**Хамидуллина, Альбина Салимьяновна.**

## Квантово-химическое исследование особенностей строения и комплексообразования линкомицина с паразамещенными нитробензолами : диссертация ... кандидата химических наук : 02.00.17. - Уфа, 2006. - 103 с. : ил.

## Оглавление диссертациикандидат химических наук Хамидуллина, Альбина Салимьяновна

ВВЕДЕНИЕ.

ГЛАВА 1. ОБЗОР ЛИТЕРАТУРЫ.

1.1. Взаимодействие органических молекул по типу «гость-хозяин».

1.1.1. Комплексы «закрытоцепных» «хозяев».

1.1.1.1. Краун-эфиры как «хозяева».

1.1.1.2. Циклодекстрины как «хозяева».

1.1.1.3. Каликсарены как «хозяева».

1.1.1.4. Циклические антибиотики как «хозяева».

1.1.2. Комплексы открытоцепных «хозяев».

1.1.2.1. Поданды и полиподанты как «хозяева».

1.1.2.2. Циклофаны как «хозяева».

1.1.2.3. Ациклические антибиотики как «хозяева».

1.2. Методы исследования комплексов.

1.2.1. Рентгеноструктурный анализ.

1.2.2. Спектрофотометрические методы.

1.2.3. ЯМ? методы.

1.2.4. Электрохимические методы.

1.2.5. Квантово-химические методы.

1.2.6. Термодинамические методы.

ГЛАВА 2. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ.

2.1. Исследование конформационной подвижности непротонированной молекулы линкомицина полуэмпирическими методами.

2.2. Исследование конформационной подвижности и строения псевдополости неэмпирическими методами.

2.3. Комплексообразование непротонированной молекулы линкомицина с паразамещенными нитробензолами в газовой фазе.

2.4. Региоселективность протонирования молекулы линкомицина.

2.5. Исследование конформационной подвижности протонированной молекулы линкомицина неэмпирическими методами. Влияние протонирования на псевдополость.

2.6. Комплексообразование протонированной молекулы линкомицина с паразамещенными нитробензолами.

ГЛАВА 3. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ.

3.1. Оптимизация строения.

3.1.1. Расчет HESSIAN-a.

3.1.2. Расчет равновесного строения с использованием HESSIAN-a методом последовательного приближения.

3.2. Конформационный анализ.

3.2.1. Конформационный анализ полуэмпирическими методами.

3.2.2. Конформационный анализ неэмпирическими методами.

3.3. Расчеты термодинамических и термохимических параметров.

3.3.1. Расчет полной энергии.

3.3.2. Расчет энтальпии образования линкомицина.

3.3.3. Расчет энтальпии реакции комплексообразования.

3.3.4. Расчет энтропии образования.

3.3.5. Расчет свободной энергии реакций.

3.4. Определение точности полуэмпирических расчетов.

3.5. Учет влияния растворителя.

ВЫВОДЫ.