

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ

**ЛЬВІВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ІВАНА ФРАНКА**

**МЕТОДИЧНІ РЕКОМЕНДАЦІЇ
ДО САМОСТІЙНОЇ РОБОТИ
З ДИСЦИПЛІНИ
“МОЛЕКУЛЯРНИЙ ДИЗАЙН”**

Львів – 2019

Затверджено
Вченою Радою хімічного
факультету

Уклали: доц. Біла-Лялька Є.Є.

Рецензент: проф. Обушак М.Д.

В авторській редакції

Відповідальний за випуск: проф. Обушак М.Д.

© Біла-Лялька Є.Є., 2019

ОПИС НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Місце в структурно-логічній схемі спеціальності. Навчальна дисципліна "Молекулярний дизайн" є складовою циклу дисциплін вільного вибору студента при підготовці фахівців освітньо-кваліфікаційного рівня "магістр", є базовою для проведення наукової роботи в напрямку «органічна хімія». Читасться у 10 семестрі. Закінчується іспитом.

Галузь знань: 0401 Природничі науки

Спеціальність: 8.070301. Хімія

Освітньо-кваліфікаційний рівень: Магістр

МЕТА І ЗАВДАННЯ НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Мета: Формування уявлення про нові біологічних матеріали на основі досягнень молекулярного дизайну. Використання молекулярних конструкцій для вияснення механізмів дії біологічно активних сполук. Узагальнення, систематизація і поглиблення знань з органічної хімії. Формування нетрадиційних підходів до системи знань з органічної хімії, формування уявлень про взаємозв'язок будови та реакційної здатності органічних сполук.

Завдання: Вивчити основні положення структурно-орієнтованого молекулярного дизайну, "аномальні" структури в органічній хімії, основні принципи функціонально-орієнтованого молекулярного дизайну.

В результаті вивчення даного курсу студент повинен

знати:

- основні положення структурно-орієнтованого молекулярного дизайну,
- "аномальні" структури в органічній хімії,
- основні принципи функціонально-орієнтованого молекулярного дизайну.

вміти:

- застосовувати основні положення структурно-орієнтованого та функціонально-орієнтованого молекулярного дизайну
- використовувати молекулярні конструкції для вияснення механізмів дії біологічно активних сполук.

ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Тема 1. Структурно-орієнтований молекулярний дизайн. Створення нових структур, проблемних для органічної хімії.

Вияснення закономірностей "структура – властивості" органічних сполук. Платонові вуглеводні та споріднені структури. Кубан. Кінетична та термодинамічна стабільність молекули. Одержання. Хімічні перетворення.

Самостійна робота. Конструювання каркасних молекул. Стратегія формування малих, середніх та великих циклів.

Тема 2. Жорсткі каркасні системи.

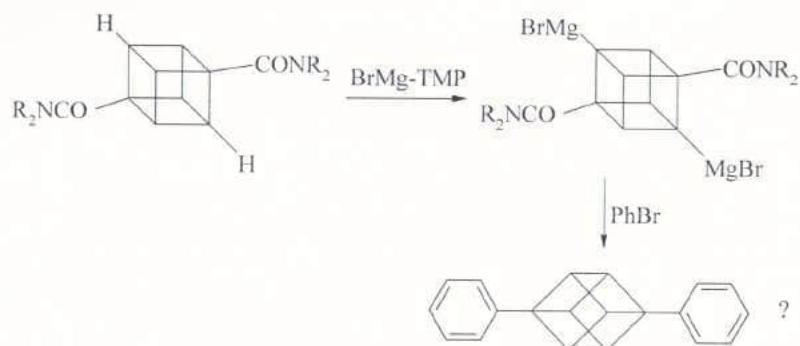
Системи на основі тетраедрану. Проблеми стабільності. "Корсетний ефект". Гомоароматичність. Утворення катіон-радикалів. Особливості хімічної поведінки додекаедрану. Додекаедран. Термодинамічна стабільність і висока реакційна здатність. Хімічні перетворення додекаедрану. Синтез Паккета. Фулерени. Будова. Реакційна здатність. Шляхи практичного використання.

Самостійна робота. Підходи до формування молекул з третинними атомами карбону у голові мостикових структур. Квантово-хімічний розрахунок каркасних молекул методами АМ1, ППП. Стереохімічні зображення розрахованих молекул.

Тема 3. Деревовидні молекули.

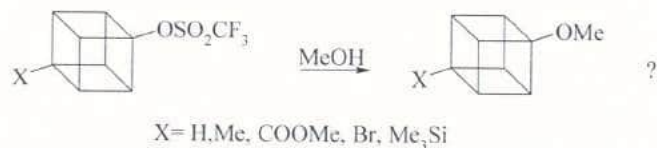
Дендримери. Зіркоподібні дендримери. Основні підходи до синтезу дендримерів. Стратегія синтезу. Дивергентний синтез, синтез від периферії до центру. Дендримерні молекули з центральним атомом карбону. Дендримерні молекули з центральним атомом нітрогену. Арбароли. Методи синтезу. Сполуки з топологічним зв'язком. Катенани, ротаксани. Основні стратегічні підходи при вирішенні синтетичних завдань. Вузли. Підходи до

38. Про що свідчить наведена нижче схема перетворення:



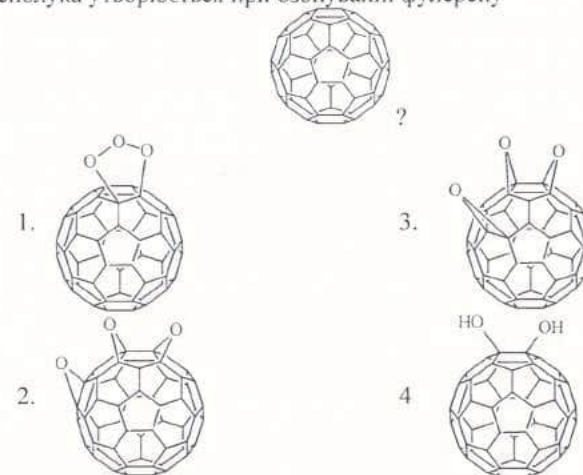
1. Стабільність кубільного аніона
2. Стабільність кубільного катіона
3. Стабільність кубільного радикала
4. Термодинамічну стабільність молекули кубану

39. Про що свідчить наведена нижче схема перетворення:

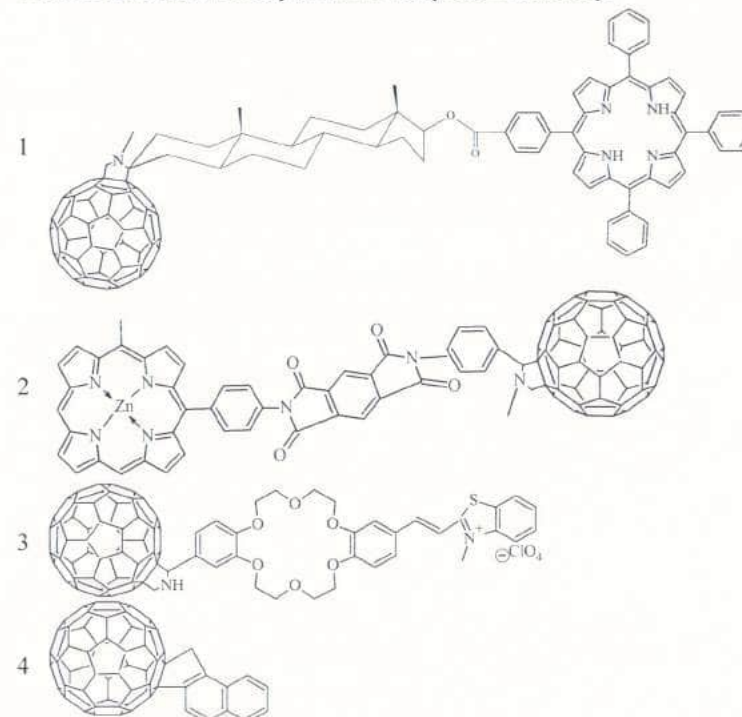


1. Стабільність кубільного аніона
2. Стабільність кубільного катіона
3. Стабільність кубільного радикала
4. Термодинамічну стабільність молекули кубану

40. Яка сполука утворюється при озонуванні фулерену



41. Яка з наведених сполук містить стероїдний спейсер?



РЕКОМЕНДОВАНА ЛИТЕРАТУРА

Основна

1. *Смит В., Бочков А., Кейл Р.* Органический синтез. Наука и искусство. М. Мир. 2001. 573с.
1. *Бочков А.Ф., Смит В.А.* Органический синтез. М. Наука. 1987. 304с.
2. *Леменовский Д.А., Левицкий М.М.* Выдающиеся молекулы. Итоги столетия // Росс. Хим. Ж., 2000, Т.44, С.63.
3. *Ros T. Da, Prato V.* Medicinal chemistry with fullerenes and fullerene derivative // Chem. Commun., 1999, С.663/
4. *Караулова Е.Н., Багрий Е.И.* Фуллерены. Методы функционализации и перспективы применения производных // Усп. Хим., 1999, Т.68, С.979.
5. *Белецкая И.П., Чучурюкин А.В.* Синтез и свойства функционально замещенных дендримеров// Усп. Хим., 2000, Т.69, С.699.
6. *Панова И.Г., Топчиева И.Н.* Ротаксаны и полиротаксаны. Синтез и супрамолекулярные устройства на их основе // Усп. Хим. 2001, Т.70, С.28.
7. *Mayor M., Lehn J.-M.* Reducible Nanosize Macrocycles // J. Am. Chem. Soc. 1999. Vol. 121. P.11231.
8. *Jasat A., Sheman J. C.* Carceplexes and Hemicarceplexes // Chem. Rev., 1999. Vol. 99. P.931.

Додаткова

1. *Стид Дж.В., Этвуд Дж.Л.* Супрамолекулярная химия. М.: Мир. 2005. Т.1-2.
2. *Лен Ж-М.* Супрамолекулярная химия М.: Мир. 2001.