

**НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ  
ІНСТИТУТ ОРГАНІЧНОЇ ХІМІЇ**

**ЗАТВЕРДЖЕНО**

Вченою радою

Інституту органічної хімії НАН України  
протокол № 18

від « 07 » 12 2020 року



Голова Вченої ради  
органічної хімії НАН України

акад. В.І. Кальченко

(підпис)

07 12 2020 р.

**РОБОЧА ПРОГРАМА З ДИСЦИПЛІНИ  
«СУПРАМОЛЕКУЛЯРНА ХІМІЯ»**

**для аспірантів третього науково-освітнього рівня  
спеціальності 102-«Хімія», спеціалізація «Органічна хімія»,  
галузь знань 10 – природничі науки**

**Число кредитів ЄКТС – 4 (120 год.)**

**Лекцій – 26 годин**

**Практичних занять – 30 годин**

**Самостійна робота – 60 годин**

**Консультації – 4 годин**

**Форма контролю знань – залік**

**Київ - 2020**

Робоча програма з дисципліни «Супрамолекулярна хімія» за спеціальністю 102 – хімія, галузь знань 10 – природничі науки для аспірантів третього науково-освітнього рівня

„01” 12, 2020 р. 27 с.

**Розробники:**

Р.В.Родік, к.х.н., зав. лабораторією



(підпис)

О.А.Єсипенко, к.х.н., ст. дослідник



(підпис)

С.О.Черенок, к.х.н., ст. дослідник



(підпис)

Програму затверджено на засіданні Вченої ради

Інституту органічної хімії НАН України

протокол № 18

від « 07 » 12 2020 року

Вчений секретар

к.х.н.

 В.С. Нікітченко

© Р.В.Родік, 2020 р.

© О.А.Єсипенко, 2020 р.

© С.О.Черенок, 2020 р.

## ПЕРЕДМОВА

Навчальна дисципліна «Супрамолекулярна хімія» є важливим елементом у підготовці фахівців в галузі хімії, яка входить в цикл професійної підготовки аспірантів. Супрамолекулярна хімія є новою галуззю науки, яка вивчає молекулярні системи, організовані із залученням селективних нековалентних взаємодій. В той час як молекулярна хімія оперує ковалентними зв'язками, супрамолекулярна хімія за визначення її фундатора нобелівського лауреата Жан-Марі Лена – це «хімія за межами молекули». Її мета – здобути контроль над міжмолекулярними нековалентними взаємодіями. Супрамолекулярна хімія пов'язана зі складнішими утвореннями, ніж окремі молекули, а саме з супрамолекулярними ансамблями, що утримуються разом за рахунок міжмолекулярних нековалентних взаємодій. Це трансдисциплінарна галузь знання, що поєднує науку і технологію та перекидає містки від хімії до біології та фізики. Принципи супрамолекулярної хімії покладено в основу створення багатьох сучасних нанотехнологій. Супрамолекулярна хімія є ключем до вирішення одного з найважливіших питань, що стоять перед нанотехнологією, а саме – як змусити молекули групуватися заданим способом, самоорганізовуватися, щоб у підсумку створити нові матеріали з оригінальними властивостями. Здатність до розпізнавання субстратів і утворення з ними супрамолекулярних комплексів є основою її широкого застосування в біології, хімії, фізиці, органічному матеріалознавстві, а також в нанотехнологіях.

Програма навчальної дисципліни складається з трьох змістовних модулів:

1. Супрамолекулярна хімія: основні поняття та типи сполук .
2. Методи синтезу та функціоналізації макроциклічних сполук.
3. Супрамолекулярні системи: практичний аспект використання.

**Міждисциплінарні зв'язки.** Навчальна дисципліна «Супрамолекулярна хімія» є однією з вибіркових, яка входить до дисциплін професійної підготовки. Даний курс вивчається аспірантами протягом VI семестра та третього навчального року.

## **1. Мета та завдання навчальної дисципліни**

**1.1. Метою** дисципліни є вивчення аспірантами із молекулярними системами, організованих із залученням селективних нековалентних

**1.2. Завданням** дисципліни є розвиток теоретичних уявлень про природу невалентних зв'язків в супрамолекулярних сполуках, особливостях їх будови, рецепторної здатності та основних напрямів практичного застосування.

### **1.3. Очікувані результати навчання**

#### ***Знати та розуміти:***

- історію становлення та розвитку супрамолекулярної хімії як науки, та її генетичний зв'язок з класичними розділами хімії, фізики, біології, матеріалознавства, нанотехнологій;
- типи невалентних взаємодій та принципи побудови супрамолекулярних систем на їх основі;
- типи та роль макроциклічних сполук, як суб'єктів супрамолекулярної хімії;
- основні методи синтезу макроциклічних сполук як скафолдів для конструювання супрамолекулярних систем;
- молекулярна будова, стереохімія та фізико-хімічні властивості макроциклічних сполук – прекурсорів в синтезі супрамолекулярних ансамблів та систем;
- основні принципи дизайну селективних супрамолекулярних рецепторів катіонів, аніонів, газів, органічних молекул, біомолекул та біомакромолекул на основі макроциклічних сполук;
- фосфоровмісні макроциклічні сполуки як скафолдів для конструювання супрамолекулярних систем;

- хіральні макроциклічні сполуки для супрамолекулярної анантіодискримінації оптично активних молекул;
- процеси самозбірки макроциклічних сполук в супрамолекулярні ансамблі дискретної будови;
- біологічно-активні макроциклічні сполуки;
- застосування супрамолекулярних макроциклічних сполук в Material Science;
- застосування супрамолекулярних макроциклічних сполук в Life Science;
- застосування супрамолекулярних макроциклічних сполук в нанотехнологіях;

***Вміти:***

- планувати синтез супрамолекулярних макроциклічних сполук різних типів;
- аналізувати структуру та фізико-хімічні властивості супрамолекулярних сполук з використанням сучасних фізико-хімічних методів;
- використовувати знання з супрамолекулярної хімії в суміжних дисциплінах;
- ефективно планувати використання супрамолекулярних систем як каталізаторів в органічному синтезі, органічному матеріалознавстві, науках про життя, нанотехнологіях.

***Володіти:*** знанням літературних джерел із супрамолекулярної хімії; сучасними методами синтезу та дослідження структури і фізико-хімічних властивостей супрамолекулярних сполук різних типів.

***Сформовані компетентності:***

- Здатність до проведення самостійних наукових досліджень. Набуття компетентностей ініціювання та виконання наукових досліджень, які дають можливість переосмислити наявні та отримати нові знання.

- Здатність самостійно формулювати і вирішувати оригінальні дослідницькі завдання в області органічної хімії.

- Уміння прогнозувати перспективи розвитку природничих наук і наук про життя, їхній вплив на подальше існування людства.

- Навички незалежного виконання експериментів, уміння описувати, аналізувати та критично оцінювати отримані експериментальні дані.

***Програмні результати навчання:***

- Оволодіння уявленнями про загальні закономірності, які описують поведінку і взаємодію молекулярних об'єктів в синтетичних процесах.

- Знання структури, методів синтезу та властивостей основних типів біоактивних сполук.

- Знання структури та властивостей органічних супрамолекулярних систем (краун-етери, дендромери, каліксарени).

## 2. Опис навчальної дисципліни

<b>Галузь знань, напрям підготовки, спеціальність, освітньо-кваліфікаційний рівень</b>	
Галузь знань	10 Природничі науки
Спеціальність	102 Хімія
Рівень вищої освіти	Третій (освітньо - науковий)
<b>Характеристика навчальної дисципліни</b>	
Вид	Вибіркова дисципліна
Загальна кількість годин	120
Кількість кредитів ECTS	4
Кількість змістових модулів	3
Курсовий проект (робота) (якщо є в робочому навчальному плані)	-
Форма контролю	залік
<b>Показники навчальної дисципліни для денної та заочної форм навчання</b>	
Рік підготовки	3
Семестр	6
Лекційні заняття	26 год.
Практичні, семінарські заняття	30 год.
Самостійна робота	60 год.
Консультації	4 год
Індивідуальні завдання	-

### **3. ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ**

#### **ЗМІСТОВНИЙ МОДУЛЬ 1. Супрамолекулярна хімія: основні поняття та типи сполук.**

**Тема 1. Історія становлення та розвитку супрамолекулярної хімії як науки, та її генетичний зв'язок з класичними розділами хімії, фізики, біології, матеріалознавства, нанотехнологій.**

Вступ до супрамолекулярної хімії. Роботи Ж.-М.Лена в становленні супрамолекулярної хімії як науки. Від молекулярної до супрамолекулярної хімії. Генетичний зв'язок супрамолекулярної хімії з біологією. Приклади новітніх літературних даних за темою лекції.

**Тема 2. Типи невалентних взаємодій та принципи побудови супрамолекулярних систем на їх основі.**

Типи нековалентних взаємодій та їх роль в Природі. Принципи побудови природних та штучних функціональних молекул. Ковалентний та нековалентний синтез. Природа супрамолекулярних взаємодій: іон-іонні, іон-дипольні, диполь-дипольні, воднева зв'язок, катіон - півзаімодействія, пі-пі стекінг-взаємодії; сили Ван-дер-Ваальса, щільна упаковка в твердому стані, гідрофобні ефекти у водних розчинах. Молекулярне розпізнавання, самоскладання на прикладі природних та синтетичних сполук. Молекулярна передорганізація функціональних груп як ефективний підхід до створення селективних і ефективних рецепторів та стабільних агрегатів. Приклади новітніх літературних даних за темою лекції.

**Тема 3. Типи та роль макроциклічних сполук, як суб'єктів супрамолекулярної хімії.**

Основні типи супрамолекулярних макроциклічних платформ, їх синтез, будова та хімічні модифікації. Краун-етери, каліксарени, циклотрикатехілени, циклофани, порфірини, калікспіроли та циклодекстрини. Використання

молекулярних платформ для створення ефективних рецепторів та стабільних агрегатів. Приклади новітніх літературних даних за темою лекції.

## **ЗМІСТОВНИЙ МОДУЛЬ 2. Методи синтезу та функціоналізації макроциклічних сполук**

### **Тема 4. Основні методи синтезу макроциклічних сполук як скафолдів для конструювання супрамолекулярних систем.**

Синтез краун-етерів за Педерсеном, мікробіологічний синтез циклодекстринів, синтез каліксаренів за Камерером та Гютше, синтез окса- та азакаліксаренів, синтез тіакаліксаренів за Міяно, синтез сульфонілкаліксаренів, синтез каліксрезорцинаренів, синтез калікспіролів, синтез карцерандів за Крамом, синтез криптаннів за Леном, синтез кукурбітуринів. Приклади новітніх літературних даних за темою лекції.

### **Тема 5. Молекулярна будова, стереохімія, хімічні та фізико-хімічні властивості макроциклічних сполук – прекурсорів в синтезі супрамолекулярних ансамблів та систем.**

Двовимірною та тривимірною молекулярною структурою макроциклічних супрамолекулярних сполук. Конформаційно мобільні та конформаційно жорсткі макроциклічні супрамолекулярні структури. ІЧ, УФ, ЯМР, мас-спектри макроциклічних сполук. Динамічна стереохімія макроциклічних супрамолекулярних сполук. Приклади новітніх літературних даних за темою лекції.

### **Тема 6. Основні принципи дизайну селективних супрамолекулярних рецепторів катіонів, аніонів, газів, органічних молекул, біомолекул та біомакромолекул на основі макроциклічних сполук.**

Дизайн, синтез та властивості молекулярних рецепторів катіонів. Зв'язування катіонів подандами, краун-етерами, каліксаренами, коронандами, криптандами та сферандами. Дизайн, синтез та властивості молекулярних



рецепторів аніонів. Використання іонних, водневих та координаційних зав'язків для молекулярного розпізнавання та зв'язування аніонів. Дизайн, синтез та властивості молекулярних рецепторів нейтральних молекул. Зв'язування та стабілізація молекул гостей циклодекстринами, каліксаренами, кавітандами, карцерандами та гемікарцерандами. Приклади новітніх літературних даних за темою лекції.

### **Тема 7. Фосфоровмісні макроциклічні сполуки як скафолди для конструювання супрамолекулярних систем.**

Введення в хімію фосфорорганічних сполук. Валенті та координаційні стани фосфорорганічних сполук. Координаційні властивості похідних тривалентного (фосфіні, фосфіти) та п'ятивалентного фосфору (фосфати, фосфіноксиди, їх тіа- та азааналоги) по відношенню до катіонів металів. Протонодонорні та протоноакцепторні властивості фосфорорганічних сполук. Фосфорорганічні ліганди в металокомплексному каталізі, сорбції та екстракції металів. Макроциклічні сполуки з ендациклічними та ендациклічними атомами фосфору. Методи отримання фосфорорганічних похідних краун-етерів, циклодекстринів, каліксаренів, каліксрезорциаренів. Приклади новітніх літературних даних за темою лекції.

### **Тема 8. Хіральні макроциклічні сполуки для супрамолекулярної енантіодискримінації оптично активних молекул.**

Введення в проблеми хіральності. Основні типи хіральності органічних молекул. Поняття про внутрішню хіральність. Синтез та стереохімія хіральних краун-етерів, хіральних циклодекстринів та їх фосфорорганічних похідних. Синтез хіральних похідних каліксаренів, тіакаліксаренів, каліксрезорциаренів. Внутрішньохіральні макроциклічні сполуки з асиметричним розміщенням ахіральних замісників на макроциклічному каркасі. Стереоселективні методи синтезу хіральних макроциклічних сполук. Визначення абсолютної конфігурації хіральних (внутрішньохіральних) макроциклічних сполук.

## **Тема 9. Процеси самозбірки макроциклічних сполук в супрамолекулярні ансамблі дискретної будови.**

Принципи супрамолекулярної самозбірки. Програмування супрамолекулярних систем. Самогрупування і множинне взаємозв'язування. Водневозв'язана самоорганізація. Позитивна кооперативність молекулярної самозбірки. Самозбірка неорганічних супрамолекулярних архітектур. Біпіридинові ліганди в самозбірці металлоорганічних гелікандів. Металокоординаційні супрамолекулярні структури в кристалоінженерії. Супрамолекулярна самоорганізація амфіфільних макроциклічних сполук з утворенням мономолекулярних плівок Ленгмюра, плівок Ленгмюра-Блоджет, міцел, везикул, ліпосом. Застосування нанотехнології Ленгмюра-Блоджет в конструюванні хемосенсорів для аналізу летких органічних сполук та газів у повітрі та амінокислот і протеїнів у водних розчинах. Приклади новітніх літературних даних за темою лекції.

### **ЗМІСТОВНИЙ МОДУЛЬ 3. Супрамолекулярні системи: практичний аспект використання.**

## **Тема 10. Біологічно-активні макроциклічні сполуки.**

Природній калієвий іонофор валіноміцин. Природній макроциклічний антибіотик ванкоміцин. Біологічна активність похідних каліксаренів: противірусна, бактерицидна, антитромботична, протитуберкульозна, протипухлинна активність. Токсичність каліксаренів. Приклади новітніх літературних даних за темою лекції.

## **Тема 11. Застосування супрамолекулярних макроциклічних сполук в Material Science.**

Комплексоутворювачі, сорбенти, екстрагенти катіонів металів на основі краун-етерів та каліксаренів. Іон селективні електроди на основі краун-етерів та

каліксаренів. Каліксаренові хемосенсиори для визначення екологічно небезпечних органічних речовин у навколишньому середовищі. Нелінійно оптичні матеріали на основі каліксаренів. Каліксаренові резисти для електронно-променевої літографії. Приклади новітніх літературних даних за темою лекції.

### **Тема 12. Застосування супрамолекулярних макроциклічних сполук в Life Science.**

Трансфекція ДНК похідними каліксаренів та резорцинаренів. Імітатори та модулятори ферментів. Модулятори АТФ залежних кальцієвих насосів гладенькомязових клітин. Приклади новітніх літературних даних за темою лекції.

### **Тема 13. Застосування супрамолекулярних макроциклічних сполук в нанотехнологіях.**

Супрамолекулярне коплекоутворення макроциклічних сполук з фулеренами. Нанотехнології виділення фулеренів з фулеренової сажі та розділення фулеренів C<sub>60</sub> і C<sub>70</sub>. Ауорофільні взаємодії фосфіновмісних та сульфідовмісних макроциклічних сполук з золотими повехнями наночастинок, трансдюсерів електрохімічних сенсорів, чутливих елементів приладів плазмонного резонансу в конструюванні квантових точок та хемосенсорів. Приклади новітніх літературних даних за темою лекції.

#### 4. Структура навчальної дисципліни

Назви змістових модулів і тем	Кількість годин				
	усього	у тому числі			
		Лекції	Практичні	Самостійна робота	Консультації
1	2	3	4	5	7
<b>Змістовий модуль 1. Супрамолекулярна хімія: основні поняття та типи сполук.</b>					
Тема 1.	8	2	2	4	-
Тема 2.	9	2	2	5	-
Тема 3.	10	2	2	5	1
<i>Разом за змістовим модулем 1</i>	27	6	6	14	1
<b>Змістовий модуль 2. Методи синтезу та функціоналізації макроциклічних сполук</b>					
Тема 4.	9	2	2	5	-
Тема 5.	9	2	2	5	-
Тема 6.	12	2	4	5	1
Тема 7.	10	2	4	4	-
Тема 8.	9	2	2	5	-
Тема 9.	8	2	2	4	-
<i>Разом за змістовим модулем 2</i>	57	12	16	28	1
<b>Змістовий модуль 3. Супрамолекулярні системи: практичний аспект використання.</b>					
Тема 10.	10	2	2	5	1
Тема 11.	8	2	2	4	-
Тема 12.	9	2	2	5	-
Тема 13.	9	2	2	4	1
<i>Разом за змістовим модулем 3</i>	36	8	8	18	2
<b>Усього годин</b>	<b>120</b>	<b>26</b>	<b>30</b>	<b>60</b>	<b>4</b>

#### 5. Теми практичних занять.

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
1	Супрамолекулярні взаємодії та хімічні властивості сполук	2
2	Класифікація хімічних зв'язків та нековалентних взаємодій за вільною енергією Гіббса	2
3	Молекулярна будова та фізико-хімічні властивості макроциклічних сполук	2
4	Прецизійні темплатні методи синтезу макроциклічних сполук	2
5	Фізико-хімічні методи визначення двовимірної та тривимірної будови макроциклічних сполук та супрамолекулярних систем	2
6	Методи селективної хімічної функціоналізації макроциклічних сполук. Рациональні шляхи синтезу до цільових функціоналізованих макроциклів.	4
7	Основні особливості фосфороорганічної хімії. Методи синтезу фосфоромісних макроциклів.	2

8	Хіральність та внутрішня хіральність. Стереоселективні методи синтезу та виділення хіральних (внутрішньохіральних) макроциклів	2
9	Програмування супрамолекулярних систем. Супрамолекулярна самоорганізація у біосистемах.	2
10	Біологічна активність природних макроциклів. Синтез та біологічно-активні властивості (тіа)калікс[ <i>n</i> ]аренів та інших синтетичних макроциклів	2
11	Синтетичні макроцикли для екстракції радіонуклідів, створенні сенсорів, сорбентів, резистивів, нелінійно-оптичних матеріалів та інше.	2
12	Каліксарени та інші макроцикли у медицині, ветеринарії та косметології	2
13	Модифікація металевих та силікагельних наночастинок, розділення фулеренів	4
<b>Разом:</b>		<b>30</b>

## 6. Тематика самостійної роботи.

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
1.	Предмет супрамолекулярної хімії. Порівняння хімії та біології за складністю і різноманітністю систем. Молекулярна хімія. Супрамолекули і надмолекулярні системи. Поняття «рецептор», «субстрат» «господар», «гість», «ліганд». Основні властивості супрамолекул. Класифікація та номенклатура супрамолекулярних сполук. Роботи Нобелівських лауреатів 1987 року Ч.Педерсона, Д.Крама і Ж.-М.Лена. Два рівня субстрат-рецепторної відповідності: геометрія та електронна будова частинок. Принцип подвійної комплементарності. Нековалентні міжмолекулярні взаємодії. Молекулярне розпізнавання. Розпізнавання, інформація та компліментарність. Молекулярне розпізнавання і селективність взаємодії.	4
2.	Нековалентне молекулярне розпізнавання. Розпізнавання, інформація та компліментарність. Краун-етери і кругове розпізнавання. Тетраедричне розпізнавання у криптах. Сферичне розпізнавання у гемісферандах, сферандах. Чим молекулярне розпізнавання відрізняється від простого зв'язування? Чим визначається вибір субстрату при молекулярному розпізнаванні? Які параметри застосовують для характеристики центрів зв'язування? У чому полягає принцип подвійної комплементарності? Дотримання яких умов необхідно для розпізнавання рецептором субстрату?	5
3.	Отримання Ч.Педерсоном перших краун-етерів і їх комплексів з катіонами. Номенклатура краун-етерів. Коронанти. Кристалічні комплекси краун-етерів з катіонами лужних металів. Відповідність діаметрів катіона	5

	металу і порожнини краун-етер. Класифікація типів комплексів "гість-господар" по Краму. Комплекси типу "сідало" (perching complex). Комплекси типу "гніздо" (resting complex). Каліксарени як третя генерація макроциклічних супрамолекулярних суб'єктів. Капсульні комплекси (capsular complex). Стійкість комплексів в розчинах. Селективність зв'язування катіонів металів і стійкість комплексів.	
4.	Синтез краун-етерів за Педерсенем, мікробіологічний синтез циклодекстринів, синтез каліксаренів за Камерером та Гютше, синтез окса- та азакаліксаренів, синтез тіакаліксаренів за Міяно, синтез сульфонілкаліксаренів, синтез каліксрезорцинаренів, синтез калікспіролів, синтез карцерандів за Крамом, синтез криптандів за Леном, синтез кукурбітурилів. Арен-альдегідная конденсація. Конденсація п-заміщених фенолів і формальдегіду при основному каталізі. Конденсація резорцинолу з альдегідами при кислотному каталізі. Конденсація алкілбензолів з формальдегідом при кислотному каталізі. Конденсації гетероциклічних сполук з альдегідами при кислотному каталізі. Інші конденсації за участю формальдегіду. Темплатний, кінетичний та термодинамічний контроль в синтезі гомологів каліксаренів.	5
5.	Конформації конус, частковий конус, 1,2-альтернат та 1,3-альтернат калікс[4]аренів. Конформації калікс[5]аренів, калікс[6]аренів, калікс[8]аренів. ЯМР-спектри каліксаренів. Мас-спектри каліксаренів. Конформаційно рухливі каліксарени. Конформаційно жорсткі каліксарени. Гетерокаліксарени.	5
6.	Функціоналізація нижнього обода каліксаренового циклу як метод керування їх конформацією та стереохімічною жорсткістю. О-алкілювання, О-ацилювання. Моно, ди-, три- і тетраетерефікація калікс [4]арену. 1,3- і 1,2-біфункціоналізація калікс [4] арену. Функціоналізація верхнього обода каліксаренового циклу. ІПСО-заміщення в п-трет-бутилкалікс[4]арені. Електрофільне заміщення вільного п-положення калікс[4]арену. Молекулярний дизайн, синтез та самоскладання воднево-зв'язаних молекулярних капсул. Рецепторні властивості димерних, тетрамерних та гексамерних капсул в розчинах та кристалічному стані. Аніонні рецептори на основі макроциклічних амідів, сечовин та антикраун-етерів. Аніонні рецептори на основі протонуваних аза-криптандів.	5

	Визначення констант стабільності супрамолекулярних комплексів. Перенос неорганічних та органічних катіонів та аніонів через штучні та природні мембрани. Транспортні процеси та конструювання молекул-переносників. Процеси переносу. Молекули-переносники і трансмембранні канали. Транспорт молекулами-переносниками. Катіонні транспортні процеси - переносники катіонів. Аніонні транспортні процеси - переносники аніонів. Процеси сполученого перенесення.	
7.	Стереохімія та фізико-хімічні властивості фосфоровмісних макроциклів. Кооперативна участь фосфоровмісних угруповань в процесах звязування катіонів металів. Нанокapsули та капсулярні комплекси на основі фосфорильованих каліксаренів та тіакаліксаренів. Конструювання на основі фосфоровмісних каліксаренів поруватих металоорганічних каркасних сполук та їх комплексів.	4
8.	Процеси молекулярного розпізнавання оптично активних сполук хіральними (внутрішньохіральними) макроциклами. Розділення оптичних антиподів хіральними макроциклами. Хіральні макроцикли в асиметричному металокомплексному каталізі та органокаталізі оптично активних органічних сполук. Хіральні макроцикли в конструювання хемосенсорів для аналізу енантіомерів оптично активних молекул та біомолекул.	5
9.	Самоорганізація амфифільних макроциклічних сполук з утворенням solid-liquid наночастинок для drug delivery. Міцелярний каталіз органічних реакцій амфифільними каліксаренами. Амфифільні каліксарени для міцелярного транспортування ДНК в клітини. Генна інженерія. Органічні флуоресцентні наночастинок на основі амфифільних каліксаренів для біоіміджингу клітин. Амфифільні фосфорорганічні каліксарени для cloud-point екстракції радіонуклідів з водних середовищ. Супрамолекулярний підхід до створення структур з механічними зв'язками – катенанів, ротаксанів та вузлів. Молекулярні шатли та машини. Нобелівська премія (Ф. Стоддарт, Ж-П. Саваж, Б. Ферінга) в галузі хімії за створення молекулярних машин.	4
10.	Біологічна активність каліксаренфосфорних і каліксаренфосфових кислот та природа їх біологічної активності. Роль структури макроциклічної платформи в дизайні біологічно активних каліксаренів та застосування молекулярного докінгу в прогнозуванні біологічної активності. Застосування каліксаренів для подолання	5

	лікарської резистентності.	
11.	Застосування краун-етерів та каліксаренів в радіохімічній промисловості та атомній енергетиці. Високоселективні екстрагенти та сорбенти для звязування токсичних ізотопів цезію, стронцію, америцію, плутонію, нептунію, торію, урану. Переробка відпрацьованого ядерного палива атомних електростанцій, захоронення радіоактивних відходів. Приклад промислового виділення каліксарен-краун-етером радіоактивного цезію з відпрацьованого ядерного палива на радіохімічному підприємстві в Саванна Рівер, США.	4
12.	Специфічне звязування макроциклічних сполук з поверхнею протеїнових структур. Супрамолекулярні каліксаренові «клеї» для кристалізації та рентгеноструктурного аналізу протеїнових молекул. Флуоресцентні каліксарени для біоіміджингу (візуалізація клітин). Каліксаренові лантанідні комплекси для магнітно-резонансної томографії.	5
13.	Дизайн на основі модифікованих каліксаренфосфінами золотих наночастинок, та поруватих матеріалів для каталізу органічних реакцій і звязування ензимів. Нанотехнологічне застосування амфіфільних каліксаренфосфових кислот: сепарація вуглецевих нанотрубок за їх розмірами; дизайн нанокапсул; поруватих наноструктур; нановолокон; солюбілізація графенових моношарів; формування срібних наночастинок; формування капсулярних комплексів з протипухлинними препаратами.	4
<b>Разом</b>		<b>60</b>

## 7. Методи навчання

Форми навчання: Теоретичні, самостійна робота, консультації

Методи навчання: словесні – лекція, пояснення, бесіда;

наочні – презентації, виконані із застосуванням програми PowerPoint;

проблемно-пошукові методи – дискусія та колективне обговорення можливих підходів до вирішення задач чи експериментальних завдань



## 8. Форми контролю

Поточний контроль - письмові контрольні роботи за темами лекційного курсу, тестування знань аспірантів з певних тем, усне опитування, участь в дискусії, додаткова робота;

Підсумковий контроль – залік.

## 9. Розподіл балів, які отримують аспіранти

Поточна самостійна та додаткова робота													Залік	Сума балів
Змістовний модуль №1						Змістовний модуль №2								
T1	T2	T3	T4	T5	T6	T7	T8	T9	T10	T11	T12	T13		
5	5	5	5	5	5	4,5	4,5	4,5	4,5	4	4	4	40	100

### Критерії оцінювання успішності аспірантів (форма підсумкового контролю - залік)

35...40 балів ставиться аспіранту, який демонструє повні і глибокі знання навчального матеріалу, знає суть предмету, його сучасний зміст та методологію, класифікацію природних сполук та їх основні біогенетичні шляхи синтезу, особливості будови, структурну різноманітність, хімічні та біологічні властивості природних сполук; вміє визначати належність природної сполуки до певного класу чи групи на основі класифікаційних ознак, а також виділяти структурні особливості, які визначають хімічні та біологічні властивості сполуки; має достовірний рівень розвитку умінь і навичок, що лежать в основі методів виявлення, вилучення, очистки та аналізу сполук рослинного походження; вільно володіє науковими термінами; вміє приймати необхідні рішення в нестандартних та має високу комунікативну культуру.

30...35 балів ставлять у тому випадку, якщо аспірант виявляє знання теоретичного програмного матеріалу і показує систематичний характер знань по всіх розділах програми, проте у відповідях є деякі недоліки, а саме: може описати структурну різноманітність основних класів природних сполук, але не чітко оцінює взаємозв'язок між будовою та властивостями природних сполук, не вміє прогнозувати хімічні та біологічні властивості сполук за їх структурою; орієнтується в способах виділення та в синтетичних методах одержання природних сполук, але не може зробити узагальнюючі висновки; допускає окремі несуттєві помилки і неточності; виникає необхідність задавати допоміжні питання.

24...30 балів виставляється аспіранту, який засвоїв основний навчальний матеріал, володіє необхідними уміннями та навичками для вирішення стандартних завдань, знає основні закономірності, але не зовсім чітко уявляє їх

застосування, не виявляє самостійності суджень, не вміє сформулювати висновки.

0...24 балів ставиться аспіранту, який не володіє необхідними знаннями, уміннями, навичками, науковими термінами, демонструє низький рівень комунікативної культури.

### Шкала оцінювання: національна та ECTS

Сума балів за всі види навчальної діяльності	Оцінка ECTS	Оцінка за національною шкалою
		для заліку
90 – 100	<b>A</b>	відмінно
82-89	<b>B</b>	добре
74-81	<b>C</b>	
64-73	<b>D</b>	
60-63	<b>E</b>	задовільно
35-59	<b>FX</b>	незадовільно з можливістю повторного складання
0-34	<b>F</b>	незадовільно з обов'язковим повторним вивченням дисципліни

## 10. Рекомендована література

### Базова:

1. J.-M. Lehn Supramolecular Chemistry , 1995, Wiley-VCH. ISBN 978-3-527-29311-7.
2. D. J. Cram, J. M. Cram 1997, Container Molecules and Their Guests. The Royal Society of Chemistry, ISBN 0-85404-507-4.
3. Стид, Д. В. Супрамолекулярная химия: в 2 т. Т. 1 / Д. В. Сид, Д. Л. Этвуд ; пер. с англ. И. Г. Варшавской и др. ; под ред. А. Ю. Цивадзе и др. - М. : Академкнига, 2007. - 479 с.
4. Сид, Д. В. Супрамолекулярная химия: в 2 т. Т. 2 / Д. В. Сид, Д. Л. Этвуд ; пер. с англ. И. Г. Варшавской и др. ; под ред. А. Ю. Цивадзе и др. - М. : Академкнига, 2007. - 485 с.
5. Химия комплексов “гость-хозяин”, под ред. Фегтле Ф. и Вебера Э., изд. Мир, М., 1988.
6. Gutsche, C.D. Calixarenes: An introduction. Cambridge: Royal Society of Chemistry, 2008. 276 p.

7. Calixarenes and beyond; Neri P., Sessler J.L., Wang M.-X., Eds. Switzerland: Springer, 2016.

8. Сесслер Дж.Л. Химия анионных рецепторов / Дж. Л. Сесслер, Ф. А. Гейл, ВонСеоб Хо; пер. с англ. С. В. Макарова, В. Б. Шейнина. - М. : URSS, 2011. - 456 с.

9. Calixarenes for separations. Lumetta G.J., Rogers R.D., Gopalan A.S., Eds. Washington: American Chemical Society, 2000.

10. Calixarenes in the Nanoworld, Vicens J.; Harrowfield J., Eds.: Springer: Dordrecht, The Netherlands, 2007.

11. Шиванюк О.М. Супрамолекулярна хімія функціональних каліксаренів. Наукова думка 2007, Київ.

12. Бойко В.І., Кальченко В.І., Єсипенко О.А. Хіральні каліксарени. К.: Компринт. 2013. – 200 с.

13. Кальченко О.І., Кальченко В.І. Хроматографія в хімії каліксаренів.К.: Наукова Думка. 2013. – 197 с.

14. Kosterin S.O., Kalchenko V.I., Veklich T.O., Babich L.G., Shlikov S.G. Calix[4]arenes as modulators of ATP-hydrolase systems of smooth muscle cells, - Kyiv: Naukova Dumka.- 2019.

15. Кальченко В.І., О.А.Єсипенко, О.І.Кальченко, С.О.Черенок, В.І.Бойко. Хіральні каліксарени. В книзі: Стратегія синтезу і біоактивність органічних молекул. Київ. Інтерсервіс. 2019. С. 143-196.

16. Oshovsky, G.V.; Reinhoudt, D.N.; Verboom, W. Supramolecular chemistry in water. *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2007**, *46*, 2366–2393.

17. Rodik R.V., Boyko V.I. , Kalchenko V.I. Calixarenes in Biotechnology and Bio-Medical Research. *Frontiers in Medicinal Chemistry* / Allen B. Reitz, Attaur-Rahman, M. Iqbal Choudhary (Eds.). – Bentham Science Publishers. – 2016. – V. 8. – P. 206-301.

18. F. Davis, S. Higson, *Macrocycles: Construction, Chemistry and Nanotechnology Applications* // Wiley. – 2011.

#### **Допоміжна:**

1. Кальченко В.І., Родік Р.В. Супрамолекулярні наномашини та смарт-матеріали. Вісник НАН України. – 2017. - № 1. – С. 82-88.

2. Коновалов, Александр Иванович. Супрамолекулярные системы - мост между неживой и живой материей: научно-популярная литература. Вып. 26 / А. И. Коновалов. - М. : РБОФ "Знание" им. С.И. Вавилова, 2010. - 28 с.

3. Наноллекарства. Концепции доставки лекарств в нанонауке / ред. А. Лампрехт, пер. с англ. О. В. Таратиной. - М. : Научный мир, 2010. - 232 с.

4. Скопенко, В.В. и др. Координационная химия: Учеб.пособие - М.: ИКЦ «Акадекнига», 2007. – 487 с.

5. Kalchenko O., Lipkowski J., Kalchenko V. Supramolecular and analytical chemistry of calixarenes. In: Comprehensive Supramolecular Chemistry II; Atwood, J.L., Ed.; Oxford: Elsevier, 2017, 2, P. 239–261.

6. Rudkevich D.M. Progress in supramolecular chemistry of gases. *European Journal of Organic Chemistry*. 2007. P. 3255–3270.

7. Cherenok S., Dutasta J.-P., Kalchenko V. Phosphorus-containing chiral macrocycles (Review). *Current Organic Chemistry*. – 2006. – V. 10, Issue 18. - P. 2307-2331.

8. Cherenok S., Kalchenko V. Phosphorus-containing calixarenes (review). *Topics Heterocyclic Chemistry*. - 2009. – Vol. 20. – P. 229-273.

9. Komisarenko S.V., Kosterin S.O., Lugovskoy E.V., Cherenok S.O., Tanchuk V.Yu., Vovk A.I., Kalchenko V.I. Synthesis and characterization of calixarene methylene bisphosphonic acids as effectors of biochemical processes. In Book: “Ligands: synthesis, characterization and role in biotechnology”. – New York: Nova Science Publishers, Inc., 2014. – 295 p. – Chapter 3. – P. 67-116.

10. Rodik R, Cherenok S., Kalchenko O., Yesypenko O., Lipkowski J., Kalchenko V. Functional Calixarenes for Material and Life Science. *Current Organic Chemistry*. – 2018. – Vol. 22. – P. 2196-2218.

11. Alex, J.M.; Rennie, M.L.; Volpi, S.; Sansone, F.; Casnati, A.; Crowley P.B. Phosphonated calixarene as a “molecular glue” for protein crystallization. *Cryst. Growth Des.*, **2018**, *18*, 2467–2473.

12. Adam D. Martin and Colin L. Raston. Multifunctional p-phosphonated calixarenes. *Chem. Commun.*, 2011, 47

13. Francesca Maffei, Giovanna Brancatelli, Tahníe Barboza, Enrico Dalcanale, Silvano Geremiab and Roberta Pinallia. Inherently chiral phosphonate cavitands as enantioselective receptors for monomethylated L-amino acids. *Supramolecular Chemistry*, 2017.

14. Coleman, A.W. aEmail Author, Perret, F.a, Moussa, A.b, Dupin, M.c, Guo, Y.c, Perron, H.c Calix[n]arenes as protein sensors. *Topics in Current Chemistry*. Volume 277, 2007. Pages 31-88

15. Rodik, R.V.; Boyko, V.I.; Kalchenko, V.I. Calixarenes in bio-medical researches. *Current Med. Chem.*, **2009**, *16*, 1630–1655.

16. Labyntseva R.D., Yavorovska V.I., Bevza O.V., Kalchenko V.I., Kosterin S.O. Calix[4]arenes as the effectors of smooth muscle myosin ATPase. In book: *Myosin: Biosynthesis, Classes and Function* /David Broadbent (ed.) – New York: Nova science publishers, Inc. – 2018. – P. 89-134.

17. Rodik R., Poberezhnyk M., Kalchenko V. Calixarene Derivatives for (Nano)B

18. Tauran, Yannick; Kim, Beomjoon; Coleman, Anthony W. Bio-Applications of Calix[n]arene Capped Silver Nanoparticles. *Journal of Nanoscience and Nanotechnology* Vol. 15, 1–19, 2015.

19. Dougherty D. Cation- $\pi$  Interactions in Chemistry and Biology: A New View of Benzene, Phe, Tyr, and Trp / D. Dougherty // *Science*. – **1996**. – Vol. 271. – pp. 163–168.

20. Schottel B. Anion- $\pi$  interactions. / Schottel B.L., Chifotides H.T., Dunbar K.R. // *Chem Soc Rev*. – **2008**. – Vol. 37. – pp. 68–83.

21. Rodik R.V., Klymchenko A.S., Mely Y., Kalchenko V.I. Calixarenes and related macrocycles as gene delivery vehicles. *J. Incl. Phenom. Macrocycl. Chem.* - 2014. – V. 80, Issue 3. – P. 189-200.

22. Shulov Ievgen, Rodik Roman V., Arntz Youri, Reisch Andreas, **Kalchenko Vitaly I.**, Klymchenko Andrey S. Protein-Sized Bright Fluorogenic Nanoparticles Based on Cross-Linked Calixarene Micelles with Cyanine Corona. *Angew. Chem. Int. Ed.* – 2016. – Vol. 55, Issue 51. – P. 15884-15888.

### Інформаційні ресурси

1. Електронна платформа Web of Science - <http://webofknowledge.com/>
2. Електронна платформа видавництва American Chemical Society - <http://www.pubs.acs.org>
3. Електронна платформа видавництва Taylor&Francis - <http://www.informaworld.com>
4. Електронна платформа [http:// www.scitation.aip.org](http://www.scitation.aip.org)
5. Електронна платформа видавництва Royal Society of Chemistry - <http://www.rsc.org>

6. Електронна платформа видавництва WILEY-BLACWALL - <http://www.interscience.wiley.com>
7. Електронна платформа видавництва SPRINGER - <http://www.springerlink.com>
8. Електронна платформа e-Library.ru - <http://www.elibrary.ru>
9. Електронна платформа видавництва Elsevier - <http://www.sciencedirect.com>
10. Електронна платформа видавництва Elsevier - <http://www.scopus.com>
11. (Реферативно-пошукова база даних Scopus)

**Календарно-тематичний план вивчення нормативної навчальної дисципліни  
«Супрамолекулярна хімія»**

Календарний план навчальних занять

Рівень вищої освіти	Третій (освітньо-науковий)
Галузь знань	10 – Природничі науки
Спеціальність	102 – Хімія
Рік навчання	3
Семестр	6



Затверджую

Директор Інституту органічної хімії НАН України  
акад. НАН України В.І. Кальченко

« 07 » \_\_\_\_\_ 2020 р.

Кількість тижнів	16	Лекцій	26 год.
Практичних занять	30 год.	Самостійна робота	60 год.
Консультації	4 год.	Всього	90 год.

Теми лекцій	год	Теми практичних (лабораторних) занять	год	Теми самостійних робіт	год
<b>ЗМІСТОВНИЙ МОДУЛЬ 1 <i>Супрамолекулярна хімія: основні поняття та типи сполук.</i></b>					
Тема 1. Історія становлення та розвитку супрамолекулярної хімії як науки, та її генетичний зв'язок з класичними розділами хімії, фізики, біології, матеріалознавства, нанотехнологій..	2	Супрамолекулярні взаємодії та хімічні властивості сполук	2	Предмет супрамолекулярної хімії. Порівняння хімії та біології за складністю і різноманітністю систем. Молекулярна хімія. Супрамолекули і надмолекулярні системи. Поняття «рецептор», «субстрат» «господар», «гість», «ліганд». Основні властивості супрамолекул. Класифікація та номенклатура супрамолекулярних сполук. Роботи Нобелівських лауреатів 1987 року Ч.Педерсона, Д.Крама і Ж.-М.Лена. Два рівня субстрат-рецепторної відповідності: геометрія та електронна будова частинок. Принцип подвійної комплементарності. Нековалентні міжмолекулярні взаємодії. Молекулярне розпізнавання. Розпізнавання, інформація та компліментарність. Молекулярне розпізнавання і селективність взаємодії.	4
Тема 2. Типи невалентних взаємодій та принципи побудови супрамолекулярних систем на їх основі.	2	Класифікація хімічних зв'язків та нековалентних взаємодій за вільною енергією Гіббса	2	Нековалентне молекулярне розпізнавання. Розпізнавання, інформація та компліментарність. Краун-етери і кругове розпізнавання. Тетраедричну розпізнавання у криптахдах. Сферичне розпізнавання у гемісферандах, сферандах. Чим молекулярне розпізнавання відрізняється від простого зв'язування? Чим визначається вибір субстрату при молекулярному розпізнаванні? Які параметри застосовують для характеристики центрів зв'язування? У чому полягає принцип подвійної комплементарності? Дотримання яких умов необхідно для розпізнавання рецептором субстрату?	5
Тема 3. Типи та роль макроциклічних сполук, як суб'єктів супрамолекулярної хімії.	2	Молекулярна будова та фізико-хімічні властивості макроциклічних сполук	2	Отримання Ч.Педерсеном перших краун-етерів і їх комплексів з катіонами. Номенклатура краун-етерів. Коронанти. Кристалічні комплекси краун-етерів з катіонами лужних металів. Відповідність	5

				діаметрів катіона металу і порожнини краун-етер. Класифікація типів комплексів "гість-господар" по Краму. Комплекси типу "сідало" (perching complex). Комплекси типу "гніздо" (resting complex). Каліксарени як третя генерація макроциклічних супрамолекулярних суб'єктів. Капсульні комплекси (capsular complex). Стійкість комплексів в розчинах. Селективність зв'язування катіонів металів і стійкість комплексів.	
<b>ЗМІСТОВНИЙ МОДУЛЬ 2 <i>Методи синтезу та функціоналізації макроциклічних сполук</i></b>					
Тема 4. Основні методи синтезу макроциклічних сполук як скафолдів для конструювання супрамолекулярних систем.	2	Прецизійні темплатні методи синтезу макроциклічних сполук	2	Синтез краун-етерів за Педерсеном, мікробіологічний синтез циклодекстринів, синтез каліксаренів за Камерером та Гютше, синтез окса- та азакаліксаренів, синтез тіакаліксаренів за Міяно, синтез сульфонілкаліксаренів, синтез каліксрезорцинаренів, синтез калікспіролів, синтез карцерандів за Крамом, синтез криптантів за Леном, синтез кукурбітурилів. Арен-альдегідная конденсація. Конденсація п-замішених фенолів і формальдегіду при основному каталізі. Конденсація резорцинолу з альдегідами при кислотному каталізі. Конденсація алкілбензолів з формальдегідом при кислотному каталізі. Конденсації гетероциклічних сполук з альдегідами при кислотному каталізі. Інші конденсації за участю формальдегіду. Темплатний, кінетичний та термодинамічний контроль в синтезі гомологів каліксаренів.	5
Тема 5. Молекулярна будова, стереохімія, хімічні та фізико-хімічні властивості макроциклічних сполук – прекурсорів в синтезі супрамолекулярних ансамблів та систем.	2	Фізико-хімічні методи визначення двовимірної та тривимірної будови макроциклічних сполук та супрамолекулярних систем	2	Конформації конус, частковий конус, 1,2-альтернат та 1,3-альтернат калікс[4]аренів. Конформації калікс[5]аренів, калікс[6]аренів, калікс[8]аренів. ЯМР-спектри каліксаренів. Мас-спектри каліксаренів. Конформаційно рухливі каліксарени. Конформаційно жорсткі каліксарени. Гетерокаліксарени.	5
Тема 6. Основні принципи дизайну селективних супрамолекулярних рецепторів катіонів, аніонів, газів, органічних молекул, біомолекул та біомакромолекул на основі макроциклічних сполук.	2	Методи селективної хімічної функціоналізації макроциклічних сполук. Раціональні шляхи синтезу до цільових функціоналізованих макроциклів.	4	Функціоналізація пийнього обода каліксаренового циклу як метод керування їх конформації та стереохімічною жорсткістю. О-алкілювання, О-ацилювання. Моно, ди-, три- і тетраетерефікація калікс [4]арену. 1,3- і 1,2-біфункціоналізація калікс [4] арену. Функціоналізація верхнього обода каліксаренового циклу. ПІСО-заміщення в п-трет-бутилкалікс[4]арені. Електрофільне заміщення вільного п-положення калікс[4]арену. Молекулярний дизайн, синтез та самоскладання воднево-зв'язаних молекулярних капсул. Рецепторні властивості димерних, тетрамерних та гексамерних капсул в розчинах та кристалічному стані. Аніонні рецептори на основі макроциклічних амідів, сечовин та антикраун-етерів. Аніонні рецептори на основі протонуваних аза-криптантів. Визначення констант стабільності супрамолекулярних комплексів. Перенос неорганічних та органічних катіонів та аніонів через штучні та природні мембрани. Транспортні процеси та конструювання молекул-переносників. Процеси переносу.	5



				Молекули-переносники і трансмембранні канали. Транспорт молекулами-переносниками. Катіонні транспортні процеси - переносники катіонів. Аніонні транспортні процеси - переносники аніонів. Процеси сполученого перенесення.	
Тема 7. Фосфоровмісні макроциклічні сполуки як скафолди для конструювання супрамолекулярних систем.	2	Основні особливості фосфоорганічної хімії. Методи синтезу фосфоровмісних макроциклів.	2	Стереохімія та фізико-хімічні властивості фосфоровмісних макроциклів. Кооперативна участь фосфоровмісних угруповань в процесах зв'язування катіонів металів. Нанокапсули та капсулярні комплекси на основі фосфорильованих каліксаренів та тікаліксаренів. Конструювання на основі фосфоровмісних каліксаренів поруватих металоорганічних каркасних сполук та їх комплексів.	4
Тема 8. Хіральні макроциклічні сполуки для супрамолекулярної енантіодискримінації оптично активних молекул.	2	Хіральність та внутрішня хіральність. Стереоселективні методи синтезу та виділення хіральних (внутрішньохіральних) макроциклів	2	Процеси молекулярного розпізнавання оптично активних сполук хіральними (внутрішньохіральними) макроциклами. Розділення оптичних антиподів хіральними макроциклами. Хіральні макроцикли в асиметричному металокомплексному каталізі та органокаталізі оптично активних органічних сполук. Хіральні макроцикли в конструювання хемосенсорів для аналізу енантіомерів оптично активних молекул та біомолекул.	5
Тема 9. Процеси самозбірки макроциклічних сполук в супрамолекулярні ансамблі дискретної будови.	2	Програмування супрамолекулярних систем. Супрамолекулярна самоорганізація у біосистемах.	2	Самоорганізація амфіфільних макроциклічних сполук з утворенням solid-liquid наночастинок для drug delivery. Міцелярний каталіз органічних реакцій амфіфільними каліксаренами. Амфіфільні каліксарени для міцелярного транспортування ДНК в клітині. Генна інженерія. Органічні флуоресцентні наночастинок на основі амфіфільних каліксаренів для біоміджингу клітин. Амфіфільні фосфоорганічні каліксарени для cloud-point екстракції радіонуклідів з водних середовищ. Супрамолекулярний підхід до створення структур з механічними зв'язками – катенанів, ротаксанів та вузлів. Молекулярні шатли та машини. Нобелівська премія (Ф. Стоддарт, Ж-П. Саваж, Б. Ферінга) в галузі хімії за створення молекулярних машин.	4
<b>Змістовний модуль 3. <u>Супрамолекулярні системи: практичний аспект використання.</u></b>					
Тема 10. Біологічно-активні макроциклічні сполуки.	2	Біологічна активність природних макроциклів. Синтез та біологічно-активні властивості (тіа)калікс[п]аренів та інших синтетичних макроциклів	2	Біологічна активність каліксаренфосфорних і каліксаренфосфонових кислот та природа їх біологічної активності. Роль структури макроциклічної платформи в дизайні біологічно активних каліксаренів та застосування молекулярного докінгу в прогнозуванні біологічної активності. Застосування каліксаренів для інгібування лікарської резистентності.	5
Тема 11. Застосування супрамолекулярних макроциклічних сполук в Material Science.	2	Синтетичні макроцикли для екстракції радіонуклідів, створенні сенсорів, сорбентів, резистів, нелінійно-оптичних матеріалів та інше.	2	Застосування краун-етерів та каліксаренів в радіохімічній промисловості та атомній енергетиці. Високоселективні екстрагенти та сорбенти для зв'язування токсичних ізотопів цезію, стронцію, америцію, плутонію, нептунію, торію, урану. Переробка відпрацьованого ядерного палива атомних електростанцій, захоронення радіоактивних відходів. Приклад промислового виділення каліксарен-краун-етером радіоактивного цезію з відпрацьованого ядерного палива на радіохімічному підприємстві в Саванна Рівер, США.	4

Тема 12. Застосування супрамолекулярних макроциклічних сполук в Life Science.	2	Каліксарени та інші макроцикли у медицині, ветеринарії та косметології	2	Специфічне зв'язування макроциклічних сполук з поверхнею протеїнових структур. Супрамолекулярні каліксаренові «клеї» для кристалізації та рентгеноструктурного аналізу протеїнових молекул. Флуоресцентні каліксарени для біоіміджингу (візуалізація клітин). Каліксаренові лантанідні комплекси для магнітно-резонансної томографії.	5
Тема 13. Застосування супрамолекулярних макроциклічних сполук в нанотехнологіях.	2	Модифікація металевих та силікагельних наночастинок, розділення фулеренів	4	Дизайн на основі модифікованих каліксаренфосфінами золотих наночастинок, та поруватих матеріалів для каталізу органічних реакцій і зв'язування ензимів. Нанотехнологічне застосування амфільних каліксаренфосфонової кислоти: сепарація вуглецевих нанотрубок за їх розмірами; дизайн нанокапсул; поруватих наноструктур; нановолокон; солубілізація графенових моношарів; формування срібних наночастинок; формування капсулярних комплексів з протипухлинними препаратами.	4
	26		30		60

Науково-педагогічні працівники

  
к.х.н., ст.н.с. Р.В. Родік

  
к.х.н., ст.досл. О.А. Єсипенко

  
к.х.н., ст.досл. С.О. Черенок

## ПИТАННЯ ДО ЗАЛІКУ

1. Поняття «супрамолекулярна хімія», хімія «господар - гість».
2. Класифікація супрамолекулярних сполук «господар - гість».
3. Хелатний і макроциклічними ефекти.
4. Передорганізація і компліментарність.
5. Природа супрамолекулярних взаємодій.
6. Супрамолекулярне конструювання господаря.
7. Молекулярне розпізнавання, компліментарність.
8. Зв'язування і розпізнавання нейтральних молекул.
9. Координаційна хімія аніонів та розпізнавання аніонних субстратів.
10. Координаційна хімія іонів металів і їх розпізнавання.
11. Супрамолекулярні контейнери для сепарації та зберігання газів.
12. Взаємодія макроциклічних сполук з поверхнею ДНК та протеїнів. Генна терапія.
13. Трансмембранне перенесення катіонів.
14. Трансмембранне перенесення аніонів.
15. Молекулярне розпізнавання, інформація, сигнали.
16. Макроциклічні сполуки в супрамолекулярній хімії.
17. Синтез, структура, властивості краун-етерів, каліксаренів, каліксрезорцинаренів.
18. Хіральні каліксарени, їх синтез та енантіодискримінування органічних молекул.
19. Супрамолекулярні сенсори.
20. Біологічна активність супрамолекул
21. Супрамолекулярні матеріали для техніки.
22. Біомедичне застосування супрамолекулярних сполук
23. Супрамолекулярні підходи в дизайні наноматеріалів та нанотехнологій