

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Смирнов Сергей Николаевич
Должность: врио ректора
Дата подписания: 15.07.2025 11:14:21
Уникальный программный ключ:
69e375c64f7e975d4e8830e7b4fcc2ad1bf35f08

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»



Утверждаю:

Руководитель ООП:

 П.М. Пахомов

14 мая 2025

Рабочая программа дисциплины (с аннотацией)

Конформационный анализ

Направление подготовки
04.04.01 химия

Направленность (профиль)
Физическая химия

Для студентов 1 курса очной формы обучения

Составитель: к.х.н., доцент Русакова Н.П.

Тверь, 2025

I. Аннотация

1. Цель и задачи дисциплины

Целью освоения дисциплины является: знакомство студентов с основными представлениями конформационного анализа, занимающего ключевые позиции в современной химии.

Задачами освоения дисциплины являются:

- раскрытие основных принципов конформационного анализа
- применять конформационного анализа для решения конкретных проблем современной химии.

В качестве предмета дисциплина использует учение о пространственном (конформационном) строении молекул и его влиянии на свойства (физические, химические, биологические). Содержание практических занятий позволяет провести и моделирование конформационных преобразований в молекулах и топологический анализ электронной плотности получаемых устойчивых состояний.

2. Место дисциплины в структуре ООП

Дисциплина входит в обязательную часть Блока 1. «Дисциплины» учебного плана.

Дисциплина «Конформационный анализ» непосредственно связана со многими дисциплинами реализуемой ООП, он логически и содержательно-методически продолжает часть программ дисциплин, изучаемых в первом семестре, в то же время, его содержание дает базу и пересекается в понятийном и терминологическом аппарате с некоторыми дисциплинами второго и третьего. Так, в рамках курса «Конформационный анализ» предполагается использование некоторых квантово-химических программ, предлагаемых к ознакомлению в дисциплине «Компьютерные технологии в науке и образовании», для анализа конформационных состояний (основных и переходов между ними), являющихся предметом изучения «Нанохимии». Базовые элементы «Конформационного анализа» также используются при реализации рабочих программ «Органические реагенты в современной химии», «Имитационные методы моделирование», «Симметрия кристаллических структур» и др.

3. Объем дисциплины: 3 зачетных единицы, 108 академических часов, в том числе:

контактная аудиторная работа: лекции - 15 часов, лабораторные работы - 15 часов, в т.ч. лабораторная практическая подготовка - 15 часов; **самостоятельная работа: 78 часов.**

4. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы

Планируемые результаты освоения образовательной программы (формируемые компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине
ОПК-1 Способен выполнять комплексные и расчетно-теоретические исследования в избранной области химии или смежных наук с использованием современных приборов, программного обеспечения и баз данных профессионального назначения	ОПК-1.2 Использует современное оборудование, программное обеспечение и профессиональные базы данных для решения задач в избранной области химии или смежных наук
ОПК-3 Способен использовать вычислительные методы и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности	ОПК-3.2 Использует стандартные и оригинальные программные продукты, при необходимости адаптируя их для решения задач профессиональной деятельности

5. Форма промежуточной аттестации и семестр прохождения:

зачет во 2-м семестре.

6. Язык преподавания русский.

II. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий

1. Для студентов очной формы обучения

Учебная программа – наименование разделов и тем	Всего (час.)	Контактная работа (час.)		Самост. работа (час.)
		Лекции	Практич. занятия	
Основы стереохимии	12	2	2	8
Молекулярные полиэдры	22	2	2	18
Внутреннее вращение	24	3	3	18
Конформации циклических систем	12	2	2	8
Квантовая химия внутренних вращений	38	6	6	26
ИТОГО	108	15	15	78

III. Образовательные технологии

Учебная программа – наименование разделов и тем	Вид занятия	Образовательные технологии
Основы стереохимии	<ul style="list-style-type: none"> • Лекция • Практическое занятие 	<ul style="list-style-type: none"> • традиционные (фронтальная лекция, решение упражнений), • цифровые (показ презентаций)
Молекулярные полиэдры	<ul style="list-style-type: none"> • Лекция • Практическое занятие 	<ul style="list-style-type: none"> • традиционные (фронтальная лекция, решение упражнений), • цифровые (показ презентаций)
Внутреннее вращение	<ul style="list-style-type: none"> • Лекция • Практическое занятие • Проверка самостоятельной работы 	<ul style="list-style-type: none"> • традиционные (фронтальная лекция, решение упражнений), • цифровые (показ презентаций) • групповая работа
Конформации циклических систем	<ul style="list-style-type: none"> • Лекция • Практическое занятие 	<ul style="list-style-type: none"> • традиционные (фронтальная лекция, решение упражнений), • цифровые (показ презентаций)
Квантовая химия внутренних вращений	<ul style="list-style-type: none"> • Лекция • Практическое занятие • Проверка самостоятельной работы 	<ul style="list-style-type: none"> • традиционные (фронтальная лекция), • цифровые (показ презентаций) • групповая работа • контрольная работа

IV. Оценочные материалы для проведения текущей и промежуточной аттестации

№	Результат (индикатор)	Вид/способ	Критерии оценивания
МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ТЕКУЩЕЙ АТТЕСТАЦИИ			

1	ОПК-1.2; ОПК-3.2	вид: Домашние задания для самостоятельной работы к практической работе по теме № 1 практической работе по теме № 2 практической работе по теме № 3 практической работе по теме № 4 практической работе по теме № 5 способ: на компьютере результаты: word документы, презентация, оформленные по заданию отчеты.	Оценивается выполнение задания, оформленное в соответствии с требованиями. Критерии оценки: 5 баллов – задание оформлено в соответствии с требованиями, результаты можно использовать в практической работе; 4 баллов – задание частично оформлено в соответствии с требованиями, результаты можно использовать в практической работе; 3 баллов – задание частично оформлено в соответствии с требованиями, результаты требуют незначительной корректировки; 2 баллов – задание частично оформлено в соответствии с требованиями, результаты требуют серьезной переработки; 1 баллов – задание не оформлено в соответствии с требованиями, результаты требуют серьезной переработки; 0 баллов – задание не представлено;
---	---------------------	--	--

МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

На зачете выполняется контрольная работа, которая охватывает тематику самостоятельно выполняемых индивидуальных занятий и практические работы. Своевременная сдача всех заданий и практических работ на 3-5 баллов в течении семестра позволяет получить на зачетном занятии оценку «зачтено» автоматом. Пропущенные темы отрабатываются или выносятся на зачет в виде элементов контрольной работы.

Шкала оценивания выполнения индикаторов:

Индикатор считается выполненным, если либо ко времени промежуточной аттестации магистрант набрал как минимум пороговое количество баллов за те виды активности (каждую самостоятельную и каждую практическую работу), которые отвечают за данный индикатор.

Шкала и критерии выставления оценок за дисциплину:

Шкала и критерии выставления оценок «зачтено» и «незачтено» описаны в локальной нормативной документации Тверского государственного университета (Положение о рейтинговой системе обучения студентов ТвГУ). Положительная оценка может быть выставлена только в том случае, если выполнены все индикаторы.

V. 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. - Режим доступа: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=232336>

б) Дополнительная литература:

1. Андрианов, А.М. Конформационный анализ белков: теория и приложения / А.М. Андрианов ; под ред. Г.В. Малаховой. - Минск: Белорусская наука, 2013. - 518 с. - ISBN 978-985-08-1529-3 ; То же [Электронный ресурс]. - Режим доступа: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=142264>
2. Туровцев Р. В., Туровцев В. В., Орлов Ю. Д., Внутреннее вращение в молекулах. Основные понятия. Учебно-методическое пособие ФГБОУ ВПО «Тверской государственной университет». Тверь. 2013. Электронная версия. Режим доступа: http://aquila.tversu.ru/LIB/Group/posobie/Pos_01.pdf
3. Барташевич Е.В. Стереохимия и симметрия молекул: учебное пособие/Е.В. Барташевич, Д.К. Никулов. – Челябинск: Издательский центр ЮУрГУ, 2011. – 73 с. Режим доступа: <http://chembaby.com/wp-content/uploads/2015/12/ftd.pdf>

2) Программное обеспечение

а) Лицензионное программное обеспечение:

- Многофункциональный редактор ONLYOFFICE
- HyperChem

б) Свободно распространяемое программное обеспечение

- Google Chrome
- ISIS Draw 2.4 Standalone
- MarvinSketch 5.2.4

3) Современные профессиональные базы данных и информационные справочные системы

- ЭБС «ZNANIUM.COM» www.znanium.com;
- ЭБС «Университетская библиотека онлайн» <https://biblioclub.ru/>;
- ЭБС «Лань» <http://e.lanbook.com>

4) Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины

- Электронная образовательная среда ТвГУ <http://lms.tversu.ru>
- Научная библиотека ТвГУ <http://library.tversu.ru>
- Сайт о химии <http://www.xumuk.ru/>
- Сайт химического факультета МГУ <http://www.chem.msu.ru/rus/teaching/phys.html>

VI. Методические материалы для обучающихся по освоению дисциплины

1. Задания и контроль самостоятельной работы

Перед каждым практическим занятием необходима самостоятельная работа по подготовке к его выполнению по индивидуальным темам. Для этого магистранту предлагаются объекты, работа с которыми даст необходимый материал для работ с темами. Данные, которые будут получены в результате выполнения тем, будут использованы в практических работах. Все практические работы, не выполненные в аудиторские часы занятий, так же остаются в качестве домашнего задания. Срок выполнения – две недели, после

чего максимальное количество баллов за соответствующее задание снижается в два раза.

Примеры объектов для индивидуальной работы по темам:

1. $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-NH}_2$;
2. $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CHCl-CH}_3$;
3. $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-CH}_2\text{-OH}$;
4. $\text{CH}_3\text{-CH(OH)-CH}_3$;
5. $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-C(O)H}$;
6. $\text{C(OH)}_2\text{-CH}_2\text{-OH}$;
7. $\text{CH}_3\text{-CH(OH)-CH(OH)-CH}_3$;
8. $\text{CH}_3\text{-CH(NH}_2\text{)-CH}_2\text{-CH}_3$ и др.

Магистрант может выбрать другой объект более близкий к своей научной работе после согласования с преподавателем дисциплины.

Темы для самостоятельной работы.

Тема 1:

Основы стереохимии.

Цель: изучение конституции, конфигурации и конформации объекта с помощью MarvinSketch 5.2.4.

Задачи:

1. Выделить для объекта возможные типы конституции.
2. Выделить для объекта возможные типы конфигурации.
3. Выделить для объекта возможные типы конформации.
4. Отчет по заданию представить по пунктам в виде документа Word.

Тема 2:

Молекулярные полиэдры.

Цель: вывод изомеров замещения для объекта и отображение их с помощью MarvinSketch 5.2.4.

Задачи:

1. Вывести для объекта возможные изомеры замещения.
2. Отобразить изомеры замещения в MarvinSketch 5.2.4.
3. Выделить для изомеров замещения возможные типы конформации в MarvinSketch 5.2.4.
4. Отчет по заданию представить по пунктам в виде документа Word.

Тема 3:

Внутреннее вращение.

Цель: изучение конформеров объекта по проекциям Ньюмена.

Задачи:

1. Вывести для объекта конформеры в MarvinSketch 5.2.4.
2. Отобразить их в виде проекций Ньюмена
3. Отчет по заданию представить по пунктам в виде таблицы Excel.

Тема 4:

Внутреннее вращение. Потенциальные кривые внутренних вращений.

Цель: построение и изучение потенциальных кривых внутреннего вращения объекта вокруг одной из связей С-С.

Задачи:

1. По полученным от преподавателя данным построить потенциальную кривую внутреннего вращения – $V(\varphi)$
2. Определить тип, четность $V(\varphi)$
3. По $V(\varphi)$ найти разности энергий поворотных изомеров, величину торсионных барьеров
4. Отчет по заданию представить в Word, часть пунктов оформить в виде таблиц Excel.

Тема 5:

Квантовая химия внутренних вращений.

Цель: изучить квантово-химические программы, используемые для изучения внутренних вращений; методы и базисы, применяемые для получения потенциальной функции внутреннего вращения.

Задачи:

1. С помощью поиска в сети интернет составить список квантово-химических программ, используемых для осуществления внутренних вращений.
2. Найти методики и типы базисов, используемые в квантовой химии для получения внутренних вращений. Провести их анализ
3. Отчет по заданию представить в виде презентации Power Point.

Темы практических работ.

Тема 1:

Основы стереохимии.

Цель: изучение стереохимической номенклатуры Кана-Ингольда-Прелога; основ хиральности и энантиомерии.

Задачи:

1. Определить тип стереохимической номенклатуры Кана-Ингольда-Прелога для выбранного объекта.
2. Выделить для объекта хиральный(е) центр(ы).
3. Изобразить для объекта энантиомер(ы).
4. Отчет по заданию представить по пунктам с обоснованием каждого из них.

Тема 2:

Молекулярные полиэдры.

Цель: Изучение координационных полиэдров.

Задачи:

1. Определить и обосновать, какие из выделенных для объекта изомеров замещения можно отнести к координационным полиэдрам.
2. Дать ответ, как будет меняться жесткость нежесткость объекта (A_mX_n) от количества и места заместителей X и почему.
3. Отчет по заданию представить по пунктам.

Тема 3:

Внутреннее вращение.

Цель: изучение вида, числа и симметрии конформеров объекта.

Задачи:

1. Отобразить вид стереометрии конформеров объекта.
2. Найти симметричные структуры и указать их группу симметрии.
3. Отчет по заданию представить по пунктам.

Тема 4:

Конформации циклических систем.

Цель: Изучить конформации природных соединений, циклогексана и его производных.

Задачи:

1. Природные соединения и их конформации.
2. Типы конформаций циклогексана.
3. Типы конформаций производных циклогексана.
4. Отчет по заданию представить по пунктам.

Тема 5:

Квантовая химия внутренних вращений.

Цель: Изучение различия электронных параметров групп конформеров объектов.

Задачи:

1. Различие в зарядах групп в зависимости от конформации.
2. Различие в объемах групп в зависимости от конформации.
3. Различие в полной электронной энергии и энергии групп в зависимости от конформации
4. Отчет по заданию представить по пунктам.

2. Тематическое наполнение дисциплины (для дополнительного самостоятельного изучения)

I. ОСНОВЫ СТЕРЕОХИМИИ

Химическое и стереохимическое строение. Стереохимическая конфигурация. Стереохимическая номенклатура Кана-Ингольда-Прелога (*R,S*). Номенклатура *D,L* (углеводы, аминокислоты, белки) Конформация. Изомерия (структурная и пространственная). Хиральность. Энтиомеры и диастереомеры.

Химическая и стереохимическая топология. Молекулы без химических связей. Катенаны, ротаксаны, узлы. Молекулярный лист Мебиуса.

II. МОЛЕКУЛЯРНЫЕ ПОЛИЭДРЫ

Координация атомов. Геометрия молекул и молекулярных ионов вида Ax_n ($n = 2, 3, \dots, 12$). Координационные полиэдры и хиральность.

Полиэдраны как молекулы, имеющих форму различных многогранников, в том числе тел Платона – тетраэдра (P_4, As_4), октаэдра ($B_6H_6^{2-}$), куба (C_8H_8), икосаэдра ($B_{12}H_{12}^{2-}$) и пентагондодекаэдра ($C_{20}H_{20}$). Органические

полиэдраны. Изомерные полиэдраны вида C_8H_8 (кубан и кунеан) и т.д. Фуллерены.

Полиэдры с треугольными гранями (дельтаэдраны). Боргидридные ионы B_nH_{n2-} и карбораны на их основе $C_2B_{n-2}H_n$ ($n = 5, 6, \dots, 12$).

Вывод изомеров замещения молекулярных (координационных) полиэдров. Теория перечисления Пойа

Жесткие и нежесткие молекулы. Стереохимическая нежесткость и ее проявления. Колебания квазилинейных молекул. Пирамидальная инверсия. Псевдовращение Берри. Внутреннее вращение (см. ниже).

III. ВНУТРЕННЕЕ ВРАЩЕНИЕ

Внутреннее вращение молекул. Природа явления. Потенциальная функция внутреннего вращения. Типы кривых потенциальной энергии внутреннего вращения. Разности энергий поворотных изомеров и барьеры внутреннего вращения.

Конформационное состояние алканов. Вид и число конформеров, их симметрия, статистических вес, энергетические и энтропийные различия, конформационная свободная энергия, содержание конформеров в поворотно-изомерной смеси.

IV. КОНФОРМАЦИИ ЦИКЛИЧЕСКИХ СИСТЕМ

Конформации моноциклов. Малые, обычные, средние, большие циклы (общая характеристика). Гетероциклы. Инверсия циклов. Псевдовращение.

Конформации циклогексана и его производных. Конформационные аномалии. Аномерный эффект. Конформации природных соединений.

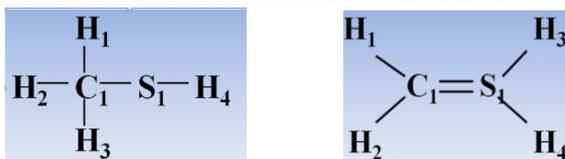
V. КВАНТОВАЯ ХИМИЯ ВНУТРЕННИХ ВРАЩЕНИЙ

Методы и базисы расчёта для проведения вращения органического соединения, анализ потенциальной функции внутреннего вращения.

Сравнение конформеров по значениям колебательных частот, полной электронной энергии, электронным параметрам групп.

3. Примеры заданий для контрольной работы

1. Метантиол и метантиал являются:



Укажите правильный тип.

- Конституционными изомерами
- Конформационными изомерами.
- Конфигурационными изомерами.
- Верны два и более вариантов.

Напишите изомеры в матричной форме.

2. Рассмотрите соединение:



Выберите правильный вариант:

- Молекула хиральна,
- молекула ахиральна

Напишите:

- Сtereохимическую формулу соединения
- Формулу Ньюмена (связь С-С, обозначенная стрелкой)
- Проекцию Фишера

Определите тип конфигурации (укажите на проекции Фишера):

- D или L
- R или S

3. Областью определения потенциальной функции внутреннего вращения является:

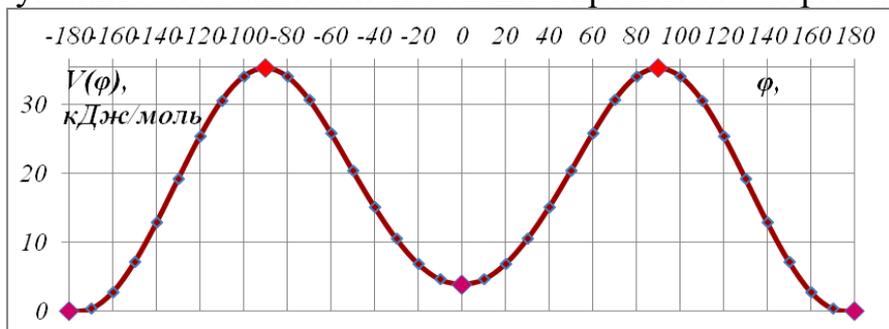
Укажите правильный ответ.

- Количество *гош*- и *транс*-конформеров соединения (минимумов потенциальной функции внутреннего вращения).
- Высота барьера внутреннего вращения.
- Значения торсионного угла (от начального до конечного), полученные при внутреннем вращении соединения.
- Зачение энергии активации переходного состояния, полученного при внутреннем вращении соединения.

4. Определите по графику потенциальной функции внутреннего вращения:

- количество конформеров, обозначьте их
- высоту барьера внутреннего вращения
- чётность функции
- область определения функции
- количество переходных состояний, обозначьте их
- тип вращения

- укажите состояние с наибольшим временем заторможенности
- укажите состояние с наименьшим временем заторможенности



5. С помощью каких квантово-химических методов и базисного набора можно осуществить вращение молекулы в программе GAUSSIAN 03?

Укажите правильный ответ.

- a # opt=modredundant rb3lyp/6-311++g(3df,3pd) 10f 6dscf=tight.
- б # opt=(calcfc,tight,qst2,maxcycle=100) freq rb3lyp/6-311++g(3df,3pd) 10f 6d scf=tight.
- в # opt=(calcall,tight,maxcycle=100) rb3lyp/6-311++g(3df,3pd) 10f 6d scf=tight.
- г # opt=(calcall,tight,maxcycle=100) ub3lyp/6-311++g(3df,3pd) 10f 6d scf=tight.

4. Указания для обучающихся

Организуя свою учебную работу, магистранты должны, во-первых, выявить рекомендуемый режим и характер учебной работы по изучению теоретического курса, практическому применению изученного материала, по выполнению заданий для самостоятельной работы, по использованию информационных технологий и т.д. Во-вторых, ознакомиться с указанным в методическом материале по дисциплине перечнем учебно-методических изданий, рекомендуемых студентам для подготовки к занятиям и выполнению самостоятельной работы, а также с методическими материалами на бумажных и/или электронных носителях, предоставляемых студентам преподавателем во время занятий.

Самостоятельная работа обучающихся, предусмотренная учебным планом, должна соответствовать более глубокому усвоению изучаемого курса, формировать навыки исследовательской работы и ориентировать студентов на умение применять теоретические знания на практике.

VII. Материально-техническое обеспечение

Для аудиторной работы

Аудитория кафедры
физической химии. № 410,
170002, Тверская обл., г.
Тверь, пер. Садовый, д.
35

Источник бесперебойного питания
ipronSMARTPOWERPRO 1400, принтер HPLS 6,
компьютеры, столы, стулья, доска учебная
MS Office 365 pro plus – Акт приема-передачи № 369 от 21
июля 2017;
MS Windows 10 Enterprise – Акт приема-передачи № 369 от
21 июля 2017;
Google Chrome – бесплатное ПО.
Origin 8.1 Sr2 договор №13918/M4 от 24.09.2009 с ЗАО
«СофтЛайн Трейд»;
ISIS Draw 2.4 Standalone – бесплатное ПО

Аудитория кафедры
физической химии. № 408,
170002, Тверская обл., г.
Тверь, пер. Садовый, д.
35

УФ-спектрометр Sprecord-VIS M40, ИК-спектрометр Sprecord-M75, лабораторный фотоэлектрический абсорциометр-нефелометр ЛМФ-69, рефрактометр ИРФ-454 Б2М, ареометры, спектрофотометр ПромЭкоЛаб ПЭ-5400В, анализатор вольтамперометрический АКВ-07МК, магнитные мешалки, лабораторный кондуктометр Анион 4120, весы аналитические лабораторные ВЛ-120 и ВК-600, весы технические лабораторные ВЛТЭ-1100, дистиллятор UD-1100, сушильный шкаф, вытяжной шкаф, потенциометр постоянного тока, барометр анероид, электрическая плитка, рН-метры 410, стационарный мутномер НАСН 2100NIS, лабораторные столы, стулья, лабораторная химическая посуда, реактивы, доска учебная MS Office 365 pro plus – Акт приема-передачи № 369 от 21 июля 2017

VIII. Сведения об обновлении рабочей программы дисциплины

№п.п.	Обновленный раздел рабочей программы дисциплины	Описание внесенных изменений	Реквизиты документа, утвердившего изменения
1.	Раздел V. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины	Добавлены новые пособия в основной список литературы	Протокол №11 от 28.04.21г. заседания ученого совета химико-технологического факультета
2.			