчини?
  22. Як зміна кислотності та добавки електролітів впливають на стан іонних, неіонних, амфолітних та високомолекулярних ПАР у розчинах?
  23. Охарактеризуйте будову дендримерів. Чому дендримери здатні до вибіркового зв'язування субстратів?
  24. Чим відрізняються за ступенем дисперсності розчини дендримерів і міцелярні розчини?
  25. Як різняться склад і компонентність емульсійних та мікроемульсійних систем?
  26. Як різняться стійкість та розмір крапель макро-, міні- та мікроемульсій?
  27. Чим зумовлене фазове розшарування у розчинах ПАР при зміні температури?
  28. Чому явище «помутніння» у розчинах ПАР при підвищенні температури обговорюють на прикладі неіонних ПАР?
  29. Як можна викликати (індукувати) фазоутворення у розчинах ПАР?
  30. У чому різниця структурної організації «класичних» міцел та плівок Ленгмюра-Блоджет?
  31. Як побудовані утворювані при зміні температури міцелярні макрофази?
  32. Охарактеризуйте техніку та процедуру створення плівок Ленгмюра-Блоджет.
  33. Чим різняться плівки Ленгмюра-Блоджет X, Y та Z- типів? Чим різняться техніка їх утворення?
  34. Чим зумовлена здатність організованих середовищ дифільних органічних молекул до вибіркового зв'язування субстратів?
  35. Дайте визначення солюбілізації. Інші тлумачення цього терміну?
  36. Охарактеризуйте можливу локалізація субстратів у міцелах.
  37. Охарактеризуйте полярність мікрооточення солюбілізованих субстратів.
  38. Як можна охарактеризувати солюбілізацію кількісно?
  39. Як солюбілізація в міцели впливає на властивості субстратів?
  40. Охарактеризуйте чинники впливу на солюбілізацію субстратів.
  41. Чому солюбілізація розглядається як «зелена» альтернатива екстракції органічними розчинниками?
  42. Чому кислотно-основні властивості органічних протолітів в організованих середовищах змінюються?
  43. Чим різняться хімізм зміни кислотно-основних властивостей органічних протолітів у до- та міцелярних розчинах?
  44. Як будуть змінюватись основні властивості ундециламіну у розчинах катіонних, аніонних та неіонних ПАР?
  45. Як будуть змінюватись протолітичні властивості ундеканової кислоти у розчинах катіонних, аніонних та неіонних ПАР?
  46. Чим різняться зміна протонодонорних властивостей мурашиної та стеаринової кислот у розчинах катіонних, неіонних та аніонних ПАР?
  47. Чим різняться зміна основних властивостей метиламіну та дециламіну у розчинах катіонних, неіонних та аніонних ПАР?
  48. У чому полягає диференційований вплив організованих середовищ на кислотно-основні властивості протолітів у залежності від їх гідрофобності? Використання явища.
  49. Чим зумовлена зміна швидкості хімічних реакцій в організованих середовищах?
  50. Охарактеризуйте основні чинники впливу організованих середовищ на швидкість хімічних реакцій.
  51. Охарактеризуйте склад та стійкість асоціатів органічних частинок у розчинах.
  52. Охарактеризуйте основні колоїдно-хімічні форми асоціатів реагентів з гідрофобними протиіонами у розчинах.
  53. Чим викликане утворення та визначається стійкість асоціатів органічних частинок у розчині?
  54. Чи підсилює електростатичне притягання гідрофобне зв'язування частинок у розчинах?

55. Чим зумовлений прояв ефектів «гість-хазяїн» при асоціації органічних частинок у розчинах?
56. Як змінюється стехіометрія комплексоутворення органічних реагентів з іонами металів в організованих середовищах?
57. У чому полягає «багатоцентровість» взаємодії полідентатних реагентів з іонами металів в організованих середовищах?
58. Як організовані середовища впливають на інтервал кислотності комплексоутворення органічних реагентів з іонами металів?
59. Як організовані середовища впливають на стійкість комплексів органічних реагентів з іонами металів?

### **Питання контрольної роботи 2**

1. Гідратація великих органічних молекул. Природа та енергія гідрофобних взаємодій.
2. Дифільні органічні молекули як структуроутворювачі організованих середовищ. Структурно-молекулярні та функціональні ознаки ПАР. Класифікації ПАР.
3. Типи ПАР, що використовують для створення організованих середовищ: представники та їх властивості.
4. Міцелоутворення у розчинах ПАР: критична концентрація міцелоутворення, фактори впливу, методи визначення; точка Крафта; температура помутніння розчинів ПАР.
5. Поліморфізм міцел, їх природа та будова.
6. Фазове розшарування у розчинах ПАР при зміні температури. Зв'язування органічних субстратів міцелярними макрофазами ПАР. Природа і використання міцелярно-екстракційних систем.
7. Плівки Ленгмюра-Блоджет: утворення, типи, природа, властивості, використання.
8. Прямі і обернені макро-, міні- та мікроемulsії: склад, стійкість, приготування, структура, властивості.
9. Стан розчинів високомолекулярних сполук; ізоелектрична точка амфолітних ВМС. Дендримери.
10. Закономірності і природа солюбілізації в організованих середовищах. Регулювання ефективності зв'язування субстратів при солюбілізації.
11. Кількісні характеристики солюбілізації. Локалізація субстратів у міцелах.
12. Кислотно-основні властивості органічних протолітів в організованих середовищах.
13. Диференціювання сили органічних протолітів в організованих середовищах у залежності від їх гідрофобності.
14. Швидкість хімічних реакцій в організованих середовищах. Міжфазний та міцелярний каталіз.
15. Асоціація у розчинах великих органічних молекул. Природа та стійкість гідрофобних асоціатів.
16. Комплексоутворення органічних реагентів з іонами металів в організованих середовищах: стехіометрія, природа та стійкість комплексів.
17. Багатоцентрова взаємодія полідентатних реагентів з іонами металів в організованих системах; активація комплексоутворення в кислих середовищах.
18. Організовані середовища у методах атомної спектроскопії.
19. Організовані середовища у методах молекулярної спектроскопії.
20. Організовані середовища у методах розділення, концентрування та хроматографії.
21. Що таке статичне гасіння флуоресценції? Формула залежності інтенсивності флуоресценції від концентрації гасія.
22. Що таке динамічне гасіння флуоресценції? Формула залежності інтенсивності флуоресценції від концентрації гасія.
23. Природа внутрішньомолекулярного фотоперенесення електрону та його прояв у фотохімічних властивостях барвників.



24. Природа внутрішньомолекулярного фотоперенесення заряду та його прояв у фотохімічних властивостях барвників.
25. Природа внутрішньомолекулярного фотоперенесення протону та його прояв у фотохімічних властивостях барвників.
26. Причини фотодисоціації органічних молекул.
27. Природа резонансного фотоперенесення енергії збудження та його прояв у фотохімічних властивостях барвників.
28. Природа агрегації молекул барвника та її прояв у фотохімічних властивостях барвників.
29. Означення ексимеру, H та J-агрегату. Навести приклади структур.
30. Означення ексиплексу. Навестим приклади структур.
31. Означення флуоресцентного зонду. Види флуоресцентних зондів.
32. Загальні принципи роботи флуоресцентного зонду.
33. Основні функціональні частини флуоресцентного зонду. Означення якоря, лінкера, рецептора аналіту, хромофора та флуорофора.

### **Питання на іспит**

1. Типи специфічних і неспецифічних міжмолекулярних взаємодій у конденсованій фазі та їх вплив на просторову організацію супермолекул.
2. Хелатори катіонів. Порівняльна характеристика селективності та стабільності їх комплексів. Вплив середовища на стабільність комплексу.
3. Коронанди та поданди. Порівняльна характеристика селективності та стабільності їх комплексів. Вплив середовища на стабільність комплексу.
4. Коронанди та криптанди. Порівняльна характеристика селективності та стабільності їх комплексів. Вплив середовища на стабільність комплексу.
5. Кавітанди, сферанди та карцеранди. Порівняльна характеристика селективності та стабільності їх комплексів. Вплив середовища на стабільність комплексу.
6. Порфірини та їх комплекси у хімії та біології.
7. Каліксарени і перспективи їх практичного використання.
8. Фулерени і перспективи їх практичного використання.
9. Дендримери та їх практичне використання.
10. Циклодекстрини та їх практичне використання.
11. Куркубітурили та їх практичне використання.
12. Водні клатрати, їх просторова будова та практичне використання. Інші сполуки включення.
13. Склад і просторова будова рибонуклеїнових та дезоксирибонуклеїнових кислот. Вплив середовища на просторову структуру РНК та ДНК.
14. Просторові структури, що утворюють протеїни. Вплив середовища на просторову структуру протеїнів.
15. Протеїн-нуклеїнові кислоти (ПНК) та елементи їх просторової будови.
16. «Щільні» та «впорядковані» водні кластери. Гідратація органічних молекул у розчинах.
17. Хімічна та просторова комплементарність компонентів у супрамолекулярному комплексі. Приклади.
18. Конформаційна обмеженість і структурна жорсткість молекул, їх вплив на селективність взаємодії та міцність супрамолекулярного комплексу.
19. Конформаційно обмежені супермолекули та субстрати у хімії та біології.
20. Молекулярне розпізнавання і його характеристики.
21. Застосування ядерного магнітного резонанса для детекції супрамолекулярних взаємодій у розчинах та твердій фазі.
22. Застосування флуориметрії для детекції супрамолекулярних взаємодій у розчинах.
23. Застосування спектрофотометрії для детекції супрамолекулярних взаємодій у розчинах.
24. Флуоресцентні молекули та супрамолекулярні комплекси. Основні ознаки їх просторової та електронної будови.
25. Флуоресцентні кальцієві індикатори та принципи їх роботи.

26. Флуоресцентні індикатори рН та принципи їх роботи.
27. Флуоресцентні індикатори аніонів хлору та принципи їх роботи.
28. Флуоресцентні індикатори катіонних детергентів та принципи їх роботи.
29. Флуоресцентні індикатори катіонів цинку та принципи їх роботи.
30. Флуоресцентні індикатори катіонів лужних металів та принципи їх роботи.
31. Динамічне та статичне гасіння флуоресценції?
32. Природа міжмолекулярного фотоперенесення електрону та їх прояв у фотохімічних властивостях барвників.
33. Природа внутрішньомолекулярного фотоперенесення електрону та їх прояв у фотохімічних властивостях барвників.
34. Природа внутрішньомолекулярного фотоперенесення заряду та його прояв у фотохімічних властивостях барвників.
35. Явища сольватохромії і сольватофлуорохромії та їх природа.
36. Природа внутрішньомолекулярного фотоперенесення протону та його прояв у фотохімічних властивостях барвників.
37. Фотодисоціація органічних молекул та їх комплексів з катіонами металів.
38. Природа резонансного фотоперенесення енергії збудження та його прояв у фотохімічних властивостях барвників.
39. Молекулярні антени. Суперсвітіння та супергасіння.
40. Молекулярні маяки (molecular beacons) та принципи їх роботи.
41. Природа агрегації молекул барвника та її прояв у фотохімічних властивостях барвників.
42. Флуоресцентні ексимери та їх природа.
43. Флуоресцентні ексиплекси та їх природа.
44. Означення флуоресцентного зонду, його основні функціональні частини та принцип дії.
45. Гідратація великих органічних молекул. Природа та енергія гідрофобних взаємодій.
46. Дифільні органічні молекули як структуроутворювачі організованих середовищ. Структурно-молекулярні та функціональні ознаки ПАР. Класифікації ПАР.
47. Типи ПАР, що використовують для створення організованих середовищ: основні представники та їх властивості.
48. Міцелоутворення у розчинах ПАР: ККМ, фактори впливу, методи визначення; точка Крафта; температура помутніння розчинів ПАР.
49. Поліморфізм міцел, їх природа та будова.
50. Плівки Ленгмюра-Блоджет: утворення, типи, природа, властивості, використання.
51. Прямі і обернені макро-, міні- та мікроемульсії: склад, стійкість, приготування, структура, властивості, використання.
52. Організація розчинів високомолекулярних сполук; ізоелектрична точка амфолітичних ВМС. Дендримери.
53. Закономірності і природа сольобілізації в організованих середовищах. Кількісні характеристики; локалізація субстратів у міцелах; регулювання зв'язування субстратів при сольобілізації.
54. Кислотно-основні властивості органічних протолітів в організованих середовищах. Диференціювання сили сольобілізованих протолітів у залежності від їх гідрофобності.
55. Швидкість хімічних реакцій в організованих середовищах. Міжфазний та міцелярний каталіз.
56. Асоціація у розчинах великих органічних молекул. Природа та стійкість гідрофобних асоціатів.
57. Комплексоутворення органічних реагентів з іонами металів в організованих середовищах: стехіометрія, природа та стійкість комплексів.
58. Багатоцентрова взаємодія полідентатних реагентів з іонами металів в організованих системах; активація комплексоутворення в кислих середовищах.
59. Організовані середовища у методах атомної спектроскопії.
60. Організовані середовища у методах молекулярної спектроскопії.