

БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

УТВЕРЖДАЮ

Ректор Белорусского
государственного университета

А.Д.Король



23 мая 2025 г.

Регистрационный № 3087/м.

ОСНОВЫ СУПРАМОЛЕКУЛЯРНОЙ ХИМИИ

Учебная программа учреждения образования по учебной дисциплине для
специальности:

7-06-0531-01 Химия

Профилизация: Хемоинформатика

2025 г.

Учебная программа составлена на основе ОСВО 7-06-0531-01-2023, учебного плана № М44с-5.5-43/уч. от 23.05.2025.

СОСТАВИТЕЛЬ:

А.В.Зураев, декан, доцент кафедры общей химии и методики преподавания химии химического факультета Белорусского государственного университета, кандидат химических наук, доцент.

РЕЦЕНЗЕНТЫ:

Я.В.Диченко, ведущий научный сотрудник лаборатории белковой инженерии Государственного научного учреждения «Институт биоорганической химии Национальной академии наук Беларуси», кандидат химических наук, доцент.

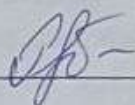
Е.В.Гринюк, директор Учреждения Белорусского государственного университета «Научно-исследовательский институт физико-химических проблем», кандидат химических наук, доцент.

РЕКОМЕНДОВАНА К УТВЕРЖДЕНИЮ:

Кафедрой общей химии и методики преподавания химии БГУ
(протокол № 12 от 22.05.2025)

Научно-методическим советом БГУ
(протокол № 10 от 22.05.2025)

Заведующий кафедрой



С.М.Рабчинский



Т.В.Ковальчук-Рабчинская

ПОЯСНИТЕЛЬНАЯ ЗАПИСКА

Цели и задачи учебной дисциплины

Цель учебной дисциплины – освоение дисциплины «О супрамолекулярной химии» позволит студентам сформировать представление об основных разделах данной научной области с акцентом на разработке методов получения синтетических молекулярных рецепторов, а также перспективах их практического применения в конструировании молекулярных устройств.

Задачи учебной дисциплины:

1. Изучение основных видов межмолекулярных взаимодействий, основных закономерностей их возникновения;
2. Изучение систем типа «рецептор-субстрат» и процессов, положенных в основу молекулярного распознавания;
3. Изучение принципов использования межмолекулярных взаимодействий в конструировании молекулярных рецепторов;
4. Изучение типов молекулярных рецепторов и областей их потенциального применения;

Место учебной дисциплины в системе подготовки специалиста с высшим образованием.

Учебная дисциплина относится к модулю «Современные направления химической науки» компонента учреждения образования.

Связи с другими учебными дисциплинами, включая учебные дисциплины компонента учреждения высшего образования, дисциплины специализации и др.

Требования к компетенциям

Освоение учебной дисциплины «Основы супрамолекулярной химии» должно обеспечить формирование следующих компетенций:

Специализированные компетенции:

Использовать знания в области механизмов хранения, передачи и реализации генетической информации, строения и функций сложных высокомолекулярных соединений, составляющих клетку, для решения практических задач хемоинформатики;

Ориентироваться в системе современных знаний о строении химических веществ в рамках образования на их основе сложных супрамолекулярных ансамблей и агрегатов, определяющих разнообразие биологических систем и процессов; анализировать временную динамику сложных химических систем и прогнозировать их свойства;

Владеть представлениями об основных механизмах действия природных и синтетических молекулярных машин, способах их практического применения в области биохимии и наномеханике.

В результате освоения учебной дисциплины студент должен:

знать:

- основные концепции супрамолекулярной химии;
- типы нековалентных взаимодействий;
- методы исследования супрамолекулярных систем;
- основные подходы к синтезу молекулярных рецепторов;

теоретические основы методов конструирования молекулярных устройств синтетической и биологической природы;

уметь:

теоретически оценить возможность образования комплексов типа «гость-хозяин» для выбранной пары соединений используя параметры химических структур, а также данные о геометрии взаимного расположения функциональных групп;

владеть:

терминологическим аппаратом супрамолекулярной химии;
навыками поисковой работы в базах структурных данных;
методами теоретического исследования процессов самосборки и самоорганизации в химии и биологии.

Структура учебной дисциплины

Дисциплина изучается в 2 семестре. В соответствии с учебным планом всего на изучение учебной дисциплины «Основы супрамолекулярной химии» отведено **для очной формы** получения высшего образования – 198 часов, в том числе 66 аудиторных часов, лекции – 38 часов, практических занятий – 24 часа, семинарских занятий – 4 часа. **Из них:**

– лекции – 38 часов, практические занятия – 24 часа,, управляемая самостоятельная работа (УСР) – 4 часа.

Трудоемкость учебной дисциплины составляет 6 зачетные единицы.

Форма промежуточной аттестации – экзамен.

СОДЕРЖАНИЕ УЧЕБНОГО МАТЕРИАЛА

Раздел 1 Основные концепции и терминология супрамолекулярной химии

Тема 1.1 Предмет супрамолекулярной химии. Терминологическая система супрамолекулярной химии и ее связь с другими научными дисциплинами

Супрамолекулярная химия как область науки, которая занимается изучением систем, состоящих из ансамблей молекул и ионов, удерживаемых вместе нековалентными взаимодействиями. Предметы молекулярной и супрамолекулярной химии. Понятия: супермолекула, супрамолекулярное приближение, супраструктура, процесс молекулярного распознавания, супрамолекулярный реагент, носитель субстрата и перенос субстрата. Основные функции супрамолекулярных объектов. Взаимосвязь супрамолекулярной химии и наук о живом. Современные разделы супрамолекулярной химии, как научной области, посвященной изучению взаимодействий типа «гость-хозяин». Химия самопроцессов как область супрамолекулярной химии, представленная в виде разделов, посвященных изучению процессов самосборки и самоорганизации. Основные характеристики, положенные в основу описания супрамолекулярных ансамблей.

Тема 1.2 Типы нековалентных взаимодействий и методы исследования супрамолекулярных соединений

Виды нековалентных взаимодействий: ион-ионные взаимодействия; ион-дипольные взаимодействия; водородная и галогенная связи; халькогенная, пниктогенная и тетрельная связи; вандерваальсово взаимодействие; стэкинговые взаимодействия; гидрофобные взаимодействия. Теоретические методы исследования супрамолекулярных структур. Физические методы исследования супрамолекулярных соединений.

Раздел 2 Супрамолекулярные системы типа «рецептор-субстрат». Процессы молекулярного распознавания

Тема 2.1 Супрамолекулярные системы типа «рецептор-субстрат». Понятие о «распознавании» и «информации»

Концепции, положенные в основу супрамолекулярных систем типа «рецептор-субстрат». Понятие о клатратах, клатрандах и кавитандах. Классификация систем типа «рецептор-субстрат» в соответствии с типами нековалентных взаимодействий, реализующихся между рецептором и субстратом. Введение понятий о процессах распознавания и о «информации», считываемой в процессе селективного связывания молекул рецептора и субстрата.

Тема 2.2 Хелатный и макроциклический эффекты. Комплементарность и предорганизация

Понятие о хелатном эффекте, правило циклов Л.А.Чугаева. Количественная мера хелатного эффекта. Термодинамическая составляющая

хелатного эффекта, понятие о кратической энтропии. Объяснение принципов формирования макроциклических супрамолекулярных систем с позиции хелатного эффекта. Понятие о макроциклическом эффекте. Влияние стерических факторов на стабильность, кинетику образования и диссоциацию «рецептор-субстратного» комплекса. Термодинамическая составляющая макроциклического эффекта, понятие о макробициклическом эффекте.

Условия образования супрамолекулы (комплекса), понятие о комплементарности и «плеромерах». Понятие о предорганизации рецептора, рассмотрение стадий процесса взаимодействия молекул рецептора и субстрата.

Тема 2.3 Молекулярные рецепторы: типы распознавания

Понятие о молекулярном рецепторе. Классификация молекулярных рецепторов. Понятие о размерности, порядке цикла и связности молекулярных рецепторов.

Типы распознавания субстрата молекулярным рецептором: сферическое распознавание; тетраэдрическое распознавание; распознавание нейтральных молекул.

Раздел 3 Межмолекулярные взаимодействия в синтезе молекулярных рецепторов

Тема 3.1 Темплатный синтез. Темплатный эффект

Понятие о темплатном синтезе как о процессе комплексообразования. Понятие о лигсоне, темплате, хеланте и макроциклическом соединении. Темплатный эффект. Понятие о термодинамическом и кинетическом темплатном эффектах. Реализация термодинамического и кинетического темплатного эффектов в биологических системах.

Тема 3.2 Анион-темплатный синтез

Использование анионов в качестве темплатов для синтеза новых молекулярных рецепторов. Классификация процессов анион-темплатной сборки в соответствии с типом участвующих в них анионов. Анион-темплатный синтез, контролируемый галогенид-анионами. Анион-темплатный синтез, контролируемый окси-анионами, понятие о спейсере. Анион-темплатный синтез, контролируемый слабо координирующимися фторсодержащими анионами. Направленный синтез под действием водородных связей, понятие о реакциях автотемплатной циклизации.

Раздел 4 Молекулярные рецепторы

Тема 4.1 Соединения типа краун-эфиров, сферанды

Краун-эфиры и краун-соединения: сходства и отличия. Понятие о криптандах, подандах и лариат-эфирах. Особенности номенклатуры краун-соединений, рассмотрение номенклатуры Педерсена и ее усовершенствованной формы. Методы получения краун-соединений. Применение краун-эфиров для решения задач современной аналитической химии. Криптанды: особенности номенклатуры и методов получения. Поданды: особенности номенклатуры и

методы получения. Принцип концевой группы как эффективный подход к конструированию открытоцепных краун-соединений. Понятие об олигоподандах. Лариат-эфиры: особенности номенклатуры и методов получения. Подандный фрагмент как фактор возникновения эффекта дополнительной стабилизации в процессах комплексообразования.

Сферанды и прочие молекулы «хозяева». Особенности строения.

Тема 4.2 Циклодекстрины, каликс[n]арены и кукурбит[n]урилы

Циклодекстрины как представители класса кавитандов. Номенклатура циклодекстринов. Основные представители циклодекстринов и их свойства. Методы получения циклодекстринов. Соединения включения циклодекстринов клеточного и канального типов. Использование циклодекстринов в пищевой и фармацевтической промышленности.

Каликс[n]арены как молекулярные рецепторы органической природы. Строение и номенклатура каликс[n]аренов по ИЮПАК и Д.Гютше. Типы инверсии каликс[n]аренов. Классификация каликс[n]аренов в соответствии с их конформационной мобильностью. Неконвергентный метод синтеза каликс[n]аренов. Особенности связывания субстратов каликс[n]ареновых рецепторов. Методы [3+1] и [2+2] конвергентного синтеза каликс[n]аренов. Понятие о виологенах и их комплексов. Применение каликс[n]аренов в процессах фермент-чувствительной амфифильной самоорганизации.

Кукурбит[n]урилы как молекулярные рецепторы органической природы. Особенности строения кукурбит[n]урилов. Получение кукурбит[n]урилов.

Тема 4.3 Катенаны, ротаксаны и дендримеры

Понятие о механически сцепленных молекулах. Особенности строения в соответствии с различиями в механическом соединении сцепленных фрагментов. Классификация ротаксанов и катенанов в соответствии с их топологией.

Понятие о дендримерах как об уникальном классе монодисперсных высокоразветвленных макромолекул. Строение и особенности номенклатуры. Синтез дендримеров: дивергентная и конвергентная стратегии. Применение дендримеров в промышленности и материаловедении.

Раздел 5 Молекулярные машины

Тема 5.1 Понятия о молекулярных машинах

Молекулярные машины как структурно организованные ансамбли. Понятия о синтетических и биологических молекулярных машинах.

Тема 5.2 Биологические молекулярные машины

Основные задачи, которые достигаются с помощью биологических молекулярных машин. F_1 -АТФ-синтаза как ротационный двигатель. Строение F_0F_1 -АТФазы/АТФ-синтазы. Строение F_1 -комплекса. Каталитическое действие АТФ-синтазы посредством механизма изменения селективности активных центров.

Белки как линейные моторы: миозин. Понятие об актине и миозине как об основных элементах мышечной ткани.

Биосинтез белковых структур. Рибосома и ее строение. Особенности процесса биосинтеза белковых структур.

Тема 5.3 Синтетические молекулярные машины

Синтез катенанов и ротаксанов по методу Ж.-П.Соважа, понятие о трансляционной изомерии. Электрохимическое инициирование топологического сцепления. Молекулярный шаттл: принципы работы под действием химического или электрохимического управления. Принцип работы ротаксана Дж.Ф.Стоддарта. Понятие о ротаксановых мышечных волокнах и молекулярных лифтах. Молекулярные пропеллеры и молекулярные моторы. Моторный компонент, способный к фотоизомеризации.

УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКАЯ КАРТА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Очная (дневная) форма получения высшего образования с применением дистанционных образовательных технологий (ДОТ)

Номер раздела, темы	Название раздела, темы	Количество аудиторных часов					Количество часов УСР	Форма контроля
		Лекции	Практические занятия	Семинарские занятия	Лабораторные занятия	Иное		
1	2	3	4	5	6	7	8	9
1	Основные концепции и терминология супрамолекулярной химии							
1.1	Предмет супрамолекулярной химии. Терминологическая система супрамолекулярной химии и ее связь с другими научными дисциплинами	2						Устный опрос
1.2	Типы нековалентных взаимодействий и методы исследования супрамолекулярных соединений	4	4					Тестовые задания
2	Супрамолекулярные системы типа «рецептор-субстрат». Процессы молекулярного распознавания							

2.1	Супрамолекулярные системы типа «рецептор-субстрат». Понятие о «распознавании» и «информации»	2						Устный опрос
2.2	Хелатный и макроциклический эффекты. Комплементарность и предорганизация	4						Устный опрос, реферат
2.3	Молекулярные рецепторы: типы распознавания	4	4				2	Тестовые задания, контрольная работа
3	Межмолекулярные взаимодействия в синтезе молекулярных рецепторов							
3.1	Темплатный синтез. Темплатный эффект	2						Устный опрос
3.2	Анион-темплатный синтез	2	4					Тестовые задания
4	Молекулярные рецепторы							
4.1	Соединения типа краун-эфиров, сферанды	4						Устный опрос
4.2	Циклодекстрины, каликс[<i>n</i>]арены и кукурбит[<i>n</i>]урилы	4	4					Устный опрос, реферат
4.3	Катенаны, ротаксаны и дендримеры	4	4				2	Тестовые задания, контрольная работа
5	Молекулярные машины							

5.1	Понятия о молекулярных машинах	2						Устный опрос
5.2	Биологические молекулярные машины	2						Устный опрос, реферат
5.3	Синтетические молекулярные машины	2	4					Тестовые задания
		38	24				4	

ИНФОРМАЦИОННО-МЕТОДИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ

Основная литература

1. Зураев, А. В. Супрамолекулярная химия : учеб. пособие / А. В. Зураев. – Минск : БГУ, 2024. – 175 с. : ил.
2. Зураев, А. В. Супрамолекулярная химия: основные понятия и концепции : пособие / А. В. Зураев. – Минск : БГУ, 2022. – 151 с. : ил.

Дополнительная литература

1. Диченко, Я. В. Компьютерное моделирование строения и реакционной способности молекул / Я. В. Диченко. – Минск : Беларуская навука, 2023. – 137 с.
2. Das, A. K. An Introduction to Supramolecular Chemistry / A. K. Das, M. Das. – CBS Publishers and Distributors Pvt Ltd, 2020. – 197 p.
3. Baruah, J. B. Principles and advances in supramolecular catalysis / J. B. Baruah. – Boca Raton : CRC Press, 2019. – 226 p.
4. Metallomacrocycles: From Structure to Applications / ed.: H. -B. Yang. – 1st ed. – Croydon : RSC Publishing, 2019. – 290 p.
5. Intermolecular Interactions in Crystals: Fundamentals of Crystal Engineering / ed.: J. J. Novoa. – 1st ed. – Croydon : RSC Publishing, 2017. – 764 p.

Перечень рекомендуемых средств диагностики и методика формирования итоговой отметки

Для диагностики компетенций могут использоваться следующие средства текущей аттестации: контрольная работа; тест; устный опрос на аудиторных занятиях; реферат.

Формой промежуточной аттестации по дисциплине «Основы супрамолекулярной химии» учебным планом предусмотрен экзамен.

Для формирования итоговой отметки по учебной дисциплине используется модульно-рейтинговая система оценки знаний студента, дающая возможность проследить и оценить динамику процесса достижения целей обучения. Рейтинговая система предусматривает использование весовых коэффициентов для текущей и промежуточной аттестации студентов по учебной дисциплине.

Формирование итоговой отметки в ходе проведения контрольных мероприятий текущей аттестации (примерные весовые коэффициенты, определяющие вклад текущей аттестации в отметку при прохождении промежуточной аттестации):

Пример заполнения

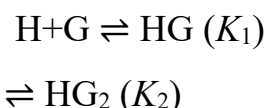
- ответы на семинарских занятиях – 15 %;
- подготовка реферата – 15 %;
- выполнение теста – 25 %;
- написание контрольной работы – 45%.

Итоговая отметка по дисциплине рассчитывается на основе итоговой отметки текущей аттестации (модульно-рейтинговой системы оценки знаний) 40 % и экзаменационной отметки – 60%.

Примерный перечень заданий для управляемой самостоятельной работы

Тема 2. Супрамолекулярные системы типа «рецептор-субстрат». Процессы молекулярного распознавания (2 ч)

Рассмотрите следующие равновесные процессы образования комплекса типа «хозяин-гость» со стехиометрией (1:2):



а) Выразите константы равновесия K_1 и K_2 через концентрации «хозяина» (H), «гостя» (G), комплексов типа «хозяин-гость» со стехиометрией 1:1 (HG), и стехиометрией 1:2 (HG₂).

б) Докажите, что $K_2 = [\text{HG}_2] / K_1 [\text{H}] [\text{G}]^2$.

в) Используя выражения полученные в пунктах а) и б), выведите

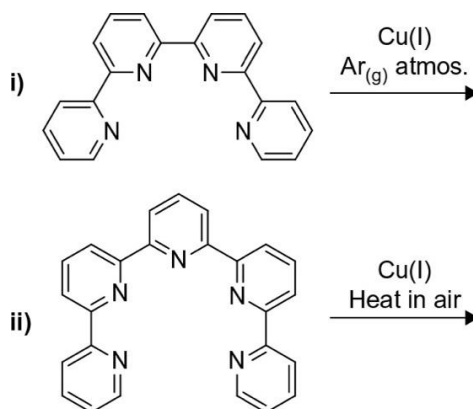
В
Ы
Р
А
Ж

(Форма контроля – решение задач на образовательном портале).

Тема 3. Межмолекулярные взаимодействия в синтезе молекулярных рецепторов (2 ч)

а) Учитывая принцип максимального заполнения координационной сферы и координационные способности ионов меди, предскажите результаты следующих реакций самосборки (обратите внимание на разные условия проведения реакций):

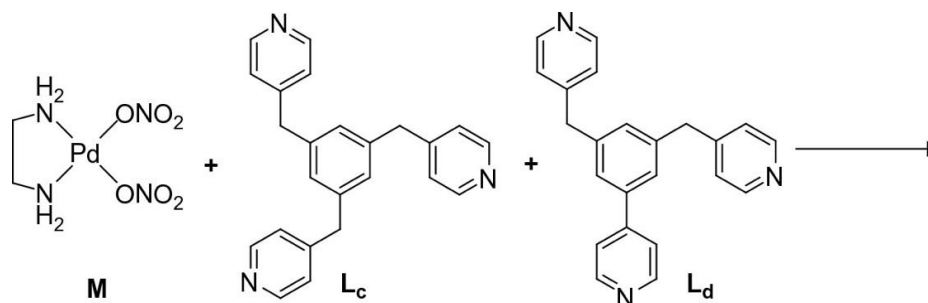
Я
О
Б
Щ
Е
Й



К
О
Н
С
Т
А
Н
Т

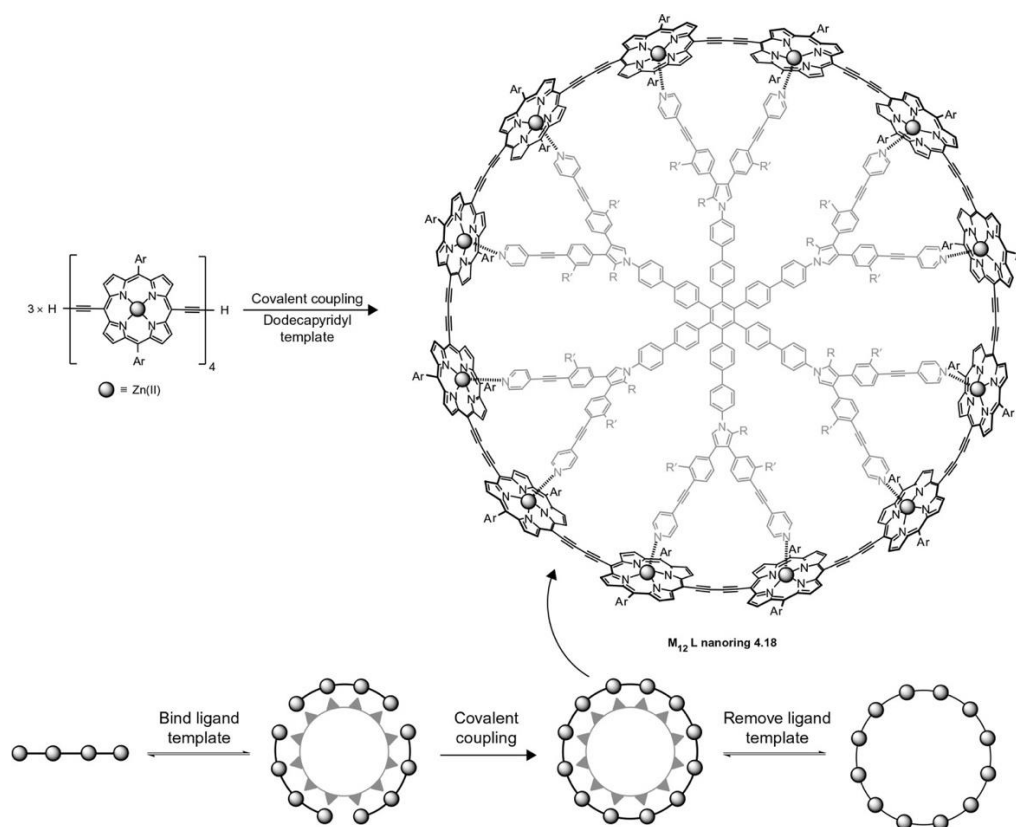
Являются ли какие-то из продуктов хиральными? Ответ обоснуйте.

б) Сколько различных соединений клеточного типа M_3L_2 может быть получено посредством самосборки лигандов L_c и L_d с Pd(II)-содержащим комплексом M (структура M представлена ниже)?



Предложите способ, которым можно сместить равновесие в пользу образования одной клетки над другими? (Подсказка: нитратные лиганды лабильны).

в) Предложите альтернативный темплат для синтеза ниже представленного наноразмерного кольца (*nanoring*) используя предложенные на схеме исходные материалы.



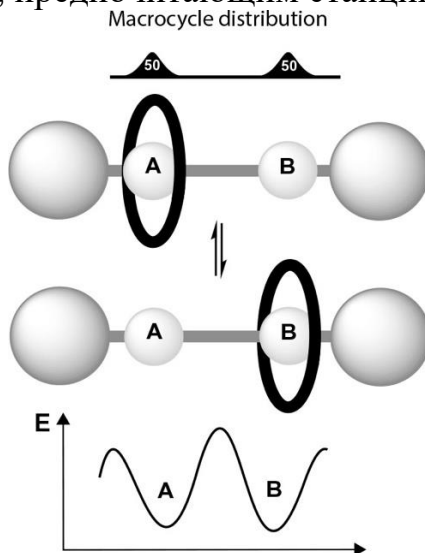
(Форма контроля – решение задач на образовательном портале).

Тема 4. Межмолекулярные взаимодействия в синтезе молекулярных рецепторов (2 ч)

а) Схематически изобразите и назовите три типа движения, реализация которых доступна для макроциклического кольца, находящегося на

молекулярной оси. Как два наиболее распространенных типа движения связаны друг с другом в [2]катенане?

б) Профиль потенциальной энергии для бистабильного [2] ротаксана, приведенного ниже, указывает на то, что он представляет собой вырожденный молекулярный челнок. Изобразите профиль потенциальной энергии для сценария, в котором данный [2]ротаксан будет являться невырожденным молекулярным челноком, предпочитающим станцию **A**.



в) В невырожденном сценарии ко-конформационное предпочтение [2]ротаксана-челнока переключается на станцию **B** за счет кооперативного связывания гостя, возникающего между молекулой макроцикла и осью. Как данное изменение отразится на виде диаграммы потенциальной энергии? Что можно сказать о влиянии связывания гостя на кинетику движения челнока на основе [2]ротаксана (при постоянной температуре)?

г) Какие другие внешние воздействия могут использоваться для инициирования ко-конформационного переключения в [2]ротаксанах-челноках? Как это изменение ко-конформации можно:

- детектировать,
- количественно оценить?

д) Каким образом можно превратить [2]ротаксан-переключатель в молекулярный мотор?

Примерная тематика семинарских занятий

1. Типы нековалентных взаимодействий, положенные в основу образования супрамолекулярных систем.
2. Типы молекулярных рецепторов и процессы молекулярного распознавания.

3. Темплатный синтез.
4. Особенности синтеза молекулярных рецепторов.
5. Механически сцепленные молекулы: особенности строения и методов получения.
6. Перспективы применения молекулярных устройств синтетической и биологической природы.

Описание инновационных подходов и методов к преподаванию учебной дисциплины

При организации образовательного процесса используются *эвристический подход и метод учебной дискуссии*, которые предполагают:

- демонстрацию многообразия супрамолекулярных соединений через призму реакционной способности формирующих его молекулярных тектонов;
- индивидуализацию обучения через возможность самостоятельного выбора образовательной траектории в процессе изучения материалов курса, осуществлять рефлекссию собственной образовательной деятельности;
- участие студентов в целенаправленном обмене мнениями по этическим вопросам внедрения супрамолекулярных систем, в частности молекулярных машин, в жизнедеятельность человека и/или животных.

Методические рекомендации по организации самостоятельной работы

При изучении учебной дисциплины рекомендуется использовать следующие формы самостоятельной работы:

- поиск и обзор литературы и электронных источников по заданной проблеме курса;
- выполнение домашнего задания;
- решение задач, предлагаемых на семинарских занятиях;
- подготовка к семинарским занятиям.

Примерный перечень вопросов к зачету

1. Какие виды взаимодействий называют нековалентными?
2. Какие методы активации ковалентных связей нековалентными взаимодействиями вам известны? Приведите примеры.
3. Что такое комплементарность?
4. Дайте определение краун-эфирам и приведите их классификацию.
5. От каких факторов зависит устойчивость комплексов внедрения краун-эфиров с катионами металлов и где это свойство находит применение?
6. Какие соединения называют антикраунами, приведите их строение?
7. Дайте определение понятию поданды.
8. Создание жестких трехмерных структур молекул «хозяина» – сферандов.
9. Дайте определение лариат-эфирам.
10. Дайте определение кавитандам. В чем заключается их специфичность?

11. Охарактеризуйте соединения включения, образуемые циклодекстринами. Каков их состав?
12. Какой метод можно использовать для определения констант устойчивости соединений включения циклодекстринов?
13. Строение каликс[*n*]аренов, мобильность их структур.
14. На чем основана способность кукурбитурилов образовывать высокоупорядоченные материалы с большими каналами, размеры и форму которых можно контролировать?
15. Образование кукурбитурилами трехъядерных кластеров с некоторыми металлами, их применение. Каково пространственное строение этих соединений?
16. Какие кристаллы могут быть построены на водородных связях?
17. В чем заключается концепция супрамолекулярного синтона?
18. Объясните суть термина «самосборка».
19. Что такое темплатный синтез, лигандный синтон и темплатный центр, хелант?
20. Какие варианты самосборки в биологических системах вам известны? Опишите их.
21. Какие биологические «молекулярные машины» вы знаете?
22. Что вкладывают ученые в понятие «молекулярный робот»?

ПРОТОКОЛ СОГЛАСОВАНИЯ УЧЕБНОЙ ПРОГРАММЫ УО

Название учебной дисциплины, с которой требуется согласование	Название кафедры	Предложения об изменениях в содержании учебной программы учреждения высшего образования по учебной дисциплине	Решение, принятое кафедрой, разработавшей учебную программу (с указанием даты и номера протокола)
Учебная дисциплина не требует согласования			

Заведующий кафедрой общей химии и методики преподавания химии, к.х.н, доцент



С.М.Рабчинский

22.05.2025

ДОПОЛНЕНИЯ И ИЗМЕНЕНИЯ К УЧЕБНОЙ ПРОГРАММЕ УО

на ____ / ____ учебный год

№ п/п	Дополнения и изменения	Основание

Учебная программа пересмотрена и одобрена на заседании кафедры
_____ (протокол № ____ от _____ 202_ г.)

Заведующий кафедрой

УТВЕРЖДАЮ

Декан факультета
