

Министерство образования и науки РФ
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
«Самарский государственный университет»
Химический факультет



«Утверждаю»

Проректор по научной работе

А.Ф. Крутов
09.09

А.Ф. Крутов
2011 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Сtereoхимия и конформационный анализ органических соединений

ОД.А.03; цикл ОД.А.00 «Специальные дисциплины отрасли науки и научной специальности»
основной образовательной программы подготовки аспиранта
по отрасли 02.00.00 – Химические науки,
специальность 02.00.03 – Органическая химия

Самара 2011

Рабочая программа составлена на основании паспорта научной специальности 02.00.03 – Органическая химия, в соответствии с Программой-минимумом кандидатского экзамена по специальности 02.00.03 «Органическая химия» по химическим наукам, утвержденной приказом Министерства образования и науки РФ № 274 от 08.10.2007 г., и учебным планом СамГУ по основной образовательной программе аспирантской подготовки.

Составитель рабочей программы: *Зайцев Валерий Петрович, доцент, кандидат химических наук*

Рабочая программа утверждена на заседании ученого совета химического факультета протокол № 1 от 08. 09. 2011 г.

Декан химического факультета

08. 09. 2011 г.



С.В. Курбатова

1. Цели и задачи дисциплины, ее место в системе подготовки аспиранта, требования к уровню освоения содержания дисциплины

1.1. Цели и задачи изучения дисциплины

Цель дисциплины – дать более глубокие знания в области стереохимии студентам, специализирующимся по органической химии.

Задачи дисциплины: подготовка химиков, обладающих знаниями по стереохимии и способных работать в области химии природных соединений, биоорганической химии и биохимии.

1.2. Требования к уровню подготовки аспиранта, завершившего изучение данной дисциплины

Аспиранты, завершившие изучение данной дисциплины, должны:

иметь представление: о влиянии пространственного строения органических соединений на их физические, химические свойства и биологическую активность;

знать:

- особенности химического строения, приводящие к появлению изомерии, знать способы обозначения различных изомеров;
- классификацию органических соединений.

уметь:

- представлять изомеры с помощью проекционных формул Ньюмена и Фишера, пользоваться этими формулами, определять конфигурацию асимметрического центра;
- решать задачи по данной дисциплине.

1.3.Связь с предшествующими дисциплинами

Курс предполагает наличие у аспирантов знаний по основам теории строения органических соединений, основам электронного и пространственного строения органических молекул, типам изомерии органических соединений в объеме программы высшего профессионального образования.

1.4.Связь с последующими дисциплинами

Знания и навыки, полученные аспирантами при изучении данного курса, необходимы при подготовке и написании диссертации по специальности 02.00.03 – Органическая химия.

2. Содержание дисциплины

2.1. Объем дисциплины и виды учебной работы (в часах и зачетных единицах)

Форма обучения (вид отчетности)

2 год аспирантуры; вид отчетности – зачет.

Вид учебной работы	Объем часов / зачетных единиц
Трудоемкость изучения дисциплины	36 / 1
Обязательная аудиторная учебная нагрузка (всего)	4
в том числе:	
лекции	2
практические занятия	2
лабораторные занятия	-
Самостоятельная работа аспиранта (всего)	32
в том числе:	

Подготовка к практическим занятиям	4
Подготовка реферата	0
Подготовка эссе	0
Изучение тем, вынесенных на самостоятельную проработку	28

2.2. Разделы дисциплины и виды занятий

№ п/п	Название раздела дисциплины	Объем часов / зачетных единиц			
		лекции	лабораторные работы	практические занятия	самостоят. работа
1	Основные положения стереохимии	2	0	2	2
2	Поворотная изомерия	0	0	0	6
3.	Стереохимия циклов	0	0	0	4
4.	Оптическая активность и химическое строение	0	0	0	6
5	Асимметрический синтез	0	0	0	10
	<i>Итого:</i>	2	0	2	28

2.3. Лекционный курс

РАЗДЕЛ 1. Основные положения стереохимии. Место стереохимии в органической химии. Гипотеза тетраэдрического углеродного атома (Вант-Гоффа), ее связь с теорией химического строения. Выводы из гипотезы Вант-Гоффа и их экспериментальная проверка. Физическое подтверждение тетраэдрической модели. Типы гибридизации углеродного атома (sp , sp^2 , sp^3). Связь между типом гибридизации и пространственным строением. Элементы симметрии. Энантиомерия и диастереомерия. Стереохимические формулы и номенклатура. Проекционные формулы Фишера. Оптические антиподы и диастереомеры. Геометрическая изомерия; типы геометрических изомеров, система их обозначения. Модели пространственного строения молекул. Стереохимическая номенклатура: систем, Кана-Ингольда-Прелога (R,S-обозначение), система Фишера-Розанова (система ключей). Эквивалентные, энантиотопные и диастереотопные атомы и группы в молекулах. Стереохимия других тетраэдрических элементов. Стереохимия азота, кремния, фосфора и серы.

РАЗДЕЛ 2. Поворотная изомерия. Номенклатура и графическое изображение поворотных изомеров. Примеры: поворотной изомерии простейших, и более сложных молекул. Поворотная изомерия (учение о конформации) как основа современного подхода к решению стереохимических проблем. Дифенилы. Анса-соединения, циклофаны.

РАЗДЕЛ 3. Стереохимия циклов. Особенности пространственной изомерии в циклах, их изображение в названиях и формулах. Стереохимия циклобутановых, циклопентановых и циклогексановых соединений. Алкилиденциклоалканы. Спираны.

РАЗДЕЛ 4. Оптическая активность и химическое строение. Физические основы оптической активности. Дисперсия оптического вращения и циркулярный дихроизм. Эффект Коттона. Правило октантов. Методы получения стереоизомеров разделением рацемических модификаций на энантиомеры. Определение пространственной конфигурации. Метод оптического сравнения, работы Чугаева, Фрайзенберга.

РАЗДЕЛ 5. Асимметрический синтез. Определение и классификация. Частичный и абсолютный асимметрический синтез. Асимметрический катализ, Механизмы асимметрических синтезов. Правило Крама.

2.4. Практические занятия – «Основные положения стереохимии» (2 часа).

3. Организация текущего и промежуточного контроля знаний

3.1. Контрольные работы – не предусмотрены.

3.2. Список вопросов для промежуточного тестирования – не предусмотрено.

3.3. Самостоятельная работа

Изучение учебного материала, перенесенного с аудиторных занятий на самостоятельную работу.

Выявление информационных ресурсов в научных библиотеках и сети Internet по следующим направлениям:

- основные положения стереохимии;
- поворотная изомерия;
- стереохимия циклов;
- оптическая активность и химическое строение;
- асимметрический синтез.

Конспектирование и реферирование первоисточников и научно-исследовательской литературы по тематическим блокам.

3.3.1. Поддержка самостоятельной работы:

- Список литературы и источников для обязательного прочтения.
- Полнотекстовые базы данных и ресурсы, доступ к которым обеспечен из кампусной сети СамГУ (сайт научной библиотеки СамГУ, URL: <http://weblib.samsu.ru/level23.html>):

1. Издания Самарского государственного университета
2. Полнотекстовая БД диссертаций РГБ
3. БД реферативного журнала «Химия»
4. Научная электронная библиотека РФФИ (e-Library)
5. БД издательства ELSEVIER
6. Oxford University Press
7. Университетская библиотека ONLINE
8. Университетская информационная система России

3.3.2. Тематика рефератов – не предусмотрены.

Итоговый контроль проводится в виде зачета.

4. Технические средства обучения и контроля, использование ЭВМ (*Перечень обучающих, контролирующих и расчетных программ, диафильмов, слайдфильмов, кино- и телефильмов*).

Программные пакеты: Microsoft Office; OpenOffice; Accelrys Discovery Studio Client, PASS Inet, ACD/Labs; ISIS/Draw; Avogadro; Arguslab; PC GAMESS, OpenBabel; Jmol; MacMolPlt онлайн-сервисы сайта <http://www.rcsb.org/>

Сайт «Дистанционные образовательные технологии» Самарского государственного университета (Химический факультет) – URL: <http://dls.ssu.samara.ru/moodle/course/index.php>

Сайт научной библиотеки СамГУ, с доступом к электронному каталогу и полнотекстовым базам данных – URL: <http://weblib.samsu.ru/level23.html>

5. Активные методы обучения (деловые игры, научные проекты)
не предусмотрены.

6. Материальное обеспечение дисциплины (*Современные приборы, установки (стенды), необходимость специализированных лабораторий и классов*)

Компьютерные классы, оснащенные компьютерами класса Pentium 4 с выходом в Интернет и в локальную сеть Самарского государственного университета, а также принтеры, сканеры и ксероксы.

7. Литература

7.1. Основная

1. Бакстон Ш., Робертс С. Введение в стереохимию органических соединений / Пер. с англ. В.М. Демьянович. – М.: Мир, 2005. – 311с.
2. Реутов О.А., Курц А.Л., Бутин К.П. Органическая химия. М.: Бином, лаборатория базовых знаний, 2004, ч.1-3.
3. Березин Б.Д., Березин Д.Б. Курс современной органической химии. М.: Высшая школа, 1999.

7.2. Дополнительная

1. Блага К., Червинко О., Ковар Я. Основы стереохимии и конформационного анализа. М., Химия 1974.
2. Ногради М. Стереохимия. М., Мир, 1984.
3. Потапова В.М. Стереохимия. М., Химия, 1976.
4. Дж. Бенкс. // Названия органических соединений. М. “Химия”, 1980.
5. Дашевский В.Г. Конформационный анализ органических молекул. М., Химия, 1982.
6. Дубовенко Ж.В. Сборник задач по стереохимии., Новосибирск, 1979.

7.3. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины для организации самостоятельной работы аспирантов

1. Реутов О.А., Курц А.Л., Бутин К.П. Органическая химия. Учебник для вузов: В 4ч. М.: Бином. Лаборатория знаний, 2004.
2. Дерябина Г.И. Задачи и упражнения по органической химии. 2-е изд. – Самара: «Самарский университет», 2002
3. Названова Г.Ф. Вопросы и задачи по органической химии. Методическая разработка. Самара: Изд-во «Самарский университет», 1997, 1998, в 2-х ч.

Учебно-методические материалы на сайте кафедры органической, биоорганической и медицинской химии http://chemfac.samsu.ru/KOChem/ucheb_pos.htm

– Задачи и упражнения (Дерябина Г.И., 2008-2010)

<http://chemfac.samsu.ru/KOChem/Zadachi.htm>

– Справочник химика, III том

http://chemfac.samsu.ru/KOChem/OX_doc/nikolskij_02_03.djvu

Прикладные программы:

- ACD/Labs; ISIS/Draw; Avogadro; Arguslab; PC GAMESS, MacMolPlt, OpenBabel; Jmol для визуализации и квантовохимических расчетов;
- Моделирование атомных и молекулярных орбиталей (СамГУ);
- MOX (СамГУ) для построения молекулярных диаграмм, расчета энергий локализации атомов.