

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Кузбасский государственный технический университет
имени Т. Ф. Горбачева»

Кафедра технологии органических веществ и нефтехимии

Составитель
Т. С. Котельникова

АРХИТЕКТУРА ХИМИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ И МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ДИЗАЙН

**Методические указания к самостоятельной работе
практическим занятиям**

Рекомендовано учебно-методической комиссией
направления подготовки 18.04.01 Химическая технология
в качестве электронного издания
для использования в образовательном процессе

Рецензент:

Непомнящих Ю. В. – доцент кафедры технологии органических веществ и нефтехимии, кандидат химических наук

Котельникова Татьяна Сергеевна

Архитектура химических соединений и молекулярный дизайн: методические указания к самостоятельной работе [Электронный ресурс] для обучающихся направления подготовки 18.04.01 Химическая технология, профиля Технология продуктов основного органического и нефтехимического синтеза, всех форм обучения / сост. Т. С. Котельникова; КузГТУ. – Электрон. дан. – Кемерово, 2019.

В методических указаниях изложены цели, содержание, методы выполнения, формы и сроки контроля самостоятельной работы студентов, изучающих дисциплину «Архитектура химических соединений и молекулярный дизайн».

© КузГТУ, 2019

© Котельникова Т. С.,
составление, 2019

ОБЩИЕ СВЕДЕНИЯ

В современной органической химии проектирование и создание новых типов органических молекул с заданными структурными характеристиками получило название «молекулярный дизайн». Получение молекулярных структур различных типов приобретает все большее значение. Оно не только обогащает теоретическую органическую химию новыми идеями, но и может иметь практический выход, например, в решении задач по синтезу биологически активных препаратов, органических катализаторов, материалов для регистрации информации и т. д.

Для освоения дисциплины необходимо владеть знаниями умениями, навыками, полученными в рамках высшего образования. Дисциплина «Архитектура химических соединений и молекулярный дизайн» базируется на курсах «Теоретические и экспериментальные методы исследования в химии», «Органическая химия», «Избранные главы органической химии», «Стратегия органического синтеза», «Теоретические основы технологии органического и нефтехимического синтеза».

Изучение дисциплины способствует более глубокому пониманию строения, реакционной способности и синтеза химических соединений и нацелено на приобретение студентами знаний в области применения компьютерных технологий в моделировании сложных молекулярных структур и определении их основных геометрических и энергетических характеристик.

Изучение дисциплины осуществляется в 1 семестре и заканчивается сдачей зачета. Объем дисциплины составляет 108 часов, в том числе 36 час практических занятий и 72 часа самостоятельной работы.

1. ЦЕЛЬ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ

Целью самостоятельной работы студентов является систематическое изучение теоретического материала в течение семестра, закрепление и углубление знаний и навыков, полученных на практических занятиях, а также формирование самостоятельности в поиске и приобретении новых знаний и умений.

Систематическое изучение дисциплины позволит студенту достигнуть уровня требований ФГОС к профессиональной подготовке.

2. СОДЕРЖАНИЕ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ СТУДЕНТОВ

Самостоятельная работа студентов включает в себя изучение теоретического материала по литературным источникам, основной перечень которых представлен в разделе 6.

Ниже приведен перечень тем для самостоятельной проработки.

1. Значение, цели и задачи органического синтеза

История развития органического синтеза. Синтез как инструмент исследования. Выявление закономерностей, связывающих строение соединений с их свойствами. Создание новых структур, проблемных для органической химии. Расширение круга известных органических соединений

Литература 1, с. 7–22; 42–46; 3, с. 7–55

2. Тактика органического синтеза

Органическая реакция и синтетический метод. Образование С–С связи: ключевая тактическая проблема органического синтеза. Электрофилы и нуклеофилы в реакциях образования С–С связей. Взаимопревращения функциональных групп. Синтоны как универсальные строительные блоки. Специфика построения циклических структур. Принципы макроциклизации. Циклоприсоединение. Расщепление С–С связей и перестройка углеродного скелета.

Литература 1; 3, с. 63–155; 5, с. 9–39

3. Кинетический и термодинамический контроль в органическом синтезе

Возможность протекания органической реакции: термодинамический запрет, кинетический запрет. Переходное состояние. Потенциальный барьер реакции. Энергетические профили реакций с кинетическим и термодинамическим контролем. Влияние

природы растворителя, температуры, наличия катализатора, облучения на возможность реализации требуемого пути реакции. Интермедиаты.

Литература 3, с. 64–78; 5, с. 75–82

4. Селективность в органическом синтезе

Проблема селективности реакций при планировании синтеза. Хемо- и региоселективность. Стереоселективность в органическом синтезе. Хемо-, регио- или стереоспецифичность реакций.

Способы управления селективностью органических реакций: варьирование природы реагента, активация альтернативных реакционных центров субстрата, защита функциональных групп

Литература 3, с. 158–195; 5, с. 75–99

5. Разработка стратегии органического синтеза

Роль планирования в синтезе. Особенности структуры целевых соединений, определяющие стратегию синтеза. Планирование «от исходных соединений». Планирование «от целевой структуры». Ретросинтетический анализ. Разборка стратегического коря молекулы. Выбор «стратегической связи» в целевой молекуле. Планирование синтеза по аналогии и «нестандартного». Выбор оптимального пути синтеза органического соединения. Правила составления схем синтеза. Линейное и конвергентное построение схем синтеза

Литература 1, 22–42; 3, с. 289–330; 5, с. 9–39

6. Компьютерное планирование органического синтеза

Концепции создания компьютерных программ для разработки стратегий синтеза. Общие принципы функционирования системы LHASA. Анализ стратегического коря целевой молекулы, поиск стратегических связей и методов для их сборки. Поиск возможностей построения целевой структуры с помощью стратегических реакций. Иерархическая организация операторов системы LHASA относительно эффективности выполнения химических трансформаций. Модуль оценки эффективности генерируемых трансформаций. Роль пользователя в процессе ретросинтетического поиска с помощью компьютера.

Система SYNGET. Генерация оптимальных путей для сборки целевой молекулы из доступных исходных веществ как основное направление этой системы. Применение каталога соединений-предшественников целевой молекулярной структуры.

Литература 3, с. 351–363

7. Структурно-ориентированный дизайн

Создание молекул необычной структуры. Полиэдрические углеводороды. Кубан, его строение, свойства, производные. Перспективы применения производных кубана. Додекаэдран, его строение, свойства, история дизайна, схема дизайна. Проблемы синтеза тетраэдрана, его производные.

Фуллерены, открытие и дизайн. Бакибол, его строение, свойства. Древовидные молекулы. Дизайн дендримеров. Соединения с «топологической связью»: катенаны, ротаксаны. Пропеллан, его строение, свойства.

Литература 3, с. 369–444

8. Функционально-ориентированный дизайн

Дизайн соединений с заданными свойствами. Стратегия функционально-ориентированного дизайна. Открытие макроциклических полиэфиров. Краун-эфиры. Коронанды. Комплексоны, их применение. Связывание катионов макроциклическими лигандами. Селективность комплексообразования. Криптанты, их строение. Криптантный эффект. Особенность методов синтеза коронандов и криптантов. Возможности молекулярных структур с заданным набором комплексообразующих свойств.

Литература 3, с. 459–475

9. Биомиметика ферментов и молекулярного узнавания

Проблема молекулярного узнавания. Создание искусственных молекулярных систем, способных моделировать биологические явления молекулярного узнавания и связывания. Проблема создания ферментоподобных катализаторов. Селективность связывания и управление ею. Циклофаны как молекулы-хозяева для ароматических углеводородов. Управление селективностью связывания путем изменения структуры мультидентатных лигандов. Фотоуправляемость макроциклических полиэфиров, содержащих неопределенный фрагмент, за счет геометрической изомеризации.

Управление селективностью связывания в дизайне молекулярных систем, содержащих два различных типа связывающих фрагментов. Энантиселективные катализаторы в органическом синтезе. Лиганды с заданной селективностью: сферанды, кавитанды, карцеранды (лиганды с замкнутой оболочкой). Карцерплексы как комплексы карцерандов с молекулой-гостем. Особенности системы «молекула внутри молекулы».

Литература 3, с. 476–510

10. Супрамолекулярная химия

Определение супрамолекулярной химии. Объекты супрамолекулярной химии: супрамолекулярные ансамбли и супермолекулы. Классификация супрамолекулярных соединений «хозяин-гость». Рецептор и его субстрат. Хелатный и макроциклический эффекты. Природа супрамолекулярных взаимодействий. Основные функции супрамолекулярных объектов: молекулярное распознавание, превращение и перенос. Тенденции развития супрамолекулярной химии

Литература 6, с. 27–60

11. Изучение пользовательского интерфейса программы Chem3DUltra пакета ChemOffice

Элементы главной и пользовательской панели. Пункты главного меню: File, Edit, View, Tools, Object, Analyze, MM2, Gamess, Gaussian, Морас. Окно визуализации как средство создания, редактирования и отображения молекулярных структур

Литература 4, с. 8–35

12. Изучение пользовательского интерфейса программы HyperChem

Элементы главной и пользовательской панели. Пункты главного меню: File, Edit, Build, Select, Display, Databases, Setup. Окно визуализации как средство создания, редактирования и отображения молекулярных структур. Средства вращения и перемещения молекулы и ее отдельных фрагментов

Литература 4, с. 43–56, 347–349

3. МЕТОДЫ ВЫПОЛНЕНИЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ

При изучении дисциплины предусматриваются следующие формы самостоятельной работы студента:

- чтение основной и дополнительной литературы с конспектированием текстов;
- подготовка к опросу;
- написание реферата;
- подготовка к зачету.

Примерные темы рефератов:

1. Синтез как инструмент исследования.
2. Синтетический метод в органическом синтезе.
3. Возможность протекания органической реакции.
4. Решение проблем селективности в органическом синтезе.
5. Роль планирования в синтезе.
6. Органический синтез как основа молекулярного дизайна.
7. Понятие и направления молекулярного дизайна.
8. Кубан: строение, свойства, производные и перспективы их применения.
9. Фуллерены: открытие, дизайн, применение.
10. Краун-эфиры: открытие, дизайн, применение.
11. Криптанты, их применение.
12. Поданды: синтез, свойства, применение.
13. Соединения с топологической связью: катенаны, ротаксаны.
14. Объекты супрамолекулярной химии.
15. Природа супрамолекулярных взаимодействий.

Требования к написанию реферата

Реферативная работа обязательно должна содержать: титульный лист, оглавление, введение, основную часть, состоящую из разделов и подразделов, заключение или выводы, список используемой литературы.

Титульный лист должен содержать: название министерства, полное название университета, название кафедры, тип работы и название темы работы, ФИО студента, индекс группы, ФИО преподавателя, город и год написания.

Работу над рефератом необходимо начать с составления его плана. При описании отдельного вопроса не обязательно точно придерживаться того порядка изложения, который был в литературном источнике. Во введении указываются цель и задачи, раскрываемые в выбранной теме, актуальность темы.

В основной части раскрывается содержание темы, представляются материалы из литературных источников с творческим, практическим подходом к ним. Изложение работы должно быть логически стройным, понятным, сопровождаться ссылками на литературные источники, которые вписываются по ходу текста (в квадратных скобках).

Заключение должно содержать обобщающие выводы, положения по переработанной теме, последние достижения в области исследований по теме.

Список используемой литературы оформляется в соответствии с существующими правилами составления библиографических описаний.

Реферативная работа оформляется в печатном виде на листах формата А4. Текст выполняется шрифтом TimesNewRoman, размер 14, полуторный межстрочный интервал, абзацный отступ 1,25 см, выравнивание по ширине строки, автоматическая расстановка переносов. Должны быть выполнены все требования к оформлению таблиц, рисунков. Формулы химических соединений, схемы синтеза, уравнения реакций рекомендуется изображать с помощью химического редактора ChemDraw. Общий объем работы должен составлять 12–15 страниц с обязательной их нумерацией.

При оценивании реферата учитываются следующие моменты:

- уровень раскрытия содержания темы;
- наличия рассмотрения проблем, существующих в анализируемом вопросе;
- достоинства работы и ее недостатки;
- выполнение формальных требований по оформлению реферата.

4. ФОРМЫ КОНТРОЛЯ И СРОКИ КОНТРОЛЯ

Контроль знаний студентов включает формы текущего и итогового контроля.

Текущий контроль осуществляется на протяжении всего семестра в виде оценки самостоятельной работы, а также работы студента на практических занятиях. Оценочным средством для текущего контроля освоения дисциплины является устный опрос. Опрос проводится на 5, 9, 13 и 17 неделях семестра.

Примерные вопросы к проверке усвоения дисциплины

Опрос 1

1. Понятие органического синтеза.
2. Цели органического синтеза.
3. Задачи органического синтеза.
4. Понятие тактики органического синтеза.
5. Понятие стратегии органического синтеза.
6. Способы организации синтетических схем.
7. Факторы, влияющие на ход реакции.
8. Стереоселективность химических реакций.
9. Кинетический контроль химических реакций.
10. Термодинамический контроль химических реакций.
11. Общие приемы работы с программой ChemDraw. Возможности программы ChemDraw.
12. Алгоритм построения плоских молекулярных структур с использованием программы ChemDraw пакета ChemOffice.

Опрос 2

13. Способы изображения молекулярных структур.
14. Возможности программы Chem3D Ultra.
15. Создание и анализ геометрии трехмерных моделей молекул в среде Chem3D Ultra.
16. Возможности программы HyperChem.
17. Редактирование и анализ геометрии трехмерных моделей молекул в среде HyperChem.
18. Понятие молекулярного дизайна.
19. Структурно-ориентированный дизайн.

20. Кубан, его строение, свойства, производные.
21. Перспективы применения производных кубана.
22. Додекаэдран, его строение, свойства, схема дизайна.
23. Фуллерены, открытие и дизайн.
24. Применение фуллеренов.

Опрос 3

25. Бакибол, его строение, свойства.
26. Древовидные молекулы. Дизайн дендримеров.
27. Пропеллан, его строение, свойства.
28. Функционально-ориентированный дизайн.
30. Комплексоны, их применение.
31. Криптанты, их строение. Криптантный эффект.
32. Эмпирические методы расчета физических и термодинамических свойств химических соединений.
33. Квантово-химические методы расчета физико-химических свойств соединений.
34. Полуэмпирические методы квантово-химических расчетов. Области применения.
35. Алгоритм расчета физических и термодинамических свойств соединений с помощью программы Chem3D Ultra.
36. Минимизация энергии и оптимизация геометрии молекулярной структуры.
37. Алгоритм расчета физических и термодинамических свойств соединений с помощью программы HyperChem.

Опрос 4

38. Виды межмолекулярных взаимодействий.
39. Определение супрамолекулярной химии, ее объекты.
40. Классификация супрамолекулярных соединений «хозяин-гость».
41. Природа супрамолекулярных взаимодействий.
42. Основные функции супрамолекулярных объектов.
43. Алгоритм построения молекулярных орбиталей и распределения частичных зарядов на атомах соединений в программе Chem3D Ultra.
44. Алгоритм распределения зарядов на атомах соединений в программе HyperChem.

Промежуточная аттестация (итоговый контроль) обучающихся проводится в виде зачета согласно «Инструкции проведения экзаменов и зачетов КузГТУ Им 48-10» от 29.05.2015. К зачету допускаются студенты, выполнившие все практические задания, реферат и получившие по каждой из четырех текущих аттестаций оценку не ниже 60 баллов.

5. ТРЕБОВАНИЯ К ЗАЧЕТУ

Зачет проводится в виде опроса. При проведении промежуточного контроля обучающиеся отвечают на два вопроса. В соответствии с принятой в университете 100-балльной шкалой оценок для получения зачета студенту необходимо набрать не менее 65 баллов. Критерии оценивания ответов:

- 100 баллов – при правильном и полном ответе на два вопроса;
- 75...99 баллов – при правильном и полном ответе на один из вопросов и правильном, но не полном ответе на другой из вопросов;
- 50...74 баллов – при правильном и неполном ответе на два вопроса или правильном и полном ответе только на один из вопросов;
- 25...49 баллов – при правильном и неполном ответе только на один из вопросов;
- 0...24 баллов – при отсутствии правильных ответов на вопросы.

Перечень вопросов к зачету

1. Цели и задачи органического синтеза.
2. Стратегия органического синтеза.
3. Тактика органического синтеза.
4. Общие принципы планирования органического синтеза.
5. Планирование синтеза по литературным данным, по аналогии и "нестандартного".
6. Разбор путей получения некоторых сложных соединений.
7. Кинетический и термодинамический контроль в органическом синтезе.
8. Выбор оптимального пути синтеза органического соединения.
9. Компьютерное планирование синтеза органических соедине-

ний.

10. Решение проблем селективности в органическом синтезе.
11. Хемоселективность (функциональная селективность), регио- и стереоселективность.
12. Понятие молекулярный дизайн.
13. Структурно-ориентированный дизайн.
14. Кубан, его строение, свойства, производные. Перспективы применения производных кубана.
15. Додекаэдран: строение, свойства, история и схема дизайна.
16. Фуллерены, открытие и дизайн, применение.
17. Бакибол, его строение, свойства.
18. Древовидные молекулы. Дизайн дендримеров.
19. Пропеллан, его строение, свойства.
20. Функционально-ориентированный дизайн.
21. Краун-эфиры: строение, свойства, перспективы применения.
22. Комплексоны, их применение.
23. Криптанты, их строение. Криптантный эффект.
24. Супрамолекулярная химия, определение, ее объекты.
25. Основные функции супрамолекулярных объектов.
26. Классификация супрамолекулярных соединений.
27. Виды межмолекулярных взаимодействий.
28. Способы изображения молекулярных структур.
29. Возможности программы ChemDraw. Общие приемы работы.
30. Алгоритм построения плоских молекулярных структур с использованием программы ChemDraw пакета ChemOffice.
31. Способы визуализации пространственных молекулярных структур с использованием программ Chem3D Ultra пакета ChemOffice и HyperChem.
32. Редактирование и анализ геометрии трехмерных моделей молекул в среде Chem3D Ultra.
33. Редактирование и анализ геометрии трехмерных моделей молекул в среде HyperChem.
34. Квантово-химические методы расчета физико-химических свойств соединений.
35. Полуэмпирические методы квантово-химических расчетов. Области применения.
36. Эмпирические методы расчета физических и термодинамических свойств химических соединений. Области применения.

37. Алгоритм расчета термодинамических свойств химических соединений.
38. Минимизация энергии и оптимизация геометрии молекулярной структуры.
39. Определение физических и термодинамических свойств соединений на основании их химического строения с использованием программы Chem3D Ultra.
40. Определение физических и термодинамических свойств соединений на основании их химического строения с использованием программы HyperChem.
41. Алгоритм построения молекулярных орбиталей и распределения частичных зарядов на атомах соединений в программе Chem3D Ultra.
42. Алгоритм распределения зарядов на атомах соединений в программе HyperChem.

6. СПИСОК РЕКОМЕНДУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

6.1. Основная литература

1. Кузнецов, Д. Г. Органическая химия. – Санкт-Петербург : Лань, 2016. – 556 с. – Режим доступа: <http://e.lanbook.com/book/72988>. – Загл. с экрана. (12.09.2018)
2. Гусев, А. И. Наноматериалы, наноструктуры, нанотехнологии: монография [Электронный ресурс]. – Москва : Физматлит, 2009. – 416 с. – Режим доступа: http://biblioclub.ru/index.php?page=book_red&id=68859. – Загл. с экрана. (12.09.2018)
3. Наквасина, М. А. Бионанотехнологии : достижения, проблемы, перспективы развития: учеб. пособие [Электронный ресурс]. – Воронеж : Издательский дом ВГУ, 2015. – 152 с. – Режим доступа: http://biblioclub.ru/index.php?page=book_red&id=441596. – Загл. с экрана. (12.09.2018)
4. Краунсодержащие органические хемосенсоры: тематический обзор [Электронный ресурс]. – Ростов-на-Дону : Издательство Южного федерального университета, 2008. – 40 с. – Режим доступа: http://biblioclub.ru/index.php?page=book_red&id=241063. – Загл. с экрана. (12.09.2018)
5. Минкин, В. И. Флуктуирующие циклополиеновые соединения

и их практическое использование: учебное пособие для магистрантов химического факультета [Электронный ресурс]. – Ростов-на-Дону : Издательство Южного федерального университета, 2009. – 143 с. – Режим доступа:

http://biblioclub.ru/index.php?page=book_red&id=241011. – Загл. с экрана. (12.09.2018)

6. Саргаев, П. М. Неорганическая химия. – Санкт-Петербург : Лань, 2013. – 384 с. – Режим доступа: <http://e.lanbook.com/book/36999>. – Загл. с экрана. (12.09.2018)

7. Павлов, Н. Н. Общая и неорганическая химия [Текст] : учебник для технологических и химико-технологических направлений подготовки бакалавров и магистров / Н. Н. Павлов. – Санкт-Петербург : Лань, 2011. – 496 с. – Доступна электронная версия: http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_cid=25&pl1_id=4034.

6.2. Дополнительная литература

1. Евстигнеева, Р. П. Тонкий органический синтез [Текст] : учеб. пособие для вузов / Р. П. Евстигнеева. – Москва : Химия, 1991. – 184 с.

2. Смит, В. А. Органический синтез: наука и искусство [Текст] / В. А. Смит, А. Ф. Бочков, Р. Кейпл; пер. а англ. В. А. Смита, А. Ф. Бочкова. – Москва : Мир, 2001. – 573 с.

3. Бочков, А. Ф. Органический синтез: цели, методы, тактика, стратегия [Текст] / А. Ф. Бочков, В. А. Смит; отв. ред. И. В. Торгов; АН СССР. – Москва : Наука, 1987. – 304 с.

4. Реутов, О. А. Органический синтез [Электронный ресурс]. – Москва : Гос. изд-во техн.-теорет. лит., 1953. – 65 с. – Режим доступа: http://biblioclub.ru/index.php?page=book_red&id=108844. – Загл. с экрана. (12.09.2018)

5. Гарновский, А. Д. Прогресс в молекулярном дизайне мономерных комплексов оснований Шиффа [Электронный ресурс]. – Ростов-на-Дону : Издательство Южного федерального университета, 2008. – 80 с. – Режим доступа: http://biblioclub.ru/index.php?page=book_red&id=240926. – Загл. с экрана. (12.09.2018)

6. Крашенинин, В. И. Симметрия в химии: учебное пособие [Электронный ресурс]. – Кемерово : Кемеровский государствен-

ный университет, 2013. – 80 с. – Режим доступа:

http://biblioclub.ru/index.php?page=book_red&id=232679. – Загл. с экрана. (12.09.2018)

7. Соловьев, М. Е. Компьютерная химия [Текст] / М. Е. Соловьев, М. М. Соловьев. – Москва : Солон-Пресс, 2005. – 536 с.

8. Рамбиди, Н. Г. Структура полимеров – от молекул до наноансамблей [Текст] : учеб. пособие / Н. Г. Рамбиди. – Долгопрудный : Интеллект, 2009. – 264 с.

9. Сайкс, П. Механизмы реакций в органической химии [Текст] / П. Сайкс ; пер. с англ. Н. Г. Луценко ; под ред. В. Ф. Травеня. – Москва : Химия, 1991. – 446 с.

10. Порай-Кошиц, М. А. Основы структурного анализа химических соединений [Текст] : учеб. пособие для хим. специальностей ун-тов / М. А. Порай-Кошиц. – Москва : Высшая школа, 1989. – 191 с.

11. Янсон, Э. Ю. Комплексные соединения [Текст] : учеб. пособие для вузов / Э. Ю. Янсон. – Москва : Высшая школа, 1968. – 174 с.

12. Дятлова, Н. М. Комплексоны и комплексоны металлов [Текст] / Н. М. Дятлова, В. Я. Темкина, К. И. Попов. – Москва : Химия, 1988. – 543 с.