

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное учреждение
высшего профессионального образования
"Казанский (Приволжский) федеральный университет"
Химический институт им. А.М. Бутлерова



УТВЕРЖДАЮ

Проректор
по образовательной деятельности КФУ
Проф. Минзарипов Р.Г.

_____ 20__ г.

Программа дисциплины
Сtereoхимия Б1.В.ДВ.2

Направление подготовки: 04.04.01 - Химия

Профиль подготовки: Химия супрамолекулярных нано- и биосистем

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Автор(ы):

Стойков И.И.

Рецензент(ы):

Антипин И.С.

СОГЛАСОВАНО:

Заведующий(ая) кафедрой: Антипин И. С.

Протокол заседания кафедры No ____ от "____" _____ 201__ г

Учебно-методическая комиссия Химического института им. А.М. Бутлерова:

Протокол заседания УМК No ____ от "____" _____ 201__ г

Регистрационный No

Казань
2015

Содержание

1. Цели освоения дисциплины
2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы
3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля
4. Структура и содержание дисциплины/ модуля
5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения
6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов
7. Литература
8. Интернет-ресурсы
9. Материально-техническое обеспечение дисциплины/модуля согласно утвержденному учебному плану

Программу дисциплины разработал(а)(и) профессор, д.н. (профессор) Стойков И.И. Кафедра органической химии Химический институт им. А.М. Бутлерова, Ivan.Stoikov@mail.ru

1. Цели освоения дисциплины

Целью освоения дисциплины "Стереохимия" является подготовка к научно-исследовательской и педагогической деятельности для решения задач, стоящих перед современной органической химией. В результате освоения данной дисциплины должны быть сформированы представления о современных концепциях пространственного строения органических соединений.

2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы высшего профессионального образования

Данная учебная дисциплина включена в раздел " Б1.В.ДВ.2 Дисциплины (модули)" основной образовательной программы 04.04.01 Химия и относится к дисциплинам по выбору. Осваивается на 2 курсе, 3 семестр.

Дисциплина "Стереохимия" относится к вариативной части учебного цикла Б "Профессиональные (специальные) дисциплины" профиля "Химия супрамолекулярных нано- и биосистем" (курсы по выбору студентов). Она базируется на знаниях и умениях, выработанных при прохождении общих профессиональных курсов базовой части. Полученные при освоении дисциплины знания и умения облегчают освоение других курсов по выбору вариативной части.

3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля

В результате освоения дисциплины формируются следующие компетенции:

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ОК-3 (общекультурные компетенции)	готовностью к саморазвитию, самореализации, использованию творческого потенциала
ОПК-1 (профессиональные компетенции)	способностью использовать и развивать теоретические основы традиционных и новых разделов химии при решении профессиональных задач
ПК-2 (профессиональные компетенции)	владением теорией и навыками практической работы в избранной области химии

В результате освоения дисциплины студент:

- должен знать:
 - предмет стереохимии;
 - основные положения теории стереохимии;
 - конформационный анализ органических соединений.
 - должен уметь:
 - ориентироваться в различных гипотезах и теории конформационного анализа;
 - должен владеть:
 - навыками изображения пространственной структуры различных органических молекул
- применять полученные знания на практике

4. Структура и содержание дисциплины/ модуля

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 зачетных(ые) единиц(ы) 72 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины зачет в 3 семестре.

Суммарно по дисциплине можно получить 100 баллов, из них текущая работа оценивается в 50 баллов, итоговая форма контроля - в 50 баллов. Минимальное количество для допуска к зачету 28 баллов.

86 баллов и более - "отлично" (отл.);

71-85 баллов - "хорошо" (хор.);

55-70 баллов - "удовлетворительно" (удов.);

54 балла и менее - "неудовлетворительно" (неуд.).

4.1 Структура и содержание аудиторной работы по дисциплине/ модулю

Тематический план дисциплины/модуля

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
1.	Тема 1. Предмет стереохимии. Исторический фон и рождение стереохимии.	3	1	2	0	0	
2.	Тема 2. Способы изображения трехмерных молекул на плоскости.	3	2,3	0	4	0	
3.	Тема 3. Симметрия, элементы симметрии, симметрия в природе.	3	4	2	0	0	
4.	Тема 4. Определение конфигурации, гомо- и гетерохиральность, относительная и абсолютная конфигурации.	3	5-7	2	4	0	
5.	Тема 5. Классификация методов контроля энантиомерного состава: интактные и дериватирующие методы.	3	8	0	2	0	контрольная работа

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
6.	Тема 6. Исторические предпосылки возникновения конформационного анализа: постулат Вант-Гоффа; гипотезы Бишофа и эксперимент Мидзусимы, дискуссия Байера и Заксе, выводы и доказательства Мора.	3	9	0	2	0	
7.	Тема 7. Потенциальная поверхность, приведение многомерной поверхности к трехмерной поверхности или двумерной кривой.	3	10,11	2	2	0	
8.	Тема 8. Стабильные формы циклогексанового кольца. Конформационно-гибкие формы и псевдопревращение.	3	13	2	2	0	
8.	Тема 8. Описание конформационных взаимоотношений в сложных случаях ? конформационный граф.	3	12	0	2	0	
	Тема . Итоговая форма контроля	3		0	0	0	зачет
	Итого			10	18	0	

4.2 Содержание дисциплины

Тема 1. Предмет стереохимии. Исторический фон и рождение стереохимии.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Предмет стереохимии. Исторический фон и рождение стереохимии. Плоскополяризованный свет и его взаимодействие с веществом. Пастер и разделение виноградной кислоты на оптически активные компоненты. Изомерия молочных кислот и вывод Вислиценуса. Гипотеза Вант Гоффа и Ле Беля. Тетраэдрический атом углерода. ?Лестница? различий молекулярных объектов. Граф как математическая модель связности молекулы, гомоморфные графы. Скалярные и векторные различия между молекулярными объектами: геометрическая изомерия, хиральность и энантиомерия. Топологически изотопные структуры, топологическая изомерия, статистическая и темплатная стратегия синтеза [n] катенанов. Неплоские графы и топологическая хиральность.

Тема 2. Способы изображения трехмерных молекул на плоскости.**практическое занятие (4 часа(ов)):**

Способы изображения трехмерных молекул на плоскости, ?летающие клинья? и проекции Фишера. Система Кана-Ингольда-Прелога. R,S-номенклатура. Соединения с несколькими хиральными центрами, диастереомеры, эритро и treo-изомеры. Внутримолекулярная симметрия, мезо-формы. Псевдохиральные стереогенные центры. Описание относительной конфигурации заместителей в циклических молекулах.

Тема 3. Симметрия, элементы симметрии, симметрия в природе.**лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Симметрия, элементы симметрии, симметрия в природе. Понятие о точечных группах симметрии. Основные группы симметрии органических молекул. Ось хиральности. Плоскость хиральности. Спиральная хиральность. Особенность стереоизомерии в соединениях с пяти- и шестикоординированными центрами. Энантиочистые, скалемические образцы и рацемические смеси. Рацемические соединения, конгломераты, твердые растворы.

Тема 4. Определение конфигурации, гомо- и гетерохиральность, относительная и абсолютная конфигурации.**лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Определение конфигурации, гомо- и гетерохиральность, относительная и абсолютная конфигурация. Конфигурационные ряды, D- и L-, d- и ?l-, (+),(-) обозначения конфигураций. Определение относительной конфигурации: химическая корреляция, метод квазирацематов, эффект Коттона, аддитивный расчет оптического вращения по Брюстеру, метод Оро. Определение абсолютной конфигурации методом Бийво (анализ интенсивностей аномального рассеяния рентгеновский лучей). Представление о неэмпирических расчетах хироптических характеристик, как методе определения абсолютной конфигурации.

практическое занятие (4 часа(ов)):

Определение конфигурации, гомо- и гетерохиральность, относительная и абсолютная конфигурация. Конфигурационные ряды, D- и L-, d- и ?l-, (+),(-) обозначения конфигураций. Определение относительной конфигурации: химическая корреляция, метод квазирацематов, эффект Коттона, аддитивный расчет оптического вращения по Брюстеру, метод Оро. Определение абсолютной конфигурации методом Бийво (анализ интенсивностей аномального рассеяния рентгеновский лучей). Представление о неэмпирических расчетах хироптических характеристик, как методе определения абсолютной конфигурации.

Тема 5. Классификация методов контроля энантиомерного состава: интактные и дериватирующие методы.**практическое занятие (2 часа(ов)):**

Классификация методов контроля энантиомерного состава: интактные и дериватирующие. Поляриметрия. Единицы количественной оценки энантиомерного состава: оптическая чистота и энантиомерный избыток. Варианты применения хроматографии и ЯМР для контроля энантиомерного состава. Дериватирующие реагенты, в том числе и фосфорорганические. Контроль энантиомерного состава с использованием ?принципа удвоения? Оро.

Тема 6. Исторические предпосылки возникновения конформационного анализа: постулат Вант-Гоффа; гипотезы Бишофа и эксперимент Мидзусимы, дискуссия Байера и Заксе, выводы и доказательство Мора.**практическое занятие (2 часа(ов)):**

Исторические предпосылки возникновения конформационного анализа: постулат Вант-Гоффа; гипотезы Бишофа и эксперимент Мидзусимы, дискуссия Байера и Заксе, выводы и доказательство Мора. Роль работ Бартона в становлении современного конформационного анализа. Б.А.Арбузов и конформационный анализ в России и в Казани. Конформеры и конформации. Методы изображения. Барьер Внутреннего вращения. Механическая модель молекулы и расчеты по методу молекулярной механики.

Тема 7. Потенциальная поверхность, приведение многомерной поверхности к трехмерной поверхности или двумерной кривой.**лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Потенциальная поверхность, приведение многомерной поверхности к трехмерной поверхности или двумерной кривой. Топология ППЭ и колебательные уровни, безбарьерные переходы и число экспериментально различимых конформаций. Термодинамика конформационного равновесия. Распределение конформеров между конформациями. Примеры влияния внутримолекулярных взаимодействий (водородные связи, орбитальные взаимодействия) на положение конформационного равновесия. Внутреннее вращение вокруг связей C-C.

практическое занятие (2 часа(ов)):

Потенциальная поверхность, приведение многомерной поверхности к трехмерной поверхности или двумерной кривой. Топология ППЭ и колебательные уровни, безбарьерные переходы и число экспериментально различимых конформаций. Термодинамика конформационного равновесия. Распределение конформеров между конформациями. Примеры влияния внутримолекулярных взаимодействий (водородные связи, орбитальные взаимодействия) на положение конформационного равновесия. Внутреннее вращение вокруг связей C-C.

Тема 8. Стабильные формы циклогексанового кольца. Конформационно-гибкие формы и псевдопревращение.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Стабильные формы циклогексанового кольца. Конформационно-гибкие формы и псевдопревращение. Параметры конформационного равновесия для циклогексана. Аксиальные и экваториальные заместители. 1,3-диаксиальные взаимодействия. Относительная стабильность стероидов и гексапираноз. Конформации четырех и пятичленных циклов. Особенности конформационного анализа циклов большого размера, влияние планарных фрагментов, трансаннулярные взаимодействия.

практическое занятие (2 часа(ов)):

Стабильные формы циклогексанового кольца. Конформационно-гибкие формы и псевдопревращение. Параметры конформационного равновесия для циклогексана. Аксиальные и экваториальные заместители. 1,3-диаксиальные взаимодействия. Относительная стабильность стероидов и гексапираноз. Конформации четырех и пятичленных циклов. Особенности конформационного анализа циклов большого размера, влияние планарных фрагментов, трансаннулярные взаимодействия.

Тема 8. Описание конформационных взаимоотношений в сложных случаях ? конформационный граф.

практическое занятие (2 часа(ов)):

Описание конформационных взаимоотношений в сложных случаях ? конформационный граф. Топные отношения групп и сторон. Кинетика конформационных переходов и методы ее исследования. Конформационное равновесие и реакционная способность, уравнение Уинштейна-Холлесса, принцип Кертвина-Гаммета.

4.3 Структура и содержание самостоятельной работы дисциплины (модуля)

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
1.	Тема 1. Предмет стереохимии. Исторический фон и рождение стереохимии.	3	1	подготовка к устному опросу	4	устный опрос
2.	Тема 2. Способы изображения трехмерных молекул на плоскости.	3	2,3	подготовка к устному опросу	8	устный опрос

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
3.	Тема 3. Симметрия, элементы симметрии, симметрия в природе.	3	4	подготовка к устному опросу	4	устный опрос
4.	Тема 4. Определение конфигурации, гомо- и гетерохиральность, относительная и абсолютная конфигурации.	3	5-7	подготовка к устному опросу	10	устный опрос
5.	Тема 5. Классификация методов контроля энантиомерного состава: интактные и дериватирующие методы.	3	8	подготовка к контрольной работе	4	контрольная работа
6.	Тема 6. Исторические предпосылки возникновения конформационного анализа: постулат Вант-Гоффа; гипотезы Бишофа и эксперимент Мидзусимы, дискуссия Байера и Заксе, выводы и доказательства Мора.	3	9	подготовка к устному опросу	4	устный опрос
7.	Тема 7. Потенциальная поверхность, приведение многомерной поверхности к трехмерной поверхности или двумерной кривой.	3	10,11	подготовка к устному опросу	6	устный опрос
8.	Тема 8. Стабильные формы циклогексанового кольца. Конформационно-гибкие формы и псевдопревращение.	3	13	подготовка к устному опросу	2	устный опрос
8.	Тема 8. Описание конформационных взаимоотношений в сложных случаях ? конформационный граф.	3	12	подготовка к устному опросу	2	устный опрос
	Итого				44	

5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения

- компьютерные презентации лекций;
- круглый стол (case study) по разделу 3 "Симметрия в природе".

6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов

Тема 1. Предмет стереохимии. Исторический фон и рождение стереохимии.

устный опрос , примерные вопросы:

Предмет стереохимии. Исторический фон и рождение стереохимии. Плоскополяризованный свет и его взаимодействие с веществом. Пастер и разделение виноградной кислоты на оптически активные компоненты. Изомерия молочных кислот и вывод Вислиценуса. Гипотеза Вант Гоффа и Ле Беля. Тетраэдрический атом углерода. "Лестница" различий молекулярных объектов. Граф как математическая модель связности молекулы, гомоморфные графы. Скалярные и векторные различия между молекулярными объектами: геометрическая изомерия, хиральность и энантиомерия. Топологически изотопные структуры, топологическая изомерия, статистическая и темплатная стратегия синтеза [n] катенанов. Неплоские графы и топологическая хиральность.

Тема 2. Способы изображения трехмерных молекул на плоскости.

устный опрос , примерные вопросы:

Способы изображения трехмерных молекул на плоскости, "летающие клинья" и проекции Фишера. Система Кана-Ингольда-Прелога. R,S-номенклатура. Соединения с несколькими хиральными центрами, диастереомеры, эритро и treo-изомеры. Внутримолекулярная симметрия, мезо-формы. Псевдохиральные стереогенные центры. Описание относительной конфигурации заместителей в циклических молекулах.

Тема 3. Симметрия, элементы симметрии, симметрия в природе.

устный опрос , примерные вопросы:

Симметрия, элементы симметрии, симметрия в природе. Понятие о точечных группах симметрии. Основные группы симметрии органических молекул. Ось хиральности. Плоскость хиральности. Спиральная хиральность. Особенность стереоизомерии в соединениях с пяти- и шестикоординированными центрами. Энантиоочищенные, скалемические образцы и рацемические смеси. Рацемические соединения, конгломераты, твердые растворы.

Тема 4. Определение конфигурации, гомо- и гетерохиральность, относительная и абсолютная конфигурации.

устный опрос , примерные вопросы:

Определение конфигурации, гомо- и гетерохиральность, относительная и абсолютная конфигурация. Конфигурационные ряды, D- и L- ,d- и -l-, (+),(-) обозначения конфигураций. Определение относительной конфигурации: химическая корреляция, метод квазирацематов, эффект Коттона, аддитивный расчет оптического вращения по Брюстеру, метод Оро. Определение абсолютной конфигурации методом Бийво (анализ интенсивностей аномального рассеяния рентгеновский лучей). Представление о неэмпирических расчетах хироптических характеристик, как методе определения абсолютной конфигурации.

Тема 5. Классификация методов контроля энантиомерного состава: интактные и дериватирующие методы.

контрольная работа , примерные вопросы:

Классификация методов контроля энантиомерного состава: интактные и дериватирующие. Поляриметрия. Единицы количественной оценки энантиомерного состава: оптическая чистота и энантиомерный избыток. Варианты применения хроматографии и ЯМР для контроля энантиомерного состава. Дериватирующие реагенты, в том числе и фосфорорганические. Контроль энантиомерного состава с использованием "принципа удвоения" Оро.

Тема 6. Исторические предпосылки возникновения конформационного анализа: постулат Вант-Гоффа; гипотезы Бишофа и эксперимент Мидзусимы, дискуссия Байера и Заксе, выводы и доказательства Мора.

устный опрос , примерные вопросы:

Исторические предпосылки возникновения конформационного анализа: постулат Вант Гоффа; гипотезы Бишофа и эксперимент Мидзусимы, дискуссия Байера и Заксе, выводы и доказательства Мора. Роль работ Бартона в становлении современного конформационного анализа. Б.А.Арбузов и конформационный анализ в России и в Казани. Конформеры и конформации. Методы изображения. Барьер Внутреннего вращения. Механическая модель молекулы и расчеты по методу молекулярной механики.

Тема 7. Потенциальная поверхность, приведение многомерной поверхности к трехмерной поверхности или двумерной кривой.

устный опрос , примерные вопросы:

Потенциальная поверхность, приведение многомерной поверхности к трехмерной поверхности или двумерной кривой. Топология ППЭ и колебательные уровни, безбарьерные переходы и число экспериментально различимых конформаций. Термодинамика конформационного равновесия. Распределение конформеров между конформациями. Примеры влияния внутримолекулярных взаимодействий (водородные связи, орбитальные взаимодействия) на положение конформационного равновесия. Внутреннее вращение вокруг связей С-С.

Тема 8. Стабильные формы циклогексанового кольца. Конформационно-гибкие формы и псевдопревращение.

устный опрос , примерные вопросы:

Описание конформационных взаимоотношений в сложных случаях - конформационный граф. Топные отношения групп и сторон. Кинетика конформационных переходов и методы ее исследования. Конформационное равновесие и реакционная способность, уравнение Уинстейна-Холнесса, принцип Кертвина-Гаммета.

Тема 8. Описание конформационных взаимоотношений в сложных случаях ? конформационный граф.

устный опрос , примерные вопросы:

Стабильные формы циклогексанового кольца. Конформационно-гибкие формы и псевдопревращение. Параметры конформационного равновесия для циклогексана. Аксиальные и экваториальные заместители. 1,3-диаксиальные взаимодействия. Относительная стабильность стероидов и гексапираноз. Конформации четырех и пятичленных циклов. Особенности конформационного анализа циклов большого размера, влияние планарных фрагментов, трансаннулярные взаимодействия.

Тема . Итоговая форма контроля

Примерные вопросы к зачету:

Пример билета к контрольной работе.

1. Укажите, являются ли приведенные ниже пары соединений энантиомерами или диастереомерами:

- (+) и (-) винные кислоты
- (-) винная и мезовинная кислоты
- цис- и транс-1,2-дихлорэтилены $C_1CH = CHC_1$
- (+)- и (-)-цис-3-метилциклогексанолы
- цис - и транс- 3-метилциклогексанолы
- кристаллическая (-) винная кислота и кристаллическая рацемическая винная кислота.

2. Отличаются ли диастереомеры по:

- температуре кипения
- температуре плавления
- ИК-спектрам

- г) ЯМР-спектрам
- д) УФ-спектрам
- е) оптическому вращению
- ж) дисперсии оптического вращения
- з) показателю преломления
- и) дипольным моментам
- к) реакционной способности по отношению к таким хиральным химическим реагентам, как ферменты

Ответ проиллюстрируйте конкретными примерами.

3. Возможно ли для соединений с одинаковым строением:

- а) существование одних только энантиомеров, но не диастереомеров,
- б) существование только диастереомеров, но не энантиомеров
- в) существование как энантиомеров, так и диастереомеров

Приведите примеры.

4. В литературе часто употребляется термин цис- транс- изомерия (или геометрическая изомерия). Соответствует ли этот термин понятию энантиомерии или диастереомерии?

Ответ проиллюстрируйте примерами с указанием свойств соединений.

5. Можно ли говорить о рацемической молекуле? Объясните, что такое рацемическая смесь на основе какого-либо примера.

6. Сколько стереоизомеров, т.е. d,1-пар (половина от числа энантиомеров), мезо или неактивных изомеров, возможно для следующих соединений:

- а) эфедрин $C_6H_5-CH(OH)-CH(NHCH_3)-CH_3$
- б) альдопентоза $CH_2OH-CH(OH)-CH(OH)-CH(OH)-CHO$
- в) гидробензоин $C_6H_5CH(OH)CH(OH)C_6H_5$
- г) $CH_3CHC_1CHC_1CHC_1CH_3$
- д) 4-метилциклогексанол

7. Приведите проекционные формулы Фишера для следующих соединений:

- а) R-молочная кислота (2-оксипропионовая кислота)
- б) S - аланин (2-аминопропионовая кислота)
- в) R- метилфенилкарбинол
- г) S - этанол-1-d
- д) R- $C_6H_5CH(OH)C_6H_5$
- е) R,R - винная кислота
- ж) S-3-метилпентен-1
- з) R,R - циклогександиол -1,3

5. Дайте определения терминам "строение" и "конфигурация". Чем отличаются приводимые ниже соединения - строением или конфигурацией:

- а) молочная кислота $CH_3CH(OH)COOH$ (вращение не указано) и β -оксипропионовая кислота $HOCH_2CH_2COOH$
- б) (+) и (-)-молочные кислоты
- в) (-)-молочная и β -оксипропионовая кислоты
- г) 3- и 4-метилциклогексанола
- д) цис- и транс-3-метилциклогексанола
- е) (+) и (-)-цис-3-метилциклогексанола
- ж) 1-хлорпропен $C_1CH = CH-CH_3$, 2-хлорпропен $CH_2 = CC_1CH_3$

9. Что такое стереоизомеры? Имеют ли они различное строение или нет?

Проиллюстрируйте ответ конкретными примерами.

10. Укажите конфигурацию (R или S) следующих соединений:

11. Возможна ли цис- транс- изомерия для следующих соединений:

- а) $C_1CH = CHC_1$ д) $(CH_3)_2C = CH-CH_3$
б) $HOOC-CH = CH-COOH$ е) $CHC_1 = C = CHC_1$
в) ангидрид кислоты "б" ж) $CH_3CH = C = C = CH-CH_3$
г) $CH_3CH = CHC_1$ з) $CH_3 = C = C = CH_2$

12. В изображенных структурах подчеркните одной чертой гомотопные (эквивалентные), двумя - энантиотопные, тремя - диастереотопные атомы водорода:

- а) $HOOC-CH_2-CH_2-COOH$ б) $HOOC-CH_2-COOH$
в) $HOOC-CH_2-CH(CH_3)-COOH$ г) CH_3CH_2COOH
д) $C_6H_5-CH_2-CHOH-CH_3$ е) $HOOC-CH_2-COOSH_3$

13. Укажите, являются ли стороны двойной связи ($C=O$ или $C=C$) в приведенных ниже соединениях эквивалентными ("гомотопными"), энантиотопными или диастереотопными:

- а) $C_6H_5CH=O$ б) CH_3COCH_3 в) $CH_3COCH(CH_3)C_2H_5$
г) $CH_3C(O)CH_2CH_2C(O)CH_3$ д) малеиновая кислота е) фумаровая кислота.

Вопросы к зачету:

Билет ♦ 1.

1. Изомерия молочных кислот и вывод Вислиценуса. Гипотеза Вант Гоффа и Ле Беля.
2. Спиральная хиральность. Особенность стереоизомерии в соединениях с пяти- и шестикоординированными центрами.

Билет ♦ 2

1. Граф как математическая модель связности молекулы, гомоморфные графы. Скалярные и векторные различия между молекулярными объектами: геометрическая изомерия, хиральность и энантиомерия.
2. Определение конфигурации, гомо- и гетерохиральность, относительная и абсолютная конфигурация.

Билет ♦ 3

1. Топологически изотопные структуры, топологическая изомерия, статистическая и темплатная стратегия синтеза [n] катенанов.
2. Конформеры и конформации. Методы изображения. Барьер внутреннего вращения.

Билет ♦ 4

1. Система Кана-Ингольда-Прелога. R,S-номенклатура.
2. Единицы количественной оценки энантиомерного состава: оптическая чистота и энантиомерный избыток. Классификация методов контроля энантиомерного состава: интактные и дериватирующие методы.

Билет ♦ 5

1. Конформации четырех и пятичленных циклов.
2. Конфигурационные ряды, D- и L-, d- и l-, (+), (-) обозначения конфигураций.

Билет ♦ 6

1. Механическая модель молекулы и расчеты по методу молекулярной механики.
2. Неплоские графы и топологическая хиральность.

Билет ♦ 7

1. Потенциальная поверхность, приведение многомерной поверхности к трехмерной поверхности или двумерной кривой. Топология ППЭ.
2. Постулат Вант Гоффа; гипотезы Бишофа.

Билет ♦ 8

1. Соединения с несколькими хиральными центрами, диастереомеры, эритро- и treo-изомеры. Внутримолекулярная симметрия, мезо-формы.
2. Влияние внутримолекулярных взаимодействий (водородные связи, орбитальные взаимодействия) на положение конформационного равновесия.

Билет ♦ 10

1. Конформационное равновесие и реакционная способность, уравнение Уинштейна-Холнесса, принцип Кертвина-Гаммета.
2. Предмет стереохимии.

Билет ♦ 11

1. Стабильные формы циклогексанового кольца. Конформационно-гибкие формы и псевдопревращение. Параметры конформационного равновесия для циклогексана.
2. Конформационный анализ в России и в Казани.

Билет ♦ 12

1. Представление о неэмпирических расчетах хироптических характеристик.
2. Псевдохиральные стереогенные центры. Описание относительной конфигурации заместителей в циклических молекулах.

7.1. Основная литература:

Органическая химия. Ч. 4, , 2014г.

Органическая химия. Ч. 3, , 2014г.

Органическая химия. Ч. 2, , 2013г.

Органическая химия. Ч. 1, , 2014г.

5. Якимова, Людмила Сергеевна. Метод УФ-спектроскопии и его применение в органической и физической химии [Текст: электронный ресурс] : учебно-методическое пособие / Л. С. Якимова ; Казан. федер. ун-т, Хим. ин-т им. А. М. Бутлерова, Каф. орган. химии .? Электронные данные (1 файл: 0,67 Мб) .? (Казань : Казанский федеральный университет, 2015) .? Загл. с экрана .? Для 2-го семестра .? Вых. дан. ориг. печ. изд.: Казань, 2015.

7.2. Дополнительная литература:

1.Ногради М. Стереохимия. Основные понятия и приложения. М.: Мир, 1984. 391 с.

2.Блага К., Червинка О., Ковар Я. Основы стереохимии и конформационного анализа. Л.: Химия,1974. 192 с.

3.Илиэл Э. Основы стереохимии. М.: Мир, 1971. 108 с.

4.Бакстон Ш., Робертс С. Введение в стереохимию органических соединений. От метана до макромолекул. М.: Мир, 2009. 311 с.

5. Маджидов Т.И. Хемоинформатика и молекулярное моделирование: дистанционный курс для студентов бакалавриата и магистратуры направления подготовки: 020100 "Химия" [Электронный ресурс]. Площадка "Зилант" СУО КФУ, 2013. // <http://zilant.kpfu.ru/course/view.php?id=376>

6. Потапов В.М. Стереохимия. М.: Химия, 1976. 366 с.

7.3. Интернет-ресурсы:

eLIBRARY.RU - www.elibrary.ru

scopus.com - www.scopus.com

www.chem.msu.su - www.chem.msu.su

www.chemnet.ru - www.chemnet.ru

Википедия - <https://ru.wikipedia.org/wiki/Стереохимия>

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины(модуля)

Освоение дисциплины "Сtereoхимия" предполагает использование следующего материально-технического обеспечения:

Компьютерный класс, представляющий собой рабочее место преподавателя и не менее 15 рабочих мест студентов, включающих компьютерный стол, стул, персональный компьютер, лицензионное программное обеспечение. Каждый компьютер имеет широкополосный доступ в сеть Интернет. Все компьютеры подключены к корпоративной компьютерной сети КФУ и находятся в едином домене.

Мультимедийная аудитория

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО и учебным планом по направлению 04.04.01 "Химия" и магистерской программе Химия супрамолекулярных нано- и биосистем .

Автор(ы):

Стойков И.И. _____

"__" _____ 201__ г.

Рецензент(ы):

Антипин И.С. _____

"__" _____ 201__ г.