



Статична та динамічна стереохімія

Робоча програма навчальної дисципліни (Силабус)

Реквізити навчальної дисципліни

Рівень вищої освіти	<i>Перший (бакалаврський)</i>
Галузь знань	<i>16 Хімічна та біоінженерія</i>
Спеціальність	<i>161 Хімічні технології та інженерія</i>
Освітня програма	<i>Хімічні технології косметичних засобів і харчових добавок</i>
Статус дисципліни	<i>вибіркова</i>
Форма навчання	<i>змішана</i>
Рік підготовки, семестр	<i>3 курс, весняний семестр</i>
Обсяг дисципліни	<i>4 кредити</i>
Семестровий контроль/ контрольні заходи	<i>Залік письмовий</i>
Розклад занять	<i>Лекції: 2 години на тиждень (1 пара щотижня), практичні заняття: 2 години на тиждень (1 пара щотижня) за розкладом на rozklad.kpi.ua</i>
Мова викладання	<i>Українська</i>
Інформація про керівника курсу / викладачів	<i>Лекції, практичні: к.х.н., старший викладач Циганович Олена Анатоліївна, elena_tsyganov@ukr.net</i>
Розміщення курсу	<i>Курс в системі Moodle на платформі Sikorsky-distance, доступ за запрошенням викладача https://do.ipu.kpi.ua/login/?lang=ru.</i>

Програма навчальної дисципліни

1. *Опис навчальної дисципліни, її мета, предмет вивчення та результати навчання*

***Метою** дисципліни є формування у студентів здатностей використовувати знання, уміння і навички в галузі природничо-наукових та професійно-профільованих дисциплін для роботи з автоматизованими системами технологічних ліній виробництва косметичних засобів та харчових добавок (ФК 14)*

***Предмет дисципліни:** просторова будова органічних та неорганічних сполук, стереохімічна номенклатура, асиметричний синтез органічних сполук*

Після засвоєння навчальної дисципліни студенти мають продемонструвати такі результати навчання:

знання:

- основних понять стереохімії;*
- типів хіральных молекул;*
- основних закономірностей будови, властивостей і взаємоперетворень стереоізомерів різних класів органічних сполук;*
- методів визначення абсолютної та відносної конфігурації;*
- методів розділення стереоізомерів;*
- основних методів асиметричного синтезу та каталізу.*

уміння:

- визначати тип стереоізомерії;
- користуватись стереохімічною номенклатурою;
- аналізувати та узагальнювати інформацію по конфірмаційному аналізу та асиметричному синтезу;
- планувати проведення стереоспрямованого синтезу індивідуальних стереоізомерів.

досвід:

- використання стереохімічної номенклатури;
- визначення просторової конфігурації органічних сполук;
- вирішення задач по розділенню стереоізомерів;
- проведення конфірмаційного аналізу.

2. Пререквізити та постреквізити дисципліни (місце в структурно-логічній схемі навчання за відповідною освітньою програмою)

Зазначається перелік дисциплін, знань та умінь, володіння якими необхідні студенту для успішного засвоєння дисципліни:

Неорганічна хімія	хімічний зв'язок
Органічна хімія	основні класи органічних сполук, механізми реакцій
Загальна фізика	оптика
Теоретична фізика	елементи теорії груп

Програмні результати навчання студентів з дисципліни мікробіологія є важливими для вивчення таких дисциплін як: органічна хімія, тонкий органічний синтез, механізми органічних реакцій, оскільки просторова будова органічних молекул, поряд з хімічною і електронною, визначає властивості речовин. Окремі програмні результати, уміння та навички можуть бути використані у виконання експериментальної частини магістерської дисертації.

3. Зміст навчальної дисципліни**Тема 1. Вступ.**

Місце стереохімії серед хімічних дисциплін. Історія виникнення і розвитку стереохімічних уявлень і методів. Стереохімічні особливості будови атома вуглецю та основні стереохімічні явища. Методи просторового зображення молекул. Елементи симетрії і хіральності. Симетрія і асиметрія в хімії, основи теорії точкових груп.

Тема 2. Основні поняття стереохімії. Стереохімічні особливості атома вуглецю. Молекулярні моделі та проєкційні формули. Конфігурація і конформація. Енантіомери, π -діастереомери і σ -діастереомери. Види номенклатури, що відображають стереохімію молекули. Правило послідовності. Номенклатура конформерів. Номенклатура діастереомерів. Номенклатура енантіомерів. Абсолютна і відносна конфігурації. Оптична активність, хіральність і асиметрія молекул. Поляриметрія, хіроптичні та інші методи дослідження в стереохімії. Енантіотопія і діастереотопія. Статична, динамічна стереохімія і конформаційний аналіз.

Тема 3. Методи отримання оптично активних речовин. Синтези на основі природних оптично активних речовин. Методи розділення рацематів. Розділення в оптично активних розчинниках. Розділення через діастереомери та через молекулярні сполуки. Хроматографічні методи розділення. Ферментативне розділення. Рацемізація.

Асиметричний синтез і його модифікації. Синтези на основі карбонільних сполук. Стереохімічні особливості приєднання до кратних вуглець-вуглецевим зв'язкам. Синтез амінокислот. Синтези за участю хіральних оксазолінів. Дієновий синтез. Синтези в хіральному середовищі.

Закономірності асиметричного синтезу. Асиметричний каталіз. Кінетичне розщеплення. Асиметричні перетворення. Абсолютний асиметричний синтез. Методи визначення оптичної чистоти.

Тема 4. Визначення просторової конфігурації. Визначення конфігурації π -діастереомерів: метод циклізації, хімічна кореляція, фізичні методи. Визначення конфігурації σ -діастереомерів. Методи визначення конфігурації енантіомерів: хімічна кореляція, порівняння оптичного обертання, хіроптичний метод, метод квазірацематів, кінетичне розщеплення та інші методи.

Тема 5. Стереохімія алканів та їх похідних. Конформаційний аналіз алканів та їх похідних. Конформація діастереомерів. Оптично активні аліфатичні сполуки. Вплив будови речовини на оптичну активність і методи її розрахунку. Стереохімія реакцій аліфатичних сполук: реакції нуклеофільного, електрофільного і вільнорадикального заміщення біля насиченого атома вуглецю. Реакційна здатність діастереомерів. Оптична активність. Зв'язок будови та оптичного обертання.

Тема 6. Стереохімія аліциклічних сполук. Особливості просторової ізомерії в циклах. Напруження в циклічних системах. Стереохімія малих циклів. Стереохімія циклогексанових сполук: форма кілець, аксіальні і екваторіальні замісники, конверсія, конформаційна енергія. Стереохімія реакцій похідних циклогексану. Середні цикли, особливості їх будови і властивості (трансанулярні взаємодії та реакції). Поліпропіленгліколи. Конденсовані системи. Спіралі. Каркасні структури.

Тема 7. Стереохімія сполук з кратними C=C-зв'язками. E, Z-ізомерні алкени, їх властивості, стійкість і взаємоперетворення. Отримання E,Z-ізомерів. Стереохімія реакцій приєднання по подвійний C = C зв'язку. Стереохімія сполук з кратними зв'язками в циклі: циклоолефінів, циклооктатетраєнів, циклоалкінів. Кумулени. Перициклічні реакції і їх стереохімія. Перициклічні реакції та їх класифікація. Електроциклічні реакції. Циклоприєднання. Сігматропні реакції.

Тема 8. Стереохімія ароматичних сполук. Конформації заміщених аренів. Стеричні порушення спряження. Просторові перешкоди в реакціях ароматичних сполук. Оптично активні ароматичні сполуки: похідні бензолу з хіральним бічним ланцюгом, похідні дифенілу, циклофани, анса-сполуки, геліцени і спіральні фенантрени.

Тема 9. Стереохімія сполук азоту. Просторова будова атома нітрогену. Стереохімія сполук нітрогену, зв'язаного подвійним зв'язком: оксими, гідразони, основи Шифа, азасполуки.

Оптична активність сполук нітрогену. Особливості стереохімічної будови амідів карбонових кислот.

Тема 10. Стереохімія природних і комплексних сполук. Уявлення про просторову будову вуглеводів, білків, нуклеїнових кислот. Стереоспецифічність біохімічних процесів. Стереохімія комплексних сполук. Перспективні напрямки розвитку стереохімії.

4. Навчальні матеріали та ресурси

Рекомендована базова література

1. Потапов В.М. Стереохимия - М.: «Химия», 1988.
2. Илиел Э., Вайлен С., Дойл М. Основы органической стереохимии. М., «Бином», 2007.
3. Ногради М. Стереохимия. Основные понятия и приложения. М.: «Мир», 1984.
4. Илиел Э. Стереохимия соединений углерода. М.: «Мир», 1965.
5. В. Ковтуненко. Загальна стереохімія. К.: «Кондор», 2005.

Навчальні матеріали, доступні у бібліотеці університету та у бібліотеці кафедри фізичної хімії, електронні варіанти на гул диску за посиланням (доступ за дозволом викладача)

<https://drive.google.com/drive/folders/OB7CaLyDj340hUjVKZUxHcOU0cFE?usp=sharing>

Розділи та теми, з якими студент має ознайомитись самостійно, викладач зазначає на лекційних та практичних заняттях.

Навчальний контент

5. Методика опанування навчальної дисципліни (освітнього компонента)

Лекційні та практичні заняття

Викладення лекційного матеріалу з дисципліни проводиться синхронно з розглядом його на практичних заняттях та вивчення питань, що виносяться на самостійну роботу. При читанні лекцій застосовуються засоби для відео конференцій (Google Meet, Big Blue Button Moodle) з використанням презентацій. Після кожної лекції рекомендується ознайомитись з матеріалами для самостійного вивчення, а перед наступною лекцією – повторити матеріал попередньої. Матеріали двох лекцій розглядаються, закріплюються та оцінюються на одному практичному занятті.

№	Дата	Опис заняття
1.	31 січня - 4 лютого 2022 р.	Тема 1. Лекція: Вступ. Місце стереохімії серед хімічних дисциплін. Історія виникнення і розвитку стереохімічних уявлень і методів. Стереохімічні особливості будови атома вуглецю та основні стереохімічні явища. .
2.	7 -11 лютого 2022 р.	Продовження теми 1. Лекція: Елементи симетрії і хіральності. Симетрія і асиметрія в хімії, основи теорії точкових груп.
3.	14 – 18 лютого 2022 р.	Тема 2: Лекція: Основні поняття стереохімії. Стереохімічні особливості атома вуглецю. Молекулярні моделі та проєкційні формули. Конфігурація і конформація. Енантіомери, п-діастереомери і σ-діастереомери. Види номенклатури, що відображають стереохімію молекули. Правило послідовності.
4.	21 - 25 лютого 2022 р.	Продовження теми 2. Лекція: Номенклатура конформерів. Номенклатура діастереомерів. Номенклатура енантіомерів. Абсолютна і відносна конфігурації.

5.	28 лютого – 4 березня 2022 р.	Продовження теми 2. Лекція: Поляриметрія, хіроптичні та інші методи дослідження в стереохімії. Енантіотопія і діастереотопія. Статична, динамічна стереохімія і конформаційний аналіз.
6.	7 – 11 березня 2022 р.	Тема 3. Лекція: Методи отримання оптично активних речовин. Синтези на основі природних оптично активних речовин. Методи розділення рацематів. Розділення в оптично активних розчинниках. Розділення через діастереомери та через молекулярні сполуки. Хроматографічні методи розділення. Ферментативне розділення. Рацемізація.
7.	14 - 18 березня 2022 р.	Продовження теми 3. Лекція: Асиметричний синтез і його модифікації. Синтези на основі карбонільних сполук. Стереохімічні особливості приєднання до кратних вуглець-вуглецевим зв'язкам. Синтез амінокислот. Синтези за участю хіральных оксазолінів. Дієновий синтез. Синтези в хіральному середовищі.
8.	21 - 25 березня 2022 р.	Продовження теми 3. Лекція: Закономірності асиметричного синтезу. Асиметричний каталіз. Кінетичне розщеплення. Асиметричні перетворення. Абсолютний асиметричний синтез.
9.	28 березня -1 квітня 2022 р.	Тема 4. Лекція: Визначення просторової конфігурації. Визначення конфігурації π -діастереомерів: метод циклізації, хімічна кореляція, фізичні методи. Визначення конфігурації σ -діастереомерів.
10	4 - 8 квітня 2022 р.	Продовження теми 4. Лекція: Методи визначення конфігурації енантіомерів: хімічна кореляція, порівняння оптичного обертання, хіроптичний метод, метод квазірацематів, кінетичне розщеплення
11	11 – 15 квітня 2022 р.	Тема 5. Лекція: Стереохімія алканів та їх похідних. Конформаційний аналіз алканів та їх похідних. Конформація діастереомерів. Оптично активні аліфатичні сполуки. Стереохімія реакцій аліфатичних сполук: реакції нуклеофільного, електрофільного і вільнорадикального заміщення біля насиченого атома вуглецю.
12	18 – 22 квітня 2022 р.	Продовження теми 5. Лекція: Реакційна здатність діастереомерів. Оптична активність.
13	25 – 29 квітня 2022 р.	Тема 6. Лекція: Стереохімія аліциклічних сполук. Особливості просторової ізомерії в циклах. Напруження в циклічних системах. Стереохімія малих циклів.
14	2 - 6 травня 2022 р.	Продовження теми 6. Лекція: Стереохімія реакцій похідних циклогексану. Середні цикли, особливості їх будови і властивості (трансанулярні взаємодії та реакції). Поліпропіленгліколи.
15	9 – 13 травня 2022 р.	Тема 7. Лекція: Стереохімія сполук з кратними С=C-зв'язками. E,Z-ізомерні алкени, їх властивості, стійкість і взаємоперетворення. Стереохімія сполук з кратними зв'язками в циклі: циклоолефінів, циклооктатетраєнів, циклоалкінів. Кумулени. Перициклічні реакції і їх стереохімія. Перициклічні реакції та їх класифікація. Електроциклічні реакції. Циклоприєднання. Сігматропні реакції.
16	16 – 20 травня 2022 р.	Тема 8. Лекція: Стереохімія ароматичних сполук. Конформації заміщених аренів. Стеричні порушення спряження. Просторові перешкоди в реакціях ароматичних сполук.

17	23 –27 травня 2022 р.	Тема 9. Лекція: Стереохімія сполук азоту. Просторова будова атома нітрогену. Стереохімія сполук нітрогену, зв'язаного подвійним зв'язком: оксими, гідразони, основи Шифа, азасполуки. Оптична активність сполук нітрогену.
18	30 травня – 4 червня 2022 р.	Тема 10. Лекція: Стереохімія природних і комплексних сполук. Уявлення про просторову будову вуглеводів, білків, нуклеїнових кислот. Стереоспецифічність біохімічних процесів. Стереохімія комплексних сполук.

Практичні заняття

Метою практичних занять є ознайомлення з поняттями просторової будови, стереохімічною номенклатурою, конфігурацією, конформацією; дослідження впливу будови речовини на оптичну активність і вивчення методів її розрахунку; уміння встановлювати зв'язок між будовою органічних сполук з оптичним обертанням; ознайомлення зі стереохімією найважливіших класів органічних сполук на прикладі органічних молекул тощо.

№	Тиждень	Тема	Опис запланованої роботи
1.	1	Методи просторового зображення молекул. Назви сполук з використанням R,S-номенклатури.	На прикладах органічних молекул оптично активних сполук вміння їх зображувати у просторі та назвати з використанням R,S-номенклатури.
2.	2	Побудова проєкцій Фішера та їх конфігурація по D,L-системі.	Вміння будувати проєкції Фішера для молекул з одним та двома хіральними центрами як ілюстрації будови оптичних ізомерів та їх конфігурації.
3.	3.	Доповіді про властивості пар енантіомерів найбільш розповсюджених речовин у косметичній та фармацевтичній практиках.	Уміння аналізувати оптично активні сполуки за їх будовою та властивостями з метою подальшого застосування у косметичній та фармацевтичній практиках.
4.	4	Вивчення оптичної активності, хіральності і асиметрії молекул на прикладах.	На прикладах органічних молекул вивчення фундаментальних понять теоретичної стереохімії - хіральності, оптичної активності та асиметрії.
5.	5.	Правила R,S-номенклатури для позначення конфігурації енантіомерів.	Дослідження будови оптично активних речовин та застосування правил R,S-номенклатури для позначення їх конфігурації.
6.	6	Вплив видів взаємодій в молекулах на стійкість конформацій на прикладах.	На прикладах органічних молекул дослідження взаємодій і стійкості їх конформацій.
7.	7	Доповіді про властивості пар енантіомерів найбільш розповсюджених	Порівняння пар оптично активних сполук за їх будовою та властивостями з метою

		<i>речовин у косметичній та фармацевтичній практиці.</i>	<i>подальшого застосування у косметичній та фармацевтичній практиках.</i>
8.	8	<i>Вивчення методів визначення оптичної чистоти на прикладах.</i>	<i>Розуміння і використання методів встановлення вмісту в продуктах розщеплення рацематів того чи іншого енетіомеру.</i>
9.	9	<i>Дослідження конфігурацій діастереомерів на прикладах.</i>	<i>Вивчення визначення конфігурацій діастереомерів методами УФ-, ЯМР-, ІЧ-спектроскопії.</i>
10	10	<i>Доповіді про альтернативні методи визначення конфігурацій енантіомерів.</i>	<i>Поняття використання альтернативних методів (крім хімічної кореляції та методу оптичного порівняння) визначення конфігурацій енантіомерів.</i>
11	11	<i>Вплив будови речовини на оптичну активність і методи її розрахунку.</i>	<i>Знання методів розрахунку оптичної активності органічних молекул.</i>
12	12	<i>Зв'язок будови та оптичного обертання.</i>	<i>Уміння встановлювати зв'язок між будовою органічних сполук з оптичним обертанням.</i>
13	13	<i>Стереохімія циклогексанових сполук: форма кілець, аксіальні і екваторіальні замісники, конверсія, конформаційна енергія.</i>	<i>Ознайомлення зі стереохімією найважливіших класів органічних сполук на прикладі шестичленних циклоалканів.</i>
14	14	<i>Конденсовані системи. Спіралі. Каркасні структури.</i>	<i>Знайомство з системами із малих циклів, мостиковими системами, гідрованими нафталінами, антраценами і фенантренами, каркасними структурами з точки зору стереохімічних закономірностей.</i>
15	15	<i>Отримання E,Z-ізомерів. Стереохімія реакцій приєднання по подвійному C = C зв'язку.</i>	<i>На прикладах реакцій приєднання по C = C зв'язку дослідження стереохімічних закономірностей утворення нових органічних сполук.</i>
16	16	<i>Оптично активні ароматичні сполуки: похідні бензолу з хіральною бічною ланцюгом, похідні дифенілу, циклофани, анса-сполуки, геліцени і спіральні фенантрени.</i>	<i>Знайомство зі стереохімією найважливіших класів органічних сполук на прикладі молекул ароматичних сполук та їх похідних.</i>
17	17	<i>Особливості стереохімічної будови амідів карбонових кислот.</i>	<i>Розуміння особливостей стереохімічної будови нітрогенвмісних похідних карбонових кислот</i>
18	18	<i>Перспективні напрямки розвитку стереохімії.</i>	<i>Вміння аналізувати перспективні напрямки і новітні здобутки стереохімічної науки та</i>

			використовувати набуті знання в хімічній технології.
--	--	--	--

6. Самостійна робота студента

.Самостійна робота студента (СРС) протягом семестру включає повторення лекційного матеріалу, самостійного опанування матеріалу, винесеного на позааудиторне вивчення за підручниками та навчальними посібниками, підготовка до модульної контрольної роботи, підготовка до заліку. Рекомендована кількість годин, яка відводиться на підготовку до зазначених видів робіт:

Вид СРС	Кількість годин на підготовку
<i>Підготовка до практичних занять: повторення лекційного матеріалу та вивчення окремих питань за підручниками і посібниками.</i>	<i>4 години на тиждень</i>
<i>Підготовка до контрольних робіт (одна модульна контрольна у вигляді двох контрольних робіт)</i>	<i>4 години *2 = 8 годин</i>
<i>Підготовка до заліку</i>	<i>6 годин</i>

Політика та контроль

7. Політика навчальної дисципліни (освітнього компонента)

За звичайного режиму роботи університету лекції та практичні заняття проводять у навчальних аудиторіях. За змішаного режиму лекційні заняття проводять на платформі дистанційного навчання Сікорський, а практичні заняття, контрольні та лабораторний практикум – аудиторно. За дистанційного режиму всі заняття проводять через платформу дистанційного навчання Сікорський. Відвідування занять та ознайомлення з навчальними матеріалами є обов'язковим

Політика дедлайнів та перескладань: визначається п. 8 Положення про поточний, календарний та семестровий контроль результатів навчання в КПІ ім. Ігоря Сікорського

Політика щодо академічної доброчесності: визначається політикою академічної чесності та іншими положеннями Кодексу честі університету.

8. Види контролю та рейтингова система оцінювання результатів навчання (PCO)

Контроль та PCO розроблені відповідно до Положення про поточний, календарний та семестровий контроль результатів навчання в КПІ ім. Ігоря Сікорського:

- 1. Поточний контроль: опитування за теоретичними питаннями, вирішування задач на практичних заняттях, МКР.*
- 2. Календарний контроль: проводиться двічі на семестр як моніторинг поточного стану виконання вимог силабусу.*
- 3. Семестровий контроль: залік.*

РЕЙТИНГОВА СИСТЕМА ОЦІНЮВАННЯ РЕЗУЛЬТАТІВ НАВЧАННЯ

Рейтинг студента з кредитного модуля «Статична та динамічна стереохімія» складається з балів, що він отримує за:

- 1) МКР (МКР поділяється на 2 контрольні роботи тривалістю по 45 хвилин кожна).
- 3) домашня контрольна робота.

Система рейтингових (вагових) балів та критерії оцінювання

1. Модульний контроль

Ваговий бал за МКР – 80. Максимальна кількість балів за дві контрольні роботи дорівнює $40 \times 2 = 80$ балів.

3. Домашня контрольна робота

Ваговий бал – 20 балів.

9. Додаткова інформація з дисципліни (освітнього компонента)

- Інформаційні та методичні матеріали до дисципліни наведені у Moodle (платформа Sikorsky-distance) за посиланням <https://do.ipو.kpi.ua/login/?lang=ru>.

Робочу програму навчальної дисципліни (силабус):

Складено старшим викладачем кафедри фізичної хімії:

к.х.н. Циганович О.А.

Погоджено Методичною комісією факультету (протокол № 10 від 23 червня 2021 р.)

Ухвалено кафедрою фізичної хімії (протокол № 13 від 30 червня 2021 р.)¹

¹ Силабус спочатку погоджується метод. комісією, а потім ухвалюється кафедрою.