

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Смирнов Сергей Николаевич
Должность: врио ректора
Дата подписания: 16.05.2024 13:02:41
Уникальный программный ключ:
69e375c64f7e975d4e8830e7b4fcc2ad1bf35f08

**МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ**
ФГБОУ ВО «ТВЕРСКОЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

Утверждаю:

Руководитель ООП

Феофанова М.А.

24 апреля 2024 г.



Рабочая программа дисциплины

Сtereoхимия

Закреплена за кафедрой: **Физической химии**

Направление подготовки: **04.03.01 Химия**

Направленность (профиль): **Экспертная и медицинская химия**

Квалификация: **Бакалавр**

Форма обучения: **очная**

Семестр: **6**

Программу составил(и):

Тверь, 2024

1. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ

Цели освоения дисциплины (модуля):

Цель дисциплины - знакомство студентов с основными с идеями и методами стереохимии, составляющих теоретический фундамент современной химической науки;

Задачи:

- раскрыть основные принципы стереохимии,
- помочь студенту освоить ее понятийный аппарат
- научить применять его для решения конкретных проблем химии

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ООП

Цикл (раздел) ОП: Б1.В

Требования к предварительной подготовке обучающегося:

Органическая химия

Физическая химия

Физика

Строение вещества

Дисциплины (модули) и практики, для которых освоение данной дисциплины (модуля) необходимо как предшествующее:

Квантовая механика и квантовая химия

Координационная химия

Дополнительные главы квантовой химии

Кристаллохимия

Преддипломная практика

Физико-химические модели

3. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ

Общая трудоемкость	2 ЗЕТ
Часов по учебному плану	72
в том числе:	
аудиторные занятия	36
самостоятельная работа	36

4. ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ, СООТНЕСЕННЫЕ С ПЛАНИРУЕМЫМИ РЕЗУЛЬТАТАМИ ОСВОЕНИЯ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ

ПК-1.1: Планирует отдельные стадии исследования при наличии общего плана НИР

- Уровень 1 типы отображения химической структуры, в том числе пространственной
способы записи молекулы через химические формулы и проекции Фишера, Ньюмена
номенклатуру органических соединений, хиральных соединений
определения конформеров, конформаций, состояния равновесного, переходного, стереоизомера, энантиомера, диастереоизомерии, координационного числа, координационного полиэдра и т.д.
- Уровень 1 записать химическое соединение в виде брутто-формулы, структурной формулы, стереохимической формулы, проекции Фишера, проекции Ньюмена, координационного многогранника
определять по проекции Фишера тип хиральности соединения, а по проекциям Ньюмена тип конформера и переходного состояния

выделять на потенциальной кривой внутреннего вращения основные и переходные состояния, указывать торсионные барьеры, проводить расчет потенциальной энергии конформационного перехода и т.д.

- Уровень 1 применением цис-транс, Z-E-, L-D-, R-S- номенклатур в определении хиральности органических соединений понятиями и определением по потенциальной кривой заторможенного вращения, заслоненного состояния, свободного вращения, *cys-*, *gosh+*, *gosh-* форм, типа вращения, области определения, количества состояний и их типы, и т.д.

ПК-1.2: Выбирает технические средства и методы испытаний (из набора имеющихся) для решения поставленных задач НИР

- Уровень 1 способы записи конформеров в виде проекций Ньюмена и в виде Z-матрицы с различием в торсионных (двугранных) углах
способы записи энантиомеров и диастереоизомеров в виде проекций Фишера с различием в угле вращения плоскополяризованного света
- Уровень 1 определить тип вращения и тип конформера, их количество
описать тип хиральности соединения
- Уровень 1 методом преобразования структурной формулы в стереохимическую, стереохимической - в проекцию Фишера или проекцию Ньюмена методами определения типа хиральности соединений по Розанову, по Кану-Ингольду-Прелогу

ПК-1.3: Готовит объекты исследования

- Уровень 1 типы отображения химической структуры, в том числе пространственной
способы записи молекулы через химические формулы и проекции Фишера, Ньюмена
номенклатуру органических соединений, хиральных соединений
определения конформеров, конформаций, состояния равновесного, переходного, стереоизомера, энантиомера, диастереоизомерии, координационного числа, координационного полиэдра и т.д.
- Уровень 1 записать химическое соединение в виде брутто-формулы, структурной формулы, стереохимической формулы, проекции Фишера, проекции Ньюмена, координационного многогранника
определять по проекции Фишера тип хиральности соединения, а по проекциям Ньюмена тип конформера и переходного состояния
выделять на потенциальной кривой внутреннего вращения основные и переходные состояния, указывать торсионные барьеры, проводить расчет потенциальной энергии конформационного перехода и т.д.
- Уровень 1 применением цис-транс, Z-E-, L-D-, R-S- номенклатур в определении хиральности органических соединений понятиями и определением по потенциальной кривой заторможенного вращения, заслоненного состояния, свободного вращения, *cys-*, *gosh+*, *gosh-* форм, типа вращения, области определения, количества состояний и их типы, и т.д.

ПК-2.1: Проводит первичный поиск информации по заданной тематике (в т.ч., с использованием патентных баз данных)

- Уровень 1 понятие химического строения и его топологический характер;
основные виды структурной изомерии (изомерия скелета, изомерия положения заместителей, таутомерия, метамерия и др.);
понятия стереохимической конфигурации и конформации;
типы стереохимических номенклатур (обозначения R, S, RR, ..., а также D, L.);

- виды конформаций открытых цепей (алканов) и их основные конформационные характеристики;
- Уровень 1 определить симметрию (в виде точечной группы) любой молекулы и установить (на языке симметрии) ее хиральность; описать внутреннее вращение вокруг простых (и более сложных) связей), уметь построить примерные кривые потенциальной энергии
- Уровень 1 поиском информации в глобальной сети Интернет и составлением поисковых запросов по электронным базам данных и в изданиях научного химического профиля, в том числе и на иностранных языках
- ПК-2.2: Анализирует и обобщает результаты патентного поиска по тематике проекта в выбранной области химии (химической технологии)**
- Уровень 1 исходные предпосылки, необходимые для построения аддитивной схемы, и показать ход решения математической задачи, к которой приводит модель
как составить гомологический ряд изомеров замещения молекул
основные поисковые системы и интернет-ресурсы с информацией по патентам
- Уровень 1 высказать и записать основной постулат феноменологической теории связи свойств веществ со строением молекул, пояснить его квантово-механическое обоснование и теоретико-графовое истолкование
получить предварительную оценку наиболее существенных свойств изучаемых или вновь синтезированных веществ
проводить поиск в сети -интернет информации патентного характера по исследованиям и синтезу хиральных соединений
- Уровень 1 методами решения систем линейных уравнений с целью получения корней
современными компьютерными технологиями, применяемыми при обработке результатов научных экспериментов и сборе, обработке, хранении и передаче информации при проведении самостоятельных научных исследований
методами решения систем линейных уравнений, исследуемого гомологического ряда
основами работы с персональным компьютером, браузерами и методикой составления поисковых запросов по интернет-ресурсам.

5. ВИДЫ КОНТРОЛЯ

Виды контроля в семестрах:	
зачеты	6

6. ЯЗЫК ПРЕПОДАВАНИЯ

Язык преподавания: русский.

7. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Код занят.	Наименование разделов и тем	Вид занятия	Семестр / Курс	Часов	Источники	Примечание
	Раздел 1. Химическое строение					
1.1	Химическое строение	Лек	6	2	Л1.1 Л1.2 Л1.3Л2.1	
1.2	Химическое строение	Лаб	6	2		

1.3	Химическое строение	Ср	6	6		
	Раздел 2. Стереохимическое строение					
2.1	Стереохимическое строение	Лек	6	2		
2.2	Стереохимическое строение	Лаб	6	2		
2.3	Стереохимическое строение	Ср	6	6		
	Раздел 3. Симметрия молекул и хиральность					
3.1	Симметрия молекул и хиральность	Лек	6	4		
3.2	Симметрия молекул и хиральность	Лаб	6	4		
3.3	Симметрия молекул и хиральность	Ср	6	6		
	Раздел 4. Внутреннее вращение					
4.1	Внутреннее вращение	Лек	6	4		
4.2	Внутреннее вращение	Лаб	6	4		
4.3	Внутреннее вращение	Ср	6	6		
	Раздел 5. Конформации открытых цепей					
5.1	Конформации открытых цепей	Лек	6	4		
5.2	Конформации открытых цепей	Лаб	6	4		
5.3	Конформации открытых цепей	Ср	6	6		
	Раздел 6. Конформации циклов					
6.1	Конформации циклов	Лек	6	2		
6.2	Конформации циклов	Лаб	6	2		
6.3	Конформации циклов	Ср	6	6		

Список образовательных технологий

1	Игровые технологии
2	Проектная технология
3	Дискуссионные технологии (форум, симпозиум, дебаты, аквариумная дискуссия, панельная дискуссия, круглый стол, фасилитированная и т.д.)
4	Информационные (цифровые) технологии

5	Технологии развития критического мышления
6	Технологии развития дизайн-мышления
7	Активное слушание

8. ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ТЕКУЩЕЙ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

8.1. Оценочные материалы для проведения текущей аттестации

1. вид: выполнение лабораторных работ по темам-1-6 (до 40 баллов)

способ: традиционный (решение задач)

результаты: углубленная проработка темы

2. вид: выполнение самостоятельной работы -(до 20 баллов)

способ: на компьютере

результаты:

1. обзор выбранной темы, подбор методики и объектов исследования, представленный в виде презентации

2. список методик по заданной теме, осуществленный в том числе и по базам данных, оформленный в соответствии с требованиями.

3. вид:

модульная контрольная работа № 1 (до 10 баллов)

модульная контрольная работа № 2 (до 10 баллов)

способ: традиционный

результаты: оформленные по заданию бумажные бланки с решениями

4. вид: посещаемость (до 20 баллов)

Темы лабораторных занятий.

1. Химическое строение (на примере соединений разных классов). Структурная изомерия: изомерия скелета, положения заместителей и кратных связей, таутомерия и т.д.

2. Стереохимическое строение (конфигурация и конформация). Пространственная изомерия: конфигурационная (оптическая, геометрическая) и конформационная (поворотная). Катенаны, ротаксаны, узлы. Молекулярный лист Мебиуса.

3. Группы симметрии молекул (их определение на моделях). Установление хиральности.

4. Построение кривых потенциальной энергии внутреннего вращения вокруг углерод-углеродных связей и определение их параметров (для отдельных молекул).

5. Конформации n-алканов их вид и число, статистический вес, число симметрии, энергетические и энтропийные различия и т.д.

6. Конформации циклопентана, циклобутана, циклопентана и циклогексана и их гетероаналогов (общая характеристика). Конформации декалина

Перечень основных понятий, изучение которых предусмотрено данной дисциплиной

1. Химическое строение

2. Стереохимическая (абсолютная) конфигурация

3. Конформация

4. Изомерия (структурная и пространственная)

5. Конфигурационная (оптическая и геометрическая) изомерия.

6. Конформационная (поворотная) изомерия

7. Химическая топология.

8. Катенаны, ротаксаны, узлы. Молекулярный лист Мебиуса.

9. Симметрия молекул (точечные группы)

10. Хиральность
11. Внутреннее вращение
12. Конформации ациклических соединений
13. Конформации циклов

8.2. Оценочные материалы для проведения промежуточной аттестации

Пример построения варианта заданий для первой модульной контрольной работы:

Контрольные тесты по “Сtereoхимии” служат для контроля и самоконтроля знаний студентов по мере прохождения ими отдельных разделов курса. Они составлены в основном по схеме: один вариант ответа на вопрос верный, два других – неверны. Приведены примеры тестов.

Тест № 1. Что такое химическое строение?

1. Порядок (последовательность и кратность) связи атомов в молекуле.
2. Расположение атомов, образующих ту или иную фигуру (как целое).
3. Расположение атомов вокруг центрального атома (или иона).

Тест № 2. Структурные изомеры – это:

1. Вещества, имеющие одинаковый состав, но разное химическое строение.
2. Соединения с одинаковым составом, но разным геометрическим строением.
3. Соединения с разным составом, но схожим геометрическим строением.

Тест № 3. Хиральность – это:

1. Асимметрия (отсутствие симметрии).
2. Нарушение асимметрии.
3. Свойство объекта не быть тождественным зеркальному отображению.

Тест № 4. Что такое стереохимическая конфигурация?

1. Определенное расположение атомов около хиральных центров (или других диссимметричных частей) молекулы.
2. Пространственное строение молекулы.
3. Равновесная конфигурация ядерного скелета.

Тест № 5. Что такое конформация?

1. Пространственные расположения, связанные с внутренним вращением вокруг простых (или более сложных) связей, деформацией валентных углов и т.д..
2. Хиральные расположения атомов (или атомных групп) в молекуле.
3. Ахиральные расположения атомов (или атомных групп) в молекуле.

Тест № 6. Пространственные изомеры (стереоизомеры) образуют:

1. Молекулы, имеющие одинаковый состав, одинаковое химическое, но разное пространственное строение.
2. Молекулы с одинаковой геометрией (например, все тетраэдрические или все октаэдрические молекулы).
3. Только оптические активные соединения.

Тест № 7. Химическая топология изучает:

1. Молекулы с разной геометрической конфигураций.
2. Молекулы, отличающиеся типом химических связей.
3. Молекулы без “химических” связей: катенаны, ротаксаны, узлы, молекулярные ленты Мебиуса и другие такого рода образования.

Пример построения варианта заданий для второй модульной контрольной работы:

1. Составить комплексное соединение, отвечающее формуле Xa_2bcd и написать его возможные хиральные и ахиральные изомеры (для составления соединения используйте в качестве комплексообразователя мышьяк – As, а в качестве лиганд CH_3 , SH , F и OH)

2. По графику потенциальной энергии внутреннего вращения определить
- чётность функции
 - область определения функции
 - количество конформеров
 - количество конформаций
 - количество переходных состояний
 - тип вращения
 - укажите состояние с наибольшим временем заторможенности
 - укажите состояние с наименьшим временем заторможенности
 - что вы можете сказать про состояния 1 и 5?
 - найдите высоту всех торсионных барьеров
 - из разницы в энергии основных состояний (величины указать), дайте возможное соотношение конформеров при синтезе

8.3. Требования к рейтинг-контролю

дисциплина "Стереохимия" - 100 баллов (зачет от 40 баллов):

1. выполнение лабораторных работ по темам-1-6 (до 40 баллов)
 2. выполнение самостоятельной работы -(до 20 баллов)
 3. модульные контрольные работы № 1, № 2 (до 10 баллов каждая)
 4. посещаемость (до 20 баллов)
- Итого: до 100 баллов

9. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

9.1. Рекомендуемая литература

9.1.1. Основная литература

Шифр	Литература
Л1.1	Камышов В. М., Мирошникова Е. Г., Татауров В. П., Строение вещества, Санкт-Петербург: Лань, 2022, ISBN: 978-5-8114-2313-2, URL: https://e.lanbook.com/book/212855
Л1.2	Зыкова М. В., Жолобова Г. А., Прищепова О. Ф., Органическая химия. Пространственное строение органических соединений, Томск: СибГМУ, 2016, ISBN: , URL: https://e.lanbook.com/book/105887
Л1.3	Денисов В. Я., Мурышкин Д. Л., Грищенко Т. Н., Стереохимия органических соединений, Кемерово: КемГУ, 2013, ISBN: 978-5-8353-1526-0, URL: http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=44325

9.1.2. Дополнительная литература

Шифр	Литература
Л2.1	Папулов, Учебно-методический комплекс по дисциплине "Стереохимия", Тверь, 2012, ISBN: , URL: http://texts.lib.tversu.ru/texts2/04461umk.pdf

9.3.1 Перечень программного обеспечения

1	OpenOffice
2	Adobe Acrobat Reader

9.3.2 Современные профессиональные базы данных и информационные справочные системы

1	ЭБС «ZNANIUM.COM»
2	ЭБС IPRbooks
3	ЭБС BOOK.ru
4	ЭБС ТвГУ
5	Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU (подписка на журналы)

10. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Аудит-я	Оборудование
3-408	комплект учебной мебели, переносной ноутбук, проекторы, абсорбциометр, телефоны, ареометр, барометр анероид, дрель, колонки, мешалка магнитная,

11. МЕТОДИЧЕСКИЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ОБУЧАЮЩИХСЯ ПО ОСВОЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ

Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

1) Рекомендуемая литература

а) Основная литература:

1. Денисов, В.Я. Стереохимия органических соединений: учебное пособие / В.Я. Денисов, Д.Л. Мурышкин, Т.Н. Грищенко. - 2-е изд., испр. и доп. - Кемерово: Кемеровский государственный университет, 2013. - 228 с. - ISBN 978-5-8353-1526-0; То же [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=232336>

б) Дополнительная литература:

1. Мамлок Л. Стереохимия / Л. Мамлок; Л. Мамлок. - Одесса: Матезис, 1911. - 172 с. – Электронный режим. – режим доступа:

<http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=103973>

2. Дядченко, В.П. Основные понятия стереохимии / В.П. Дядченко. – Москва: Техносфера, 2017. – 116 с.: ил., схем. – (Мир химии). – Режим доступа: по подписке. – URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=496447>

3. Кулаков, И.В. Строение вещества / И.В. Кулаков / Омск: ОмГУ им. Ф.М. Достоевского, 2018. – 172 с.: табл., ил. – Режим доступа: по подписке. – URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=562974>

4. Крашенинин, В.И. Симметрия в химии / В.И. Крашенинин, Е.Г. Газенаур, Л.В. Кузьмина. – Кемерово: Кемеровский государственный университет, 2013. – 80 с. – Режим доступа: по подписке. – URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=232679>

5. Полинг, Л.К. Природа химической связи / Л.К. Полинг; ред. Я.К. Сыркин; пер. М.Е. Дяткина. – Москва; Ленинград: Гос. научно-техническое изд-во хим. лит., 1947. – 438 с. – Режим доступа: по подписке. – URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=230240>

6. Кондратьев, В.Н. Структура атомов и молекул / В.Н. Кондратьев. – Изд. 2-е. – Москва: Государственное издательство физико-математической литературы, 1959. – 527 с. – Режим доступа: по подписке. – URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=475628>

Методические материалы для обучающихся по освоению дисциплины

Учебная программа

I. ХИМИЧЕСКОЕ СТРОЕНИЕ

Химическое строение как порядок связи атомов в молекуле. Виды структурной изомерии. Химическая топология.

II. СТЕРЕОХИМИЧЕСКОЕ СТРОЕНИЕ

Сtereoхимическая конфигурация. Номенклатура Кана-Ингольда-Прелога (R, S, RR,RS,...). Конформация. Пространственная изомерия (оптическая, геометрическая, поворотная). Химическая и стереохимическая топология. Катенаны, ротаксаны, узлы. Молекулярный лист Мебиуса.

III. СИММЕТРИЯ МОЛЕКУЛ И ХИРАЛЬНОСТЬ

Группы симметрии молекул (точечные группы). Молекулярная диссимметрия. Хиральные элементы (центр, ось, плоскость). Асимметрия биологических молекул.

IV. ВНУТРЕННЕЕ ВРАЩЕНИЕ

Внутреннее вращение молекул. Поворотная изомерия. Типы кривых потенциальной энергии внутреннего вращения. Разности энергий поворотных изомеров и барьеры внутреннего вращения.

V. КОНФОРМАЦИИ ОТКРЫТЫХ ЦЕПЕЙ

Конформации алканов: этана, пропана, н-бутана и т.д. Вид и число конформеров, их симметрия, статистических вес, энергетические и энтропийные различия, конформационная свободная энергия, содержание конформеров в поворотно-изомерной смеси

VI. КОНФОРМАЦИИ ЦИКЛОВ

Конформации моноциклов. Малые циклы (3-4 звена), обычные (5-7 звеньев), средние (8-11 звеньев), большие (\square 12 звеньев). Инверсия циклов. Псевдовращение. Конформации циклогексана. Бициклические и полициклические соединения.