

СУПРАМОЛЕКУЛЯРНАЯ ХИМИЯ

Методы исследования
супермолекул и
супрамолекулярных ансамблей

Задачи

- Выявление существования межмолекулярных связей и нахождение их **энергетических характеристик** (при помощи спектроскопических методов - ИК-, КР-, неупругое рассеяние нейтронов),
- Выявление существования межмолекулярных связей и нахождение их **геометрических характеристик** (при помощи дифракционных методов),
- **Статистические исследования** межмолекулярных взаимодействий на основании анализа данных, накопленных для большого массива соединений,

Задачи

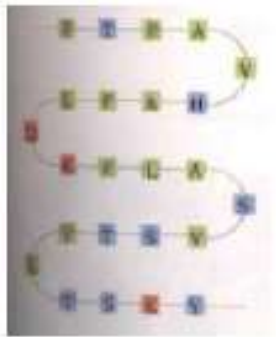
- Исследование роли межмолекулярных взаимодействий и надмолекулярной организации в формировании физических свойств (анизотропия отклика на внешние воздействия, такие, например, как изменения температуры, давления), магнитные свойства, цветность и др.,
- Моделирование межмолекулярных взаимодействий для расчетов энтальпий и энтропий с целью предсказания полиморфизма: существования, условий получения и свойств максимально возможного числа полиморфных модификаций,
- Экспериментальное и теоретическое исследование роли межмолекулярных взаимодействий в фазовых переходах и химических реакциях с участием супрамолекулярных ансамблей.

Какая информация о супрамолекулярных взаимодействиях нас интересует?

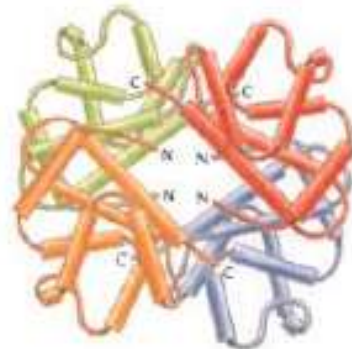
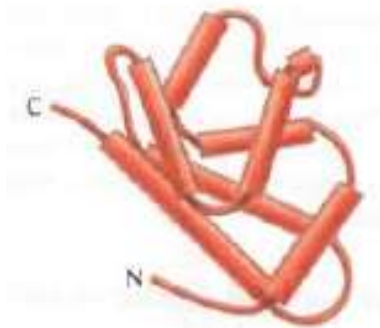
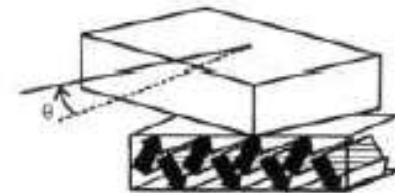
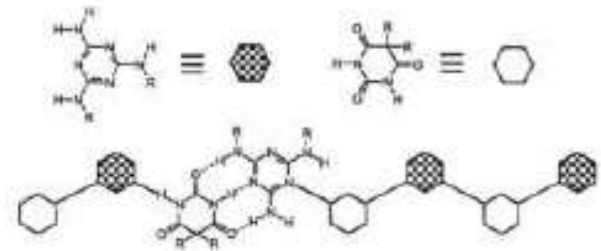
- Какие существуют типы межмолекулярных взаимодействий? (*кристаллография, спектроскопия*)
- Каковы геометрические параметры межмолекулярных связей? (*кристаллография*)
- Являются ли взаимодействия направленными? (*кристаллография*)
- Насколько сильны взаимодействия? (*ab initio теоретические расчеты, спектроскопия*)

Четыре уровня рассмотрения структуры биополимеров (а) и кристаллических материалов (б)

а)



б)



Основные методы

- Хроматография, масс-спектрометрия
- Колебательная спектроскопия (ИК, КР, неупругое рассеяние нейтронов)
- Оптическая спектроскопия (УФ- и видимая области)
- ЯМР-спектроскопия
- ЭПР-спектроскопия
- ОЖЕ-спектроскопия
- Рентгено-электронная спектроскопия
- EXAFS и XANES (Extended X-Ray Absorption Fine Structure и X-ray Absorption Near Edge Structure) – спектроскопии

Основные методы

- Дифракция рентгеновского излучения
- Дифракция нейтронов
- Электронная микроскопия
- Оптическая микроскопия

ОГРОМНОЕ РАЗНООБРАЗИЕ ВАРИАНТОВ

Основные методы

- Термический анализ и калориметрия
- Атомно-силовая и туннельная микроскопия
- Диэлектрическая спектроскопия
- Исследование проводимости
- Малоугловое рассеяние (нейтронов, рентгеновского излучения, света)
- Исследование вязкости
- Вычислительные методы, моделирование (МД, DFT)

Основные объекты

- Объем кристаллов
- Объём аморфных объектов
- Поверхность
- Двумерные пленки (свободные или на поверхности)
- Раствор
- Отдельные макромолекулы
- Макромолекулы в растворе
- Макромолекулы в кристалле
- Макромолекулы в клетке

Примеры публикаций

- <http://journals.iucr.org/m/issues/2017/02/00/ai5002/index.html> ([In-cell NMR: a topical review](#))
- <http://journals.iucr.org/m/issues/2017/04/00/hi5644/index.html> ([XFELs for structure and dynamics in biology](#))
- <http://journals.iucr.org/m/issues/2017/03/00/it5009/index.html> ([Experimental strategies for imaging bioparticles with femtosecond hard X-ray pulses](#))
- <http://journals.iucr.org/m/issues/2015/02/00/it5004/index.html> ([Serial femtosecond crystallography: the first five years](#))
- <http://journals.iucr.org/m/issues/2017/04/00/lt5004/index.html> ([NMR crystallography: structure and properties of materials from solid-state nuclear magnetic resonance observables](#))
- <http://journals.iucr.org/m/issues/2017/04/00/it5011/index.html> ([Serial millisecond crystallography of membrane and soluble protein microcrystals using synchrotron radiation](#). J. M. Martin-Garcia, C. E. Conrad, G. Nelson, N. Stander, N. A. Zatsepin, J. Zook, L. Zhu, J. Geiger, E. Chun, D. Kissick, M. C. Hilgart, C. Ogata, A. Ishchenko, N. Nagaratnam, S. Roy-Chowdhury, J. Coe, G. Subramanian, A. Schaffer, D. James, G. Ketwala, N. Venugopalan, S. Xu, S. Corcoran, D. Ferguson, U. Weierstall, J. C. H. Spence, V. Cherezov, P. Fromme, R. F. Fischetti & W. Liu (2017). IUCrJ 4, 439-454)

Примеры публикаций

- <http://journals.iucr.org/m/issues/2017/05/00/ti5010/index.html> ([Real-time powder diffraction studies of energy materials under non-equilibrium conditions](#). V. K. Peterson, J. E. Auckett & W.-K. Pang (2017). IUCrJ 4, 540-554.)
- <http://journals.iucr.org/m/issues/2017/05/00/kf5002/index.html> ([Single-particle cryo-EM using alignment by classification \(ABC\): the structure of Lumbricus terrestris haemoglobin](#). P. Afanasyev, C. Seer-Linnemayr, R. B. G. Ravelli, R. Matadeen, S. De Carlo, B. Alewijnse, R. V. Portugal, N. S. Pannu, M. Schatz & M. van Heel (2017). IUCrJ 4, 678-694).
- <http://journals.iucr.org/m/issues/2017/05/00/tj5011/index.html> ([Progress in small-angle scattering from biological solutions at high-brilliance synchrotrons](#). A. T. Tuukkanen, A. Spilotros & D. I. Svergun (2017). IUCrJ 4, 518-528.)
- <http://journals.iucr.org/m/issues/2017/05/00/ai5003/index.html> ([Protein microcrystallography using synchrotron radiation](#). M. Yamamoto, K. Hirata, K. Yamashita, K. Hasegawa, G. Ueno, H. Ago & T. Kumasaka (2017). IUCrJ 4, 529-539.)
- <http://journals.iucr.org/m/issues/2017/04/00/hi5645/index.html> ([Segregation of lipids near acetylcholine-receptor channels imaged by cryo-EM](#). N. Unwin (2017). IUCrJ 4, 393-399.)
- <http://journals.iucr.org/m/issues/2017/04/00/hi5649/index.html> ([Protein crystallography and drug discovery: recollections of knowledge exchange between academia and industry](#). T. L. Blundell (2017). IUCrJ 4, 308-321)

Примеры публикаций

- <http://journals.iucr.org/m/issues/2016/02/00/mf5012/index.html> ([In cellulo serial crystallography of alcohol oxidase crystals inside yeast cells](#). A. J. Jakobi, D. M. Passon, K. Knoops, F. Stellato, M. Liang, T. A. White, T. Seine, M. Messerschmidt, H. N. Chapman & M. Wilmanns (2016). IUCrJ 3, 88-95.)
- <http://journals.iucr.org/m/issues/2017/01/00/ti5008/index.html> ([Raw diffraction data preservation and reuse: overview, update on practicalities and metadata requirements](#). L. M. J. Kroon-Batenburg, J. R. Helliwell, B. McMahon & T. C. Terwilliger (2017). IUCrJ 4, 87-99.)
- <http://journals.iucr.org/m/issues/2016/06/00/ro5007/index.html> ([A multicrystal diffraction data-collection approach for studying structural dynamics with millisecond temporal resolution](#). R. Schubert, S. Kapis, Y. Gicquel, G. Bourenkov, T. R. Schneider, M. Heymann, C. Betzel & M. Perbandt (2016). IUCrJ 3, 393-401.)
- <http://journals.iucr.org/m/issues/2016/01/00/jt5011/index.html> ([Peptide binding to a bacterial signal peptidase visualized by peptide tethering and carrier-driven crystallization](#). Y. T. Ting, P. W. R. Harris, G. Batot, M. A. Brimble, E. N. Baker & P. G. Young (2016). IUCrJ 3, 10-19)

Примеры публикаций

- <http://journals.iucr.org/m/issues/2016/03/00/yc5007/index.html> ([In situ ultra-small-angle X-ray scattering study under uniaxial stretching of colloidal crystals prepared by silica nanoparticles bearing hydrogen-bonding polymer grafts](#). R. Ishige, G. A. Williams, Y. Higaki, N. Ohta, M. Sato, A. Takahara & Z. Guan (2016). IUCrJ 3, 211-218)
- <http://journals.iucr.org/m/issues/2017/02/00/ct5003/index.html> ([The application of tailor-made force fields and molecular dynamics for NMR crystallography: a case study of free base cocaine](#). X. Li, M. A. Neumann & J. van de Streek (2017). IUCrJ 4, 175-184)
- <http://journals.iucr.org/m/issues/2016/04/00/lz5011/index.html> ([Serial crystallography captures enzyme catalysis in copper nitrite reductase at atomic resolution from one crystal](#). S. Horrell, S. V. Antonyuk, R. R. Eady, S. S. Hasnain, M. A. Hough & R. W. Strange (2016). IUCrJ 3, 271-281.)
- <http://journals.iucr.org/m/issues/2017/05/00/lt5002/index.html> ([Structural aspects of displacive transformations: what can optical microscopy contribute? Dehydration of \$\text{Sm}_2\(\text{C}_2\text{O}_4\)_3 \cdot 10\text{H}_2\text{O}\$ as a case study](#). A. A. Matvienko, D. V. Maslennikov, B. A. Zakharov, A. A. Sidelnikov, S. A. Chizhik & E. V. Boldyreva (2017). IUCrJ 4, 588-597)
- <http://journals.iucr.org/m/issues/2015/02/00/fc5007/index.html> ([Advanced ensemble modelling of flexible macromolecules using X-ray solution scattering](#). G. Tria, H. D. T. Mertens, M. Kachala & D. I. Svergun (2015). IUCrJ 2, 207-217.)

Примеры публикаций

- <http://journals.iucr.org/m/issues/2014/04/00/it5001/index.html> ([Room-temperature macromolecular serial crystallography using synchrotron radiation](#). F. Stellato, D. Oberthür, M. Liang, R. Bean, C. Gati, O. Yefanov, A. Barty, A. Burkhardt, P. Fischer, L. Galli, R. A. Kirian, J. Meyer, S. Panneerselvam, C. H. Yoon, F. Chervinskii, E. Speller, T. A. White, C. Betzel, A. Meents & H. N. Chapman (2014). IUCrJ 1, 204-212).
- <http://journals.iucr.org/m/issues/2015/01/00/ed5003/index.html> ([Advanced grazing-incidence techniques for modern soft-matter materials analysis](#). A. Hexemer & P. Müller-Buschbaum (2015). IUCrJ 2, 106-125.)
- <http://journals.iucr.org/m/issues/2015/02/00/jt5008/index.html> ([Lipidic cubic phase serial millisecond crystallography using synchrotron radiation](#). P. Nogly, D. James, D. Wang, T. A. White, N. Zatsepin, A. Shilova, G. Nelson, H. Liu, L. Johansson, M. Heymann, K. Jaeger, M. Metz, C. Wickstrand, W. Wu, P. Båth, P. Berntsen, D. Oberthuer, V. Panneels, V. Cherezov, H. Chapman, G. Schertler, R. Neutze, J. Spence, I. Moraes, M. Burghammer, J. Standfuss & U. Weierstall (2015). IUCrJ 2, 168-176.)

Примеры публикаций

- <http://journals.iucr.org/m/issues/2014/05/00/cw5003/index.html> ([Room-temperature serial crystallography using a kinetically optimized microfluidic device for protein crystallization and on-chip X-ray diffraction](#). M. Heymann, A. Opthalage, J. L. Wierman, S. Akella, D. M. E. Szebenyi, S. M. Gruner & S. Fraden (2014). IUCrJ 1, 349-360.)
- <http://journals.iucr.org/m/issues/2017/05/00/tj5011/index.html> ([Progress in small-angle scattering from biological solutions at high-brilliance synchrotrons](#). A. T. Tuukkanen, A. Spilotros & D. I. Svergun (2017). IUCrJ 4, 518-528.)
- <http://journals.iucr.org/m/issues/2014/02/00/cw5002/index.html> ([Femtosecond X-ray diffraction from two-dimensional protein crystals](#). M. Frank, D. B. Carlson, M. S. Hunter, G. J. Williams, M. Messerschmidt, N. A. Zatsepin, A. Barty, W. H. Benner, K. Chu, A. T. Graf, S. P. Hau-Riege, R. A. Kirian, C. Padeste, T. Pardini, B. Pedrini, B. Segelke, M. M. Seibert, J. C. H. Spence, C.-J. Tsai, S. M. Lane, X.-D. Li, G. Schertler, S. Boutet, M. Coleman & J. E. Evans (2014). IUCrJ 1, 95-100.)
- <http://journals.iucr.org/m/issues/2015/05/00/lz5008/index.html> ([Serial femtosecond crystallography of soluble proteins in lipidic cubic phase](#). R. Fromme, A. Ishchenko, M. Metz, S. R. Chowdhury, S. Basu, S. Boutet, P. Fromme, T. A. White, A. Barty, J. C. H. Spence, U. Weierstall, W. Liu & V. Cherezov (2015). IUCrJ 2, 545-551.)

Примеры публикаций

- <http://journals.iucr.org/m/issues/2015/02/00/ti5004/index.html> ([Functional materials analysis using in situ and in operando X-ray and neutron scattering](#). V. K. Peterson & C. M. Papadakis (2015). IUCrJ 2, 292-304.)
- <http://journals.iucr.org/m/issues/2015/02/00/fs5088/index.html> ([Synchrotron radiation macromolecular crystallography: science and spin-offs](#). J. R. Helliwell & E. P. Mitchell (2015). IUCrJ 2, 283-291)
- <http://journals.iucr.org/m/issues/2014/05/00/bi5033/index.html> ([Structural disorder and transformation in crystal growth: direct observation of ring-opening isomerization in a metal-organic solid solution](#). J.-J. Jiang, J.-R. He, X.-Q. Lü, D.-W. Wang, G.-B. Li & C.-Y. Su (2014). IUCrJ 1, 318-327.)
- <http://journals.iucr.org/m/issues/2016/04/00/jt5013/index.html> ([Structure of a heterogeneous, glycosylated, lipid-bound, in vivo-grown protein crystal at atomic resolution from the viviparous cockroach *Diploptera punctata*](#). S. Banerjee, N. P. Coussens, F.-X. Gallat, N. Sathyanarayanan, J. Srikanth, K. J. Yagi, J. S. S. Gray, S. S. Tobe, B. Stay, L. M. G. Chavas & S. Ramaswamy (2016). IUCrJ 3, 282-293.)
- <http://journals.iucr.org/m/issues/2016/02/00/mf5012/index.html> ([In cellulo serial crystallography of alcohol oxidase crystals inside yeast cells](#). A. J. Jakobi, D. M. Passon, K. Knoops, F. Stellato, M. Liang, T. A. White, T. Seine, M. Messerschmidt, H. N. Chapman & M. Wilmanns (2016). IUCrJ 3, 88-95).

Примеры публикаций

- [Crystallographic studies of gas sorption in metal-organic frameworks](#). E. J. Carrington, I. J. Vitórica-Yrezábal & L. Brammer (2014). Acta Cryst. B70, 404-422.
- <http://journals.iucr.org/b/issues/2014/04/00/dq5009/index.html> ([Aperiodic crystals and superspace concepts](#))
- https://www.nobelprize.org/nobel_prizes/chemistry/laureates/2017/
- https://www.nobelprize.org/nobel_prizes/chemistry/laureates/2017/popular-chemistryprize2017.pdf

The Nobel Prize in Chemistry 2017 was awarded to Jacques Dubochet, Joachim Frank and Richard Henderson "for developing cryo-electron microscopy for the high-resolution structure determination of biomolecules in solution".

