

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. Таюрский Д.А.



\_\_\_\_\_ 20\_\_ г.

*подписано электронно-цифровой подписью*

### Программа дисциплины

Электронная и пространственная структура органических соединений Б1.В.ОД.15

Направление подготовки: 04.03.01 - Химия

Профиль подготовки: Органическая химия

Квалификация выпускника: бакалавр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

**Автор(ы):**

Стойков И.И., Чмутова Г.А.

**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 769617

Казань  
2017

## 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 ; профессор, д.н. (профессор) Чмутова Г.А. Кафедра органической химии Химический институт им. А.М. Бутлерова, Galina.Tschmutowa@kpfu.ru

## 1. Цели освоения дисциплины

Целью освоения дисциплины "Электронная и пространственная структура органических соединений" 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 электронного и пространственного строения органических соединений. Основной целью изучения дисциплины является приобретение студентами знаний основных концепций, понимания возможностей теоретических и экспериментальных методов, усвоения языка и терминов, используемых в настоящее время для описания разных аспектов пространственной и электронной структуры органических, элементоорганических, металлоорганических соединений, овладение навыками прогнозирования реакционной способности (типа реакции, ее регио- и стереонаправленности, активности и селективности реагентов и т.п.) на основе знания электронного распределения и пространственных характеристик.

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

Данная учебная дисциплина включена в раздел "Б1.В.ОД.15 Дисциплины (модули)" основной образовательной программы 04.03.01 Химия и относится к обязательным дисциплинам. Осваивается на 4 курсе, 8 семестр.

Дисциплина 'Электронная и пространственная структура органических соединений' относится к вариативной части блока дисциплин Б1 учебного плана подготовки бакалавров по направлению 'Химия', профилю 'Органическая химия'. Она базируется на знаниях и умениях, выработанных при прохождении общих профессиональных курсов базовой части цикла Б3 'Органическая химия' (классификация органических соединений), а именно на базе курсов 'Органическая химия', 'Строение вещества'. Полученные при освоении дисциплины знания и умения облегчают освоение других курсов профиля 'Органическая химия'.

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

В результате освоения дисциплины формируются следующие компетенции:

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ОК-6 (общекультурные компетенции)	способностью работать в коллективе, толерантно воспринимать социальные, этнические, конфессиональные и культурные различия
ОК-7 (общекультурные компетенции)	способностью к самоорганизации и самообразованию
ОПК-1 (профессиональные компетенции)	способностью использовать полученные знания теоретических основ фундаментальных разделов химии при решении профессиональных задач
ОПК-3 (профессиональные компетенции)	способностью использовать основные законы естественнонаучных дисциплин в профессиональной деятельности

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ПК-3 (профессиональные компетенции)	владением системой фундаментальных химических понятий

В результате освоения дисциплины студент:

1. должен знать:

основные положения теории стереохимии и электронной структуры органических соединений, связь между этими аспектами строения органических соединений;  
принципиальные особенности электронной структуры важнейших классов органических и элементоорганических соединений и уметь изобразить их графически;  
природу межмолекулярных взаимодействий и их возможное влияние на физические свойства и реакционную способность;  
конформационный и конфигурационный анализ органических соединений.

2. должен уметь:

ориентироваться в различных гипотезах и теории конформационного анализа, в особенностях химического поведения различных типов и классов химических соединений, обусловленных их строением;  
провести полуэмпирический (неэмпирический) расчет структуры простых молекул и интермедиатов и интерпретировать полученные результаты;

3. должен владеть:

навыками изображения пространственной и электронной структуры различных органических молекул.

4. должен демонстрировать способность и готовность:

Уметь применять свои знания на практике

#### 4. Структура и содержание дисциплины/ модуля

Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 зачетных(ые) единиц(ы) 144 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины экзамен в 8 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	
	Тема 1. Предмет						

стереохимии. Исторический фон и рождение стереохимии.

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
2.	Тема 2. Способы изображения трехмерных молекул на плоскости.	8	2	2	2	0	
3.	Тема 3. Симметрия, элементы симметрии, симметрия в природе.	8	3	2	2	0	Дискуссия
4.	Тема 4. Конфигурация.	8	4,5	4	4	0	
5.	Тема 5. Конформационный анализ	8	6,7	4	4	0	Контрольная работа
<b>4.2 Содержание дисциплины</b>							
<b>Тема 6. Предмет стереохимии. Исторический фон и рождение стереохимии.</b>							
	<b>лекционное занятие (2 часа(ов)):</b> 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. Работа 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.	8	8	2	2	0	
	<b>практическое занятие (2 часа(ов)):</b> Граф как математическая модель связности молекулы, гомоморфные графы. Скалярные и векторные различия между молекулярными объектами: геометрическая изомерия, хиральность и энантиомерия.	8	11,12	4	4	0	Дискуссия Отчет
<b>Тема 7. Электронная структура и</b>							
	<b>лекционное занятие (2 часа(ов)):</b> Способы изображения трехмерных молекул на плоскости, летящие 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.	8	13	2	2	0	
	<b>практическое занятие (2 часа(ов)):</b> Способы изображения трехмерных молекул на плоскости, летящие 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.	8	15,16	4	4	0	Контрольная работа
<b>Тема 8. Теория возмущений в органической химии</b>							
	<b>лекционное занятие (2 часа(ов)):</b> Симметрия, элементы симметрии, симметрия в природе. Хиральность. Понятие о точечных группах симметрии. Основные группы симметрии органических молекул. Ось хиральности. Плоскость хиральности. Спиральная хиральность. Особенности стереоизомерий в соединениях с пяти- и шестикординированными центрами.	8	8	2	2	0	Экзамен
	<b>практическое занятие (2 часа(ов)):</b>	8	8	32	32	0	

Понятие о точечных группах симметрии. Основные группы симметрии органических молекул. Ось хиральности. Плоскость хиральности. Спиральная хиральность.

#### **Тема 4. Конфигурация.**

##### **лекционное занятие (4 часа(ов)):**

Энантиочистые, скалемические образцы и рацемические смеси. Рацемические соединения, конгломераты, твердые растворы. 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. 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. Контроль энантиомерного состава.

##### **практическое занятие (4 часа(ов)):**

Рацемические соединения, конгломераты, твердые растворы. Определение конфигурации, гомо- и гетерохиральность, относительная и абсолютная конфигурация. Конфигурационные ряды, D- и L-, d- и l-, (+), (-) обозначения конфигураций.

#### **Тема 5. Конформационный анализ**

##### **лекционное занятие (4 часа(ов)):**

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. 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. 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. Описание конформационных взаимоотношений в сложных случаях конформационный граф. Топные отношения групп и сторон.

##### **практическое занятие (4 часа(ов)):**

Конформеры и конформации. Методы изображения. Барьер внутреннего вращения. Механическая модель молекулы и расчеты по методу молекулярной механики. Топные отношения групп и сторон.

#### **Тема 6. Современный уровень знаний об электронной структуре химических соединений, основные понятия, термины, определения.**

##### **лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Современный уровень знаний об электронной структуре химических соединений, основные понятия, термины, определения. Общий квантовохимический подход к получению информации о структуре и реакционной способности химических соединений. Уравнение Шредингера и его модификации. Оператор энергии, его составляющие. Многоэлектронная и одноэлектронная волновые функции. Приближение МО ЛКАО. Базисные наборы. Принципиальные особенности неэмпирических и полуэмпирических расчетов. Учет эффектов электронной корреляции.

**практическое занятие (2 часа(ов)):**

Индексы реакционной способности органических соединений и их оценка из данных физических и химических методов, а также расчетных методов разного уровня

**Тема 7. Характеристики электронной структуры химических частиц**

**лекционное занятие (4 часа(ов)):**

Характеристики электронной структуры химических частиц : электронная энергия ; орбитальные энергии; граничные МО, их энергия, симметрия, состав, принципы изоэлектронности и изолюбальности; типы химических связей, их свойства; электронная и спиновая плотности, эффективные заряды на атомах ( $\sigma$ -,  $\pi$ -); дипольный момент и поляризуемость частицы в целом, фрагментов в целом, отдельных связей, аддитивность и отклонения от аддитивности; электростатический потенциал; энергии электронных переходов, их интенсивности, характеристики электроновозбужденных состояний, отличия от структуры основного состояния. Основы теории "Атомы в молекулах?", топологические индексы Р.Бейдера. Экспериментальные и теоретические методы изучения электронной структуры.

**практическое занятие (4 часа(ов)):**

Расчет и анализ структуры таутомеров методами RHF и B3LYP в газовой фазе.

**Тема 8. Теория возмущений в органической химии**

**лекционное занятие (4 часа(ов)):**

Теория возмущений в органической химии, качественный и количественный аспекты. Понятие об одноцентровых, двухцентровых, многоцентровых возмущениях. Рабочие формулы теории возмущений для оценок орбитальных энергий. Стабилизирующие и дестабилизирующие орбитальные взаимодействия. Молекулярно-орбитальный генезис происхождения орбиталей  $\text{CH}_3$ ,  $\text{CH}_2^-$ ,  $\text{CH}^-$  органических фрагментов от МО малых молекул-  $\text{AX}_3$ ,  $\text{AX}_2$ ,  $\text{AX}$ . "Стыковка" МО-фрагментов с образованием молекул углеводородов и их функционально замещенных производных. Природа граничных МО в важнейших классах органических соединений. Основные тенденции в изменениях энергии и состава граничных орбиталей функционально замещенных алканов, алкенов, аренов  $\text{RX}$  при варьировании ключевого атома заместителя X в пределах одной группы и одного периода таблицы Менделеева.

**практическое занятие (4 часа(ов)):**

Решение задач на составление МО-диаграмм разных классов органических соединений в рамках теории возмущений

**Тема 9. Электронная структура и межмолекулярные взаимодействия**

**лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Электронная структура и межмолекулярные взаимодействия. Неспецифические и специфические ММВ. Природа комплексов с переносом заряда и Н-комплексов. Принцип ЖМКО. Возможности экспериментального изучения и теоретического описания межмолекулярных взаимодействий в настоящее время. Модели сольватации (континуальные, дискретные, комбинированные). Энергетические характеристики и параметры электронного распределения. Визуализация расчетных характеристик (программы AIM). Влияние межмолекулярных взаимодействий на реакционную способность молекул.

**практическое занятие (2 часа(ов)):**

Компьютерный расчет сольватационных эффектов в рамках континуальных и дискретных моделей.

**Тема 10. Связь между различными характеристиками пространственной и электронной структуры молекул**

**лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Связь между различными характеристиками пространственной и электронной структуры молекул Электронная структура и геометрия жестких ( квазижестких) химических частиц ? нейтральных молекул, ионов, радикалов, ион-радикалов, координационных полиэдров; неклассические (орбитальные) структуры и т.п. Концепция отталкивания валентных электронных пар, критические точки лапласиана электронной плотности, диаграммы Уолша. Связь конформационных характеристик структурно-нежестких молекул с параметрами электронной структуры (разные виды сопряжения; сопряжение через связь и через пространство, трансаннулярные взаимодействия; эффект поля, 1,3- взаимодействия, обобщенный аномальный эффект и т.д.). Стереопределяющая роль граничных молекулярных орбиталей.

**практическое занятие (2 часа(ов)):**

Решение задач по установлению тонкой структуры органических соединений с использованием данных различных физических методов исследования и данных квантовохимических расчетов различных уровней

**Тема 11. Связь реакционной способности органических соединений с параметрами электронной и пространственной структуры**

**лекционное занятие (4 часа(ов)):**

Связь реакционной способности органических соединений с параметрами электронной и пространственной структуры Связь структура и реакционная способность, разные уровни анализа и прогнозов. Приближение изолированной молекулы и соответствующие индексы реакционной способности: эффективные заряды на атомах, электростатический потенциал, дипольный момент, поляризуемость; электронная плотность в критических точках химических связей, критические точки лапласиана электронной плотности, теория граничных орбиталей Фукуи, связь характеристик МО с окислительно-восстановительными, нуклеофильно-электрофильными свойствами соединений, регио ? и стереонаправленностью реакционных актов в основном и фотовозбужденном состояниях. Понятие о ВЗМО-, НСМО- и ОЗМО- гене. Приближение реагирующей молекулы и соответствующие индексы реакционной способности: энергии локализации (электрофильной, нуклеофильной, радикальной) и делокализации в реакциях замещения; энергии пара- и орто- локализации в реакции Дильса-Альдера и т.п. Молекулярно-орбитальный подход, правила сохранения орбитальной симметрии Вудворда-Гоффмана для согласованных (перициклических) реакций - межмолекулярного циклоприсоединения, электроциклических реакций молекул и ионов, сигматропных перегруппировок. Объяснение с помощью правил сохранения орбитальной симметрии наиболее важных особенностей согласованных реакций (стереоспецифичность, региопредпочтительность, преимущественное направление электронного переноса и влияние на скорость реакции электронных эффектов заместителей, соотношение между активностью и селективностью реагентов, роль вторичных орбитальных взаимодействий и т.д.). Реагирование в обход симметрии. Кинетика конформационных переходов и методы ее исследования. Конформационное равновесие и реакционная способность, уравнение Уинштейна-Холнесса, принцип Кертвина-Гаммета. Реакции, протекающие с участием нуклеофилов как активных реагентов (активность нуклеофилов и субстратов, стереохимия сближения реагентов, регионаправленность реакции - конкуренция между замещением и отщеплением, влияние растворителя, катализатора и т.д.). Реакции, протекающие с участием электрофилов : электрофильное присоединение к алкенам, электрофильное замещение в ароматическом ядре (производные бензола, пиридин, ароматические гетероциклы). Активность электрофилов и субстратов, регионаправленность реакции, структура интермедиатов (комплексов), стереохимия процесса. МО-аспект металлокомплексного катализа. Стадии одноэлектронного переноса. Металл как переключатель симметрии. Фотохимические реакции.

**практическое занятие (4 часа(ов)):**

Решение задач по прогнозам и интерпретации данных о реакционной способности соединений важнейших классов органических соединений на основе знания их электронной и пространственной структуры и учета возможных эффектов среды

**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
3.	Тема 3. Симметрия, элементы симметрии, симметрия в природе.	8	3	Подготовка к дискуссии.	10	дискуссия
5.	Тема 5. Конформационный анализ	8	6,7	подготовка к контрольной работе	12	контрольная работа
8.	Тема 8. Теория возмущений в органической химии	8	11,12	Подготовка к дискуссии.	6	дискуссия
				подготовка к отчету	4	отчет
11.	Тема 11. Связь реакционной способности органических соединений с параметрами электронной и пространственной структуры	8	15,16	подготовка к контрольной работе	21	контрольная работа
	Итого				53	

### 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.**

**Тема 2. Способы изображения трехмерных молекул на плоскости.**

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

дискуссия, примерные вопросы:

Тема дискуссии: Симметрия, элементы симметрии, симметрия в природе.

**Тема 4. Конфигурация.**

**Тема 5. Конформационный анализ**

контрольная работа, примерные вопросы:

Вопросы контрольной работы: 1) Постулат Вант Гоффа; гипотезы Бишофа и эксперимент Мидзусимы, дискуссия Байера и Заксе, выводы и доказательства Мора. 2) Работы Бартонна в становлении современного конформационного анализа. 3) Арбузов Б.А. и конформационный анализ в России и в Казани. 4) Конформеры и конформации. Методы изображения. 5) Топология ППЭ и колебательные уровни, безбарьерные переходы и число экспериментально различимых конформаций.

**Тема 6. Современный уровень знаний об электронной структуре химических соединений, основные понятия, термины, определения.**

**Тема 7. Характеристики электронной структуры химических частиц**

**Тема 8. Теория возмущений в органической химии**

дискуссия, примерные вопросы:

Тема дискуссии: 1. В какой степени данные квантово-химических расчетов разного уровня согласуются друг с другом и с экспериментом? Причины различий. 2. Характеристики разных методов по получению данных об электронных дескрипторах, их точность и достоверность. отчет , примерные вопросы:

Интерпретация результатов проведенных расчетов устойчивости таутомеров, интермедиатов, энергий граничных орбиталей, зарядов на атомах, электростатических потенциалов.

### **Тема 9. Электронная структура и межмолекулярные взаимодействия**

### **Тема 10. Связь между различными характеристиками пространственной и электронной структуры молекул**

### **Тема 11. Связь реакционной способности органических соединений с параметрами электронной и пространственной структуры**

контрольная работа , примерные вопросы:

Вопросы контрольной работы: Приближение изолированной молекулы, область приложения, достоинства и недостатки. Приближение реагирующей молекулы (активного комплекса) для количественных оценок реакционной способности. Понятие о поверхности потенциальной энергии реакции.

### **Тема . Итоговая форма контроля**

Примерные вопросы к экзамену:

Контрольные вопросы к самостоятельной работе студентов

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-метилциклогексанола
- цис - и транс- 3-метилциклогексанола
- кристаллическая ( - ) винная кислота и кристаллическая рацемическая винная кислота.

2. Отличаются ли диастереомеры по:

- температуре кипения
- температуре плавления
- ИК-спектрам
- ЯМР-спектрам

### **ПРИМЕРЫ БИЛЕТОВ К ЭКЗАМЕНУ**

Билет ♦ 1.

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

Билет ♦ 2

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

Билет ♦ 3

- Топологически изотопные структуры, топологическая изомерия, статистическая и темплатная стратегия синтеза [n] катенанов. Неплоские графы и топологическая хиральность.
- Конформеры и конформации. Методы изображения. Барьер внутреннего вращения.

3. а) С помощью метода граничных орбиталей определите оптимальную конфигурацию сближения двух молекул бутадиена на начальных участках пути реакции циклообразования
- б) Оцените относительную устойчивость алкил- и аллилкатионов в газовой фазе и различных растворителях, их влияние на скорости реакций нуклеофильного замещения у насыщенного атома углерода
- в) Оцените наиболее вероятные направления реакций тиоцианат-аниона с жесткими и мягкими электрофилами.

3. а) С помощью метода граничных орбиталей определите оптимальную конфигурацию сближения двух молекул бутадиена на начальных участках пути реакции циклообразования
- б)

- 3.
- 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,l-пар (половина от числа энантиомеров), мезо или неактивных изомеров, возможно для следующих соединений:

- а) эфедрин  $C_6H_5-CHON-CH(NHCH_3)-CH_3$
- б) альдопентоза  $CH_2OH-CHON-CHON-CHON-CHO$
- в) гидробензоин  $C_6H_5CHONCHONC_6H_5$
- г)  $CH_3CHC_1CHC_1CHC_1CH_3$
- д) 4-метилциклогексанол

## 7.1. Основная литература:

1. Сироткин О. С. Эволюция теории химического строения вещества А.М. Бутлерова в унитарную теорию строен. химич. соед. (осн. един. химии): Монография [Электронный ресурс] / О.С. Сироткин. - М.: НИЦ ИНФРА-М, 2013 - 247с.: 60x88 1/16. - (Научная мысль). Режим доступа: <http://znanium.com/bookread.php?book=420415>
2. Щербина А. Э. Органическая химия. Основной курс.: Учебник [Электронный ресурс]. / А.Э. Щербина, Л.Г. Матусевич; Под ред. А.Э. Щербины. - М.: НИЦ ИНФРА-М; Мн.: Нов. знание, 2013. - 808 с. - (Высшее образование: Бакалавриат).  
Режим доступа: <http://znanium.com/bookread.php/book=415732>
3. Введение в хемоинформатику : учебное пособие / Ч. 2: Химические базы данных/ Т. И. Маджидов, И. И. Баскин, А. А. Варнек .? Казан. федер. ун-т .? Казань : [Издательство Казанского университета], 2015 .? 185 с.
4. Введение в хемоинформатику : учебное пособие / Ч. 3: Моделирование 'структура-свойство' / И. И. Баскин, Т. И. Маджидов, А. А. Варнек ; Казан федер. ун-т .? Казань : [Издательство Казанского университета], 2015 .? 302 с.
5. Современные физико-химические методы исследования в органической химии : учебно-методическое пособие к спецпрактикуму по физическим и физико-химическим методам исследования / Казан. федер. ун-т, Хим. ин-т им. А. М. Бутлерова ; [авт.-сост.: к.х.н. В. А. Бурилов и др.] .? Казань : [Казанский университет], 2014 .? 131 с.

## 7.2. Дополнительная литература:

1. Стойков И.И., Евтюгин Г.А. Основы нанотехнологии и нанохимии: учебное пособие. Казань: Издательство Казанского (Приволжского) федерального университета. - 2010. - 237 с.
2. Суздалев И. П. Нанотехнология: физико-химия нанокластеров, наноструктур и наноматериалов. Москва URSS [ЛИБРОКОМ, 2013. 589 с.
3. Халл, М. Нанотехнологии и экология: риски, нормативно-правовое регулирование и управление / М. Халл, Д. Боумен ; пер. с англ. В.Н. Егорова, Е.В. Гуляевой .? Москва : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2013 .? 344 с.
4. Халл М. Нанотехнологии и экология: риски, нормативно-правовое регулирование и управление [Электронный ресурс] : учебное пособие / Халл М., Боумен Д. ? Электрон. дан. ? М. : 'Лаборатория знаний' (ранее 'БИНОМ. Лаборатория знаний'), 2013. ? 351 с. ? Режим доступа: [http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1\\_id=8686](http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=8686) ? Загл. с экрана.
5. Бакстон, Ш. Введение в стереохимию органических соединений [Текст] : от метана до макромолекул / Ш. Бакстон, С. Робертс : Учебное издание ; перевод с англ. В. М. Демьянович. - М. : Мир, 2005. - 311 с.
6. Чмутова, Г.А. Учебно-методическое пособие по курсу 'Строение вещества' / Г. А. Чмутова, А. Р. Курбангалиева, М. А. Казымова ; Казан. гос. ун-т, Хим. ин-т им. А. М. Бутлерова .? Казань : Казанский государственный университет, 2009 .? ; 21.Ч. 1 .? 2009 .? 35 с.
7. Чмутова Г. А., Курбангалиева А. Р., Казымова М. А. Учебно-методическое пособие по курсу 'Строение вещества'. Часть 1. [Электронный ресурс], 2009.  
(Для студентов химического факультета) Режим доступа:  
[http://kpfu.ru/docs/F1271711730/Structure\\_substance\\_2009.pdf](http://kpfu.ru/docs/F1271711730/Structure_substance_2009.pdf)
8. Чмутова, Г.А. Аспекты связи 'Строение - реакционная способность': учебное пособие / Г. А. Чмутова; Казан. (Приволж.) федер. ун-т, Хим. ин-т. ? Казань: [Казанский (Приволжский) федеральный университет], 2010. ? 93 с.

## 7.3. Интернет-ресурсы:

- Dr. Richard F.W. Bader. An Introduction to the Electronic Structure of Atoms and Molecules. - <http://www.chemistry.mcmaster.ca/esam/intro.html#Top>
- Ruud Visser, Atoms in Molecules - [http://dept.astro.lsa.umich.edu/~visserr/files/Atoms\\_in\\_Molecules.pdf](http://dept.astro.lsa.umich.edu/~visserr/files/Atoms_in_Molecules.pdf)
- Theory of Atoms in Molecules - [http://www.chemistry.mcmaster.ca/aim/aim\\_0.html](http://www.chemistry.mcmaster.ca/aim/aim_0.html)

Материалы Химического факультета МГУ -

<http://www.chem.msu.su/rus/teaching/djadchenko/1.html#1>

Фотоэлектронная спектроскопия и электронная структура органических соединений. -

<http://lesqm.wl.dvfu.ru/files/manuals>

## **8. Материально-техническое обеспечение дисциплины(модуля)**

Освоение дисциплины "Электронная и пространственная структура органических соединений" предполагает использование следующего материально-технического обеспечения:

Мультимедийная аудитория, вместимостью более 60 человек. Мультимедийная аудитория состоит из интегрированных инженерных систем с единой системой управления, оснащенная современными средствами воспроизведения и визуализации любой видео и аудио информации, получения и передачи электронных документов. Типовая комплектация мультимедийной аудитории состоит из: мультимедийного проектора, автоматизированного проекционного экрана, акустической системы, а также интерактивной трибуны преподавателя, включающей тач-скрин монитор с диагональю не менее 22 дюймов, персональный компьютер (с техническими характеристиками не ниже Intel Core i3-2100, DDR3 4096Mb, 500Gb), конференц-микрофон, беспроводной микрофон, блок управления оборудованием, интерфейсы подключения: USB, audio, HDMI. Интерактивная трибуна преподавателя является ключевым элементом управления, объединяющим все устройства в единую систему, и служит полноценным рабочим местом преподавателя. Преподаватель имеет возможность легко управлять всей системой, не отходя от трибуны, что позволяет проводить лекции, практические занятия, презентации, вебинары, конференции и другие виды аудиторной нагрузки обучающихся в удобной и доступной для них форме с применением современных интерактивных средств обучения, в том числе с использованием в процессе обучения всех корпоративных ресурсов. Мультимедийная аудитория также оснащена широкополосным доступом в сеть интернет. Компьютерное оборудование имеет соответствующее лицензионное программное обеспечение.

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.

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе "БиблиоРоссика", доступ к которой предоставлен студентам. В ЭБС "БиблиоРоссика" представлены коллекции актуальной научной и учебной литературы по гуманитарным наукам, включающие в себя публикации ведущих российских издательств гуманитарной литературы, издания на английском языке ведущих американских и европейских издательств, а также редкие и малотиражные издания российских региональных вузов. ЭБС "БиблиоРоссика" обеспечивает широкий законный доступ к необходимым для образовательного процесса изданиям с использованием инновационных технологий и соответствует всем требованиям федеральных государственных образовательных стандартов высшего профессионального образования (ФГОС ВПО) нового поколения.

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе "ZNANIUM.COM", доступ к которой предоставлен студентам. ЭБС "ZNANIUM.COM" содержит произведения крупнейших российских учёных, руководителей государственных органов, преподавателей ведущих вузов страны, высококвалифицированных специалистов в различных сферах бизнеса. Фонд библиотеки сформирован с учетом всех изменений образовательных стандартов и включает учебники, учебные пособия, УМК, монографии, авторефераты, диссертации, энциклопедии, словари и справочники, законодательно-нормативные документы, специальные периодические издания и издания, выпускаемые издательствами вузов. В настоящее время ЭБС ZNANIUM.COM соответствует всем требованиям федеральных государственных образовательных стандартов высшего профессионального образования (ФГОС ВПО) нового поколения.

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе Издательства "Лань" , доступ к которой предоставлен студентам. ЭБС Издательства "Лань" включает в себя электронные версии книг издательства "Лань" и других ведущих издательств учебной литературы, а также электронные версии периодических изданий по естественным, техническим и гуманитарным наукам. ЭБС Издательства "Лань" обеспечивает доступ к научной, учебной литературе и научным периодическим изданиям по максимальному количеству профильных направлений с соблюдением всех авторских и смежных прав.

Компьютерный проектор.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО и учебным планом по направлению 04.03.01 "Химия" и профилю подготовки Органическая химия .

Автор(ы):

Стойков И.И. \_\_\_\_\_

Чмутова Г.А. \_\_\_\_\_

"\_\_" \_\_\_\_\_ 201\_\_ г.

Рецензент(ы):

Антипин И.С. \_\_\_\_\_

"\_\_" \_\_\_\_\_ 201\_\_ г.