

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**

Электронная и пространственная структура органических соединений С3.В.5

Специальность: 020201.65 - Фундаментальная и прикладная химия

Специализация: Органическая химия

Квалификация выпускника:

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

**Автор(ы):**

Стойков И.И. , Чмутова Г.А.

**Рецензент(ы):**

Галкин В.И.

**СОГЛАСОВАНО:**

Заведующий(ая) кафедрой:

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  
2014

## 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 "С3.В.5 Профессиональный" основной образовательной программы 020201.65 Фундаментальная и прикладная химия и относится к вариативной части. Осваивается на 4 курсе, 8 семестр.

Дисциплина "Электронная и пространственная структура органических соединений" относится базовой части учебного цикла БЗ. "Профессиональные (специальные) дисциплины" профиля "Органическая химия". Она базируется на знаниях и умениях, выработанных при прохождении общих профессиональных курсов базовой части цикла БЗ "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
ПК-6 (профессиональные компетенции)	владеет навыками работы на современной учебно-научной аппаратуре при проведении химических экспериментов
ПК-7 (профессиональные компетенции)	имеет опыт работы на серийной аппаратуре, применяемой в аналитических и физико-химических исследованиях
ПК-8 (профессиональные компетенции)	владеет методами регистрации и обработки результатов химически экспериментов

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.

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 зачет 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	
1.	Тема 1. Предмет стереохимии. Исторический фон и рождение стереохимии.	8	1	2	2	0	
2.	Тема 2. Способы изображения трехмерных молекул на плоскости.	8	2	2	2	0	

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
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
6.	Тема 6. Современный уровень знаний об электронной структуре химических соединений, основные понятия, термины, определения.	8	8	2	2	0	
7.	Тема 7. Характеристики электронной структуры химических частиц	8	9,10	4	4	0	
8.	Тема 8. Теория возмущений в органической химии	8	11,12	4	4	0	дискуссия отчет
9.	Тема 9. Электронная структура и межмолекулярные взаимодействия	8	13	2	2	0	
10.	Тема 10. Связь между различными характеристиками пространственной и электронной структуры молекул	8	14	2	2	0	
11.	Тема 11. Связь реакционной способности органических соединений с параметрами электронной и пространственной структуры	8	15,16	4	4	0	контрольная работа
.	Тема . Итоговая форма контроля	8		0	0	0	зачет
	Итого			32	32	0	

#### 4.2 Содержание дисциплины

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

*лекционное занятие (2 часа(ов)):*

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.

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

Граф как математическая модель связности молекулы, гомоморфные графы. Скалярные и векторные различия между молекулярными объектами: геометрическая изомерия, хиральность и энантиомерия.

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

**лекционное занятие (2 часа(ов)):**

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.

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

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.

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

**лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Симметрия, элементы симметрии, симметрия в природе. Хиральность. Понятие о точечных группах симметрии. Основные группы симметрии органических молекул. Ось хиральности. Плоскость хиральности. Спиральная хиральность. Особенности стереоизомерии в соединениях с пяти- и шестикоординированными центрами.

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

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

**Тема 4. Конфигурация.**

**лекционное занятие (4 часа(ов)):**

Энантиоочищенные, 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 рентгеновских 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 С-С. 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 ( $\sigma^-$ ,  $\sigma^+$ ); 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? ?происхождение? орбиталей  $CH_3$ ,  $CH_2^-$ ,  $CH^-$  органических фрагментов от МО малых молекул-  $AH_3$ ,  $AH_2$ ,  $AH$ . ?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  $RX$  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:  $\sigma, \sigma$ -;  $p, \sigma$ ;  $d, \sigma$ -;  $n, n$ -;  $n, \sigma$   $\sigma$  взаимодействия; 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 – 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 (перциклических) 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-Холлесса, 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,  $\pi$ -эффект, 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	20	дискуссия
5.	Тема 5. Конформационный анализ	8	6,7	подготовка к контрольной работе	20	контрольная работа
8.	Тема 8. Теория возмущений в органической химии	8	11,12	Подготовка к дискуссии	10	дискуссия
				подготовка к отчету	10	отчет

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
11.	Тема 11. Связь реакционной способности органических соединений с параметрами электронной и пространственной структуры	8	15,16	подготовка к контрольной работе	20	контрольная работа
	Итого				80	

### 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:

Симметрия, элементы симметрии, симметрия в природе.

**Тема 4. Конфигурация.**

**Тема 5. Конформационный анализ**

контрольная работа , примерные вопросы:

Конфигурация. Конформационный анализ.

**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:

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:

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 зачету:

Контрольные вопросы к самостоятельной работе студентов

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

- а) (+) и (-) винные кислоты
- б) (-) винная и мезовинная кислоты
- в) цис- и транс-1,2-дихлорэтилены  $C_1CH = CHC_1$
- г) (+)- и (-)-цис-3-метилциклогексанола
- д) цис - и транс- 3-метилциклогексанола
- е) кристаллическая (-) винная кислота и кристаллическая рацемическая винная кислота.

2. Отличаются ли диастереомеры по:

- а) температуре кипения
- б) температуре плавления
- в) ИК-спектрам
- г) ЯМР-спектрам

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)

- в)
- г)
- 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. Реутов О.А., Курц А.Л., Бутин К.П. Органическая химия. М.: Бином. Лаборатория базовых знаний, 2004, ч.1-3.
2. Илиел Э., Дойл М., Вайлен С. Основы органической стереохимии. М.: Бином. Лаборатория знаний. 2009. 703 с.
3. Илиэл Э. Основы стереохимии. М.: Бином. Лаборатория знаний. 2009. 119 с.
4. Чуев Г.Н., Базилевский М.В. Молекулярные модели сольватации в полярных жидкостях // Успехи химии - 2003. - Т. 72. - Вып. 9. - С.827-840.
5. Бушмаринов И.С., Лысенко К.А., Антипин М.Ю. Энергия атомов в теории "атомы в молекулах" и ее использование для решения химических задач // Успехи химии. 2009.- Т.78.- Вып. 4.- С.307- 327

### 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. Бакстон Ш., Робертс С. Введение в стереохимию органических соединений. От метана до макромолекул. М.: Мир, 2009. 311 с.
4. Steiner T. The Hydrogen Bond in the Solid State//Angew. Chem. Int. Ed. - 2002. - V.41. - P.48-76
5. Кларк Т.// Компьютерная химия. М: Мир, 1976. - 383 с.
6. Cramer Ch.J., Truhlar D.G.. Implicit Solvation Models: Equilibria, Structure, Spectra and Dynamics// Chem.Rev. - 1999. - V.99. - P.2161-2200
7. Tomasi J., Cammi R., Mennucci B., Cappelli C., Corni S. Molecular properties in solution described with a continuum solvation model// Phys. Chem. Chem. Phys. - 2002. - V. 4. - P. 5697-5712
8. Аминова Р.М. Полуэмпирические квантово-химические методы вычисления электронного строения и свойств молекул (теоретические основы)// Учебное пособие для студентов и магистрантов физического и химического факультетов. Казань, 1999. - 61 с.

9. Компьютерная технология квантово-химических расчетов с помощью программного пакета GAUSSIAN. Методическое пособие // Сост.: Маслий А.Н., Зуева Е.М., Борисевич С.Б, Кузнецов А.М., Шапник М.С.. - Казан.гос.технол.ун-т, 2003. - 88 с.
10. Аминова Р.М. Полуэмпирические и неэмпирические методы теоретической интерпретации химических сдвигов // Учебно-методическое пособие. Казанский государственный университет. - 2002. - 50 с.
11. Аминова Р.М. Расчеты электронного строения и свойств молекул полуэмпирическими методами квантовой химии / Методическое пособие для работы на компьютере. Казанский государственный университет. - 1999. - 71 с.
12. Аминова Р.М. Поверхности потенциальной энергии молекулярных систем. Квантовохимические методы анализа ППЭ // Учебное пособие. Казанский государственный университет. - 2009. - 124 с.
13. Gillespie R.J., Popelier P.L.A. Chemical Bonding and Molecular Geometry. From Lewis to Electron Densities// New York, Oxford., Oxford University Press. - 2001.- 268 p.

### 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)

Лекции по квантовой механике и квантовой химии, Уфимское квантовохимическое общество, виртуальная квантовохимическая лаборатория, 2013 - <http://www.qchem.ru/lectures>

Фотоэлектронная спектроскопия и электронная структура органических соединений. - <http://lesqm.wl.dvfu.ru/files/manuals>

### 8. Материально-техническое обеспечение дисциплины/модуля согласно утвержденному учебному плану

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.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО и учебным планом по специальности: 020201.65 "Фундаментальная и прикладная химия" и специализации Органическая химия .

Автор(ы):

Стойков И.И. \_\_\_\_\_

Чмутова Г.А. \_\_\_\_\_

"\_\_" \_\_\_\_\_ 201\_\_ г.

Рецензент(ы):

Галкин В.И. \_\_\_\_\_

"\_\_" \_\_\_\_\_ 201\_\_ г.