

Тема: ОСНОВИ НА СУПРАМОЛЕКУЛНАТА ХИМИЯ
SUPRAMOLECULAR CHEMISTRY BASICS

Лектор: Проф. дхн Людмил Антонов
ИОХЦФ-БАН
тел. 02/ 96 06 102
e-mail: lantonov@orgchm.bas.bg
<http://www.orgchm.bas.bg/~i2mp>

Prof. DSc Liudmil Antonov
Institute of Organic Chemistry with Centre of Phytochemistry,
Bulgarian Academy of Sciences
tel. 02/ 96 06 164
e-mail: lantonov@orgchm.bas.bg
<http://www.orgchm.bas.bg/~i2mp>

Хорариум: 30 учебни часа

Анотация:

Супрамолекулната химия създава сложни химични системи чрез използването на нековалентни молекулни сили. Следователно тя е химия отвъд молекулите, изучаваща самоорганизацията на две и повече класически молекули, породени от междумолекулни взаимодействия. Чрез подходяща манипулация на нековалентните взаимодействия се осъществява съхранение на информация на молекулно ниво, която може по-нататък да бъде четена, обработвана или предавана чрез процесите на молекулно разпознаване. Съхранената информация, посредством процесите на самоорганизация, т.е. спонтанно формиране на строго дефинирани супрамолекулни системи, може да доведе до създаване на програмирани, с отнапред дефинирани свойства, органични и хибридни мрежи и/или молекулни устройства и машини.

Целта на този курс е да разгледа междумолекулните взаимодействия, които лежат в основата на супрамолекулната химия, както и да въведе слушателите в основните типове супрамолекули, техните свойства, начин на получаване и потенциално приложение.

Summary:

By the appropriate manipulation of noncovalent interactions, supramolecular chemistry became the chemistry of molecular information, involving the storage of information at the molecular level, in the structural features, and its retrieval, transfer, processing at the supramolecular level, through molecular recognition processes operating via specific interactional algorithms. A further step consisted of the design of systems undergoing

self-organization, i.e., systems capable of spontaneously generating well-defined supramolecular architectures by self-assembly from their components under the control of the molecular information stored in the covalent framework of the components and read out at the supramolecular level through specific interactions. Self-organization processes thus represent the operation of programmed chemical systems leading to the specific generation of well-defined entities.

The design of such molecular information-controlled, "programmed," and functional self-organizing systems provides an original approach to nanoscience and nanotechnology, offering a powerful alternative/complement to nanofabrication and to nanomanipulation." All this makes supramolecular chemistry a truly multidisciplinary research subject with great potential for the future technology development.

The aim of the current curriculum is to briefly consider the intermolecular interactions forming the background of supramolecular chemistry and to describe the basic types of supramolecular systems, their properties and potential applicability.

Програма:

Основни концепции в супрамолекулната (надмолекулната) химия. Определение и развитие на супермолекулната химия. Система Гост-приемник, дизайн. Класификация на катиони и супрамолекулни домакин-гост съединения. Рецептори, координация и аналогия ключ-ключалка. Нанохимия.

Стабилитетни константи: Определение и използване; Практическо определяне на стабилитетни константи. Комплексообразуване и хелатен ефект. Молекулна организация. Термодинамична и кинетична селективност.

Естество на супрамолекулните взаимодействия: йон-йонни, йон-диполни и дипол-диполни взаимодействия; Водородни връзки; катиони и аниони π -взаимодействия; π - π взаимодействия. Ван дер Ваалсови сили и затворена кристална обвивка. Солватационни и хидрофобни ефекти.

Катион-свързващи приемници. Въведение в координационната химия: Координационна химия на катион свързващите супрамолекули; Полезни концепции в координационната химия; EDTA - класически супрамолекулен домакин.

Коронни етери: Откриване и възможности. Синтез. Структурни възможности за постигане на по-високи стабилитетни константи – ациклични аналози (поданди) и етери със странична ръка (лариатни етери). Криптанди и сферанди. Номенклатура на катион свързаните супрамолекули. Осигуряване на селективно свързване на катиони. Конформационни характеристики на коронните етери. Ориентация на донорните групи и хелатни ефекти. Размер на пръстените. Комплексообразуване на коронни етери. Комплексообразуване на лариатни етери и криптанди. Преорганизация: Термодинамични, кинетични и динамични ефекти. Поведение в разтвор. Синтез.

Меки лиганди за меки метални йони. Азотни и серни аналози на коронните етери. Азотни и серни аналози на криптанди. Азوماкроцикли: основни свойства.

Фосфоросъдържащи макроцикли. Смесени криптати. Шифови бази. Фталоцианини. Торанди.

Протонно свързване. Задържане на оксониев йон от макроциклите в твърдо състояние. Химия на разтворимостта на протонните комплекси.

Комплексообразуване на органични катиони. Свързването на амониеви катиони от коранди. Свързването на амониеви катиони от триизмерни домакини. Рецептори с повече от една система домакин-гост. Хирално разпознаване

Каликсарени. Катионни комплекси на каликсаридите. Фазов транспорт и равновесие. Катионни комплекси на хибридни каликсарени.

Природни и синтетични лиганди със странични комплексообразуващи групи.

Анионно свързване. Биологични анионни рецептори. Основни принципи в дизайна на анионни рецептори. Промяна на характеристиките на рецептора - от свързване на катиони към свързване на аниони. Тетрахедрални рецептори. Подбор на подходяща структура. Амонието базирани поданди. Двумерни домакини. Циклофанови домакини.

Рецептори. Гуанидинови рецептори. Неутрални рецептори. Рецептори за инертни метали. Рецептори за йонни двойки.

Рецептори за йонни двойки. Едновременно свързване на анион и катион. Лабилни комплекси като домакин на аниони. Цвитерйонни рецептори.

Молекулни домакин-гост системи в разтвор. Кавитанди. Циклодекстрини. Молекулни клипсове и пинсети. Циклофани. Криптофани. Ковалентни рецепторни системи. Карцеранди и хемикарцеранди.

Асоциация. Спонтанно асемблиране (асоциация). Протеини и фолдамери. Други биологични системи. Асемблиране на синтетични системи. Асемблиране на координационни системи. Асоциация на комплекси посредством водородни връзки. Катенани и ротаксани. Хеликати. Молекулни възли.

Молекулни устройства. Въведение. Надмолекулна фотохимия. Предаване на информация и сигнали. Молекулна електроника. Молекулни аналози на механичните машини. Нелинейни оптични материали. Надмолекулни полимери, гелове и влакна. Дендримери.

Ковалентни полимери с надмолекулни свойства. Спонтанно асемблиращи се полимери. Поликатенани и полиротаксани.

Съставил:

Проф. дхн Людмил Антонов