

ФЕДЕРАЛЬНОЕ АГЕНСТВО НАУЧНЫХ ОРГАНИЗАЦИЙ
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт органического синтеза им. И.Я. Постовского
Уральского отделения Российской академии наук
(ИОС УрО РАН)

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА

элемента ООП подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре

СТРОЕНИЕ И РЕАКЦИОННАЯ СПОСОБНОСТЬ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

Направление подготовки:

33.06.01 Фармация

Направленность:

Фармацевтическая химия. Фармакогнозия

Квалификация:

Исследователь. Преподаватель-исследователь

Форма обучения:

Очная, заочная

Раздел ООП:

Блок Б 1. «Дисциплины (модули)». Вариативная часть

Программа дисциплины составлена на основании федерального государственного образовательного стандарта к основной образовательной программе высшего образования – программе подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре по направлению 33.06.01 Фармация, утвержденного приказом Минобрнауки России от 03.09.2014 № 1201, с учетом приказа Минобрнауки России от 30.04.2015 № 464 «О внесении изменений в федеральные государственные образовательные стандарты высшего образования (уровень кадров высшей квалификации)».

Автор-разработчик:

1. Пестов А.В., к.х.н., доцент, старший научный сотрудник ИОС УрО РАН

АННОТАЦИЯ ПРОГРАММЫ

Программа предназначена для аспирантов, обучающихся по образовательным программам высшего образования – программам подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре в соответствии с федеральным государственным образовательным стандартом.

Дисциплина «Строение и реакционная способность органических соединений» относится к вариативной части Блока 1 «Дисциплины (модули)» основной образовательной программы (далее – ООП) аспирантуры и является дисциплиной, обязательной для освоения.

Рабочая программа соответствует:

- паспорту научной специальности 14.04.02 Фармацевтическая химия. Фармакогнозия (направленность Фармацевтическая химия. Фармакогнозия);
- учебному плану ООП по направлению 33.06.01 Фармация.

Освоение дисциплины осуществляется на первом курсе (2 семестр) обучения в соответствии с графиком учебного процесса.

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 з.е. (108 час.), в том числе, аудиторная работа представлена лекционными, практическими и лабораторными занятиями.

Цель изучения дисциплины – формирование у аспирантов системы углубленных знаний о взаимосвязи строения и реакционной способности органических соединений, понимания роли молекулярных орбиталей, их превращений в ходе реакции.

Задачи дисциплины – обеспечить необходимый объем фундаментальных теоретических знаний о строении и свойствах органических веществ и практических навыков работы на современной научной аппаратуре, применяемой при проведении химических экспериментов, аналитических и физико-химических исследований в области органического синтеза.

Систематизирование материала по дисциплине происходит в рамках девяти разделов:

- Молекулярные орбитали и органические реакции;
- Делокализация и сопряжение. Ароматичность;
- Кислотность, основность;
- Нуклеофильность;
- Равновесие и скорость реакции;
- Пространственное строение и реакционная способность;
- Перициклические реакции;
- Катализ в реакциях кросс-сочетания;
- Изучение механизма реакций.

Виды контроля:

- текущий – в рамках собеседования по итогам выполнения лабораторных работ;
- промежуточный – зачет (2 семестр);
- итоговый – в рамках государственного экзамена.

1 ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ИЗУЧЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Цель изучения дисциплины – формирование у аспирантов системы углубленных знаний о взаимосвязи строения и реакционной способности органических соединений, понимания роли молекулярных орбиталей, их превращений в ходе реакции.

Задачи дисциплины – обеспечить необходимый объем фундаментальных теоретических знаний о строении и свойствах органических веществ и практических навыков работы на современной научной аппаратуре, применяемой при проведении химических экспериментов, аналитических и физико-химических исследований в области органического синтеза.

2 ТРЕБОВАНИЯ К УРОВНЮ ПОДГОТОВКИ АСПИРАНТА, ЗАВЕРШИВШЕГО ИЗУЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

2.1 Компетенции, формируемые в результате освоения дисциплины:

- способность к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях (УК-1);
- способность и готовность к проведению научных исследований в области обращения лекарственных средств (ОПК-2);
- способность к самостоятельной организации НИР и получению научных результатов, удовлетворяющих установленным требованиям по направленности (специальности) обучения (ПК-1).

2.2. Требования к результатам освоения дисциплины:

В результате освоения дисциплины аспирант должен

знать:

- методы критического анализа и оценки современных научных достижений, а также методы генерирования новых идей при решении исследовательских и практических задач

- современное состояние науки в области органической химии;

уметь:

- анализировать альтернативные варианты решения исследовательских и практических задач и оценивать потенциальные выигрыши/проигрыши реализации этих вариантов

- выбирать и применять в профессиональной деятельности экспериментальные и расчетно-теоретические методы исследования

- представлять научные результаты;

владеть:

- навыками анализа методологических проблем, возникающих при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях;

- навыками критического анализа и оценки современных научных достижений и результатов деятельности по решению исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях

- навыками планирования научного исследования, анализа получаемых результатов и формулировки выводов

- методами планирования, подготовки, проведения НИР, анализа полученных данных, формулировки выводов и рекомендаций.

2.3 Связь с последующими элементами ООП

Знания и навыки, полученные аспирантами при изучении дисциплины «Строение и реакционная способность органических соединений», необходимы для выполнения аспирантами элементов ООП Блока 3 «Научные исследования»: научно-исследовательская деятельность и подготовка научно-квалификационной работы.

3 СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

3.1 Виды учебной работы и контроля освоения дисциплины (очная форма обучения)

Виды учебной работы и контроля	Трудоемкость, час/з.е.		
	Всего	По учебным семестрам	
		2	5
Аудиторные занятия:	54/1.5	54/1.5	
Лекции	18/0.5	18/0.5	
Практические занятия	18/0.5	18/0.5	
Лабораторные занятия	18/0.5	18/0.5	
Самостоятельная работа студентов	54/1.5	54/1.5	
Вид контроля:	-	-	
промежуточный	-	Зачет	
итоговый	-	-	ГИЭ
Общая трудоемкость по учебному плану	108/3.0	108/3.0	

3.2 Виды учебной работы и контроля освоения дисциплины (заочная форма обучения)

Виды учебной работы и контроля	Трудоемкость, час/з.е.		
	Всего	По учебным семестрам	
		2	7
Аудиторные занятия:	6/0.18	6/0.18	
Лекции	2/0.06	2/0.06	
Практические занятия	2/0.06	2/0.06	
Лабораторные занятия	2/0.06	2/0.06	
Самостоятельная работа студентов	102/2.82	102/2.82	
Вид контроля:	-	-	
промежуточный	-	Зачет	
итоговый	-	-	ГИЭ
Общая трудоемкость по учебному плану	108/3.0	108/3.0	

3.3 Разделы дисциплины и виды занятий (очная форма обучения)

№ п/п	Название раздела дисциплины	Объем часов / зачетных единиц				
		Всего	лекции	практические занятия	лабораторные работы	Самостоятельная работа
1	Применение метода молекулярных орбиталей для описания органических веществ	14/0,39	2/0.056	2/0.056	6/0.166	4/0.111

2	Мезомерный эффект	11/0.306	2/0.056	1/0.028	-	8/0.222
3	Ароматичность	8/0.222	2/0.056	1/0.028	-	5/0.139
4	Кислотность, основность. Нуклеофильность	18/0.5	2/0.056	4/0.111	6/0.166	6/0.166
5	Влияние пространственного строения на реакционную способность	10/0,278	2/0.056	1/0.028	-	7/0.194
6	Перициклические реакции	10/0.278	2/0.056	2/0.056	-	6/0.166
7	Равновесие и скорость реакции	14/0.389	2/0.056	4/0.111	-	8/0.222
8	Механизмы реакций	7/0.194	2/0.056	1/0.028	-	4/0.111
9	Катализ реакций между органическими веществами	16/0.444	2/0.056	2/0.056	6/0.166	6/0.166
	<i>Итого:</i>	108/3,0	18/0.5	18/0.5	18/0.5	54/1.5

3.4 Разделы дисциплины и виды занятий (заочная форма обучения)

№ п/п	Название раздела дисциплины	Объем часов / зачетных единиц				
		Всего	лекции	практи ческие занятия	лабора торные работы	Самостоя тельная работа
1	Применение метода молекулярных орбиталей для описания органических веществ	14/0,39	0.5/0.015	-	-	13.5/0.375
2	Мезомерный эффект. Ароматичность	19/0.53	0.5/0.015	-	-	18.5/0.515
4	Кислотность, основность. Нуклеофильность	18/0.5	-	1/0.03	-	17/0.47
5	Влияние пространственного строения на реакционную способность	10/0,28	0.5/0.015	-	-	9.5/0.265
6	Перициклические реакции. Механизмы реакций	17/0.47	0.5/0.015	-	-	16.5/0.455
7	Равновесие и скорость реакции	14/0.39	-	1/0.03	-	13/0.36

9	Катализ реакций между органическими веществами	16/0.44	-	-	2/0.06	14/0.38
	<i>Итого:</i>	108/3,0	2/0.06	2/0.06	2/0.06	102/2.82

3.5 Содержание разделов дисциплины

Применение метода молекулярных орбиталей для описания органических веществ.

Атомные и молекулярные орбитали, гибридизация, образование связи, электрофильно-нуклеофильные взаимодействия, механизм реакции. Нуклеофильное присоединение к карбонильной группе: взаимодействие граничных орбиталей, траектория Бюрги-Дуница

Мезомерный эффект.

Делокализация и сопряжение. Молекулярные орбитали этилена, аллильного катиона, аниона и радикала, карбоксилат-аниона, нитрогруппы, амидной группы, бутадиена, акролеина.

Ароматичность.

Структура и энергия молекулярных орбиталей шести-, пяти-, четырех-, восьмичленных ароматических циклов, ароматичность гетероциклов.

Кислотность, основность. Нуклеофильность.

Понятие кислотности, pK_a . Влияние строения на кислотность: электроотрицательность атомов, прочность А-Н связи, гибридизация, делокализация отрицательного заряда в анионе, сопряжение, электронодонорные группировки. Понятие основности, $pK_{ан}$. Молекулярное строение и основность: электроотрицательность, доступность неподеленной электронной пары (энергия ВЗМО, влияние заместителей и гибридизации), стабилизация образующегося катиона (сольватация и делокализация), влияние ароматичности на примере аминов, амидинов, гуанидинов и их гетероциклических аналогов.

Нуклеофильность в реакциях нуклеофильного замещения у карбонильной группы и у насыщенного атома углерода (S_N2). Связь нуклеофильности и нуклеофугности с основностью. Сопряженное нуклеофильное присоединение, жесткие и мягкие нуклеофилы, кинетический и термодинамический контроль.

Влияние пространственного строения на реакционную способность.

Конформационный анализ. Конформация и конфигурация. Барьер вращения. Конформации этана, пропана, бутана. Конформации циклов, циклогексан, влияние заместителей на конформации циклогексана, реакционная способность аксиально- и экваториально замещенных циклогексанов.

Перициклические реакции.

Реакции Дильса-Альдера, граничные молекулярные орбитали, правило Вудворда-Гоффмана, регио- и стереоселективность. Диполярное циклоприсоединение. Сигматропные перегруппировки. Молекулярные орбитали в [3,3] сигматропной перегруппировке. [1,5] Сигматропный сдвиг водорода. Электроциклические реакции, дисротаторный и конротаторный механизмы.

Равновесие и скорость реакции.

Константа равновесия и энергия реагентов и продуктов реакции. Влияние энтропии на равновесие. Кинетика, константа скорости реакции и энергия активации. Катализ и кинетика. Кинетические и термодинамические продукты. Влияние растворителя.

Механизмы реакций.

Основные типы химических реакций: S_N , E, A_N , S_E , S_NAr . Порядок реакции. Константы Гаммета заместителей и реакций, связь с механизмом. Изотопный эффект.

Изотопные метки при изучении механизма на примере замещения при карбонильной группе и ANRORC реакции.

Катализ реакций между органическими веществами.

Общий кислотно-основной катализ. Биомиметический катализ. Координационный катализ. Органические соединения переходных металлов. Стабильность, правило 18 (16) электронов. Особенности связей. Окислительное присоединение, восстановительное элиминирование, миграционное включение. Катализируемые палладием(0) реакции гомогенного катализа, каталитический цикл: реакции Хека, Стилле, Сузуки, Соногашира.

3.6 Тематика практических занятий и лабораторных работ

Раздел дисциплины	Тема практического занятия	Наименование лабораторной работы
Применение метода молекулярных орбиталей для описания органических веществ	Описание молекулярных орбиталей в органических веществах	Описание молекулярных орбиталей в органических веществах с помощью спектроскопических методов
Мезомерный эффект	Описание электронного строения органических молекул	-
Ароматичность	Описание молекулярных орбиталей ароматических систем	-
Кислотность, основность. Нуклеофильность	Зависимость величины pK_a от растворителя и строения органических соединений	Определение величины pK_a в воде и неводных растворителях
Влияние пространственного строения на реакционную способность	Конформационный анализ.	-
Перициклические реакции	Взаимодействие граничных орбиталей	-
Равновесие и скорость реакции	Константа скорости реакции. Константа равновесия	-
Механизмы реакций	Влияние строения органического вещества на особенность реализации механизма	-
Катализ реакций между органическими веществами	Особенности координационного катализа	Влияние природы металлоцентра на катализ реакции переэтерификации

3.7 Самостоятельная работа

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

Выявление информационных ресурсов в научных библиотеках и сети Internet по проблемам строения и реакционной способности органических соединений с акцентом на вещества, перспективные для области лекарственных средств, по следующим направлениям:

- библиография;
- публикации (в том числе электронные);
- научно-исследовательская литература.

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

3.8 Контрольные работы – не предусмотрены.

3.9 Список вопросов для промежуточного контроля – не предусмотрен.

3.10 Тематика рефератов – не предусмотрена.

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

4 ОРГАНИЗАЦИЯ КОНТРОЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

4.1 Текущий контроль - в рамках собеседования по итогам выполнения лабораторных работ.

4.2 Промежуточный контроль – зачет по итогам собеседования по окончании освоения дисциплины.

4.3 Итоговый контроль – в рамках государственного экзамена.

5. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ КОНТРОЛЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

При промежуточном контроле применяется система «зачтено/не зачтено» с учетом критериев, представленных в табл.:

Оценка	Критерии
Зачтено	Аспирант показал творческое отношение к обучению, в совершенстве или в достаточной степени овладел знаниями, показал все (как минимум основные) требуемые умения и навыки
Не зачтено	Аспирант не владеет основными умениями и навыками

Оценка уровня знаний при итоговом контроле осуществляется в соответствии с положением о Государственной итоговой аттестации.

6. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ

6.1 Основная литература

1. Хаускрофт К., Констэбл Э. Современный курс общей химии. Т1. М.: Мир, 2002, 540 с.
2. Clayden J., Greeves N., Warren S, Wothers P. Organic chemistry. Oxford, New York: Oxford University Press, 2008, 1516 с.
3. Keeler J., Wothers P. Chemical structure and reactivity. An integrated approach. Oxford, New York: Oxford University Press, 2009, 926 с.
4. Burrows A., Holman J., Parsons A., Pilling G., Price G. Chemistry³. Introducing inorganic, organic and physical chemistry. Oxford University Press, 2009, 1396 с.
5. Ингольд К. Теоретические основы органической химии. М.: Мир, 1973.
6. Керри Ф., Сандберг Р. Углубленный курс органической химии: в 2 кн. М.: Химия, 1981.
7. Ли Дж. Именные реакции. Механизмы органических реакций / пер. с англ. В.М. Демьянович. М.: БИНОМ; Лаборатория знаний, 2009.

8. Марч Дж. Органическая химия: реакции, механизмы и структура: углубленный курс для ун-тов и хим. вузов: в 4 т. М.: Мир, 1987–1988.

9. *Общая органическая химия*: в 12 т. / под общ. ред. Д. Бартона, У.Д. Оллиса. М.: Химия, 1981–1988.

11. Реутов О.А., Курц А.Л., Бутин К.П. Органическая химия: в 4 ч. М.: Изд-во МГУ, 1999–2004.

12. Сайкс П. Механизмы реакций в органической химии. М.: Химия, 1977.

13. Физер Л., Физер М. Органическая химия: в 2 т. М.: Химия, 1969–1970.

6.2 Дополнительная литература

1. Агрономов А.Е. Избранные главы органической химии: учеб. пособие для вузов. 2-е изд., перераб. и доб. М.: Химия, 1990.

2. Агрономов А.Е. Сборник задач по органической химии: учеб. пособие. М.: Изд-во МГУ, 2000.

3. Беккер Г., Бергер В., Домике Г. Органикум: практикум по органической химии: в 2 т. М.: Мир, 1979.

4. Вацуро К.В., Мищенко Г.Л. Именные реакции в органической химии: справочник. М.: Химия, 1976.

5. Гордон А., Форд Р. Спутник химика. М.: Мир, 1976.

6.3 Методические материалы по дисциплине

1. Вишников А.А., Ятлук Ю.Г., Пестов А.В. Номенклатурные правила ациклических, ароматических, гетероциклических углеводородов и их производных. Екатеринбург: Изд-во Урал. ун-та, 2008. – 172 с.

2. Вишников А.А., Пестов А.В. Органическая химия. Основные понятия. Екатеринбург: Изд-во Урал. ун-та, 2012. – 188 с.

6.4 Программное обеспечение и интернет-ресурсы

Программное обеспечение

Программы пакета Microsoft Office;

Пакет программ для квантово-химических расчетов Orca 2.8.0

Визуализатор пространственной структуры и молекулярных орбиталей Chemcraft

Электронные образовательные ресурсы

Информационные сервисы: Sciencedirect, Elibrary, Chemtube3D.

Электронные ресурсы Центральной научной библиотеки (ЦНБ) УрО РАН (30 точек доступа) - <http://cnb.uran.ru/>

Механизмы органических реакций. www.chemtube3d.com

Периодическая таблица элементов. www.ptable.com

Интерактивное приложение к учебнику Keeler J., Wothers P. Chemical structure and reactivity. www.oup.com/uk/orc/bin/9780199289301/01student/weblinks/

Базы данных, информационно-справочные и поисковые системы

Химическая энциклопедия (*сайт www.ximuk.ru*)

<http://ru.wikipedia.org> – Именные реакции в органической химии

<http://en.wikibooks.org>

<http://www.alhimikov.net> – Электронный учебник по органической химии

<http://www.chemistry.ssu.samara.ru/chem4/link211.htm>

<http://stavrop.fcior.edu.ru/card/1339/laboratornaya-rabota-konstruirovanie-mehanizmov-himicheskix-reakciy-po-teme-kislorodosoderzhashie-or.html> - Федеральный центр образовательных ресурсов

<http://nehudlit.ru/books>.

7 МАТЕРИАЛЬНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ *(Современные приборы, установки (стенды), необходимость специализированных лабораторий и классов)*

Институт располагает:

- специально оборудованным помещением для проведения лекционных занятий;
- современным приборным парком для анализа состава и изучения структуры и свойств органических соединений, включая:

- ЯМР, хроматомасс-спектрометрию, ИК-, КР и УФ- спектроскопию
- высокоэффективную жидкостную и газо-жидкостную хроматографию
- рентгеноструктурный анализ
- поляриметрию
- автоматического СNH анализа
- проведения реакций при высоком давлении

и др.

Центр коллективного пользования «Спектроскопия и анализ органических соединений» института (ЦКП САОС)), имеет Аттестат признания компетентности испытательной лаборатории (центра) № 0011, рег. № РОСС RU.В503.04НЖ00.66.04.0009.

Группа элементного анализа ИОС УрО РАН признана компетентной в целях выполнения работ по сертификационным испытаниям в Системе добровольной сертификации нанопродукции. С 2009 г. группа входит в состав Испытательного центра веществ, материалов и продукции nanoиндустрии в УрФО.

В институте:

- создана локальная сеть, объединяющая 100 компьютеров, с выходом в Интернет;
- внедрена система корпоративной электронной почты на основе MS Exchange 2003, с возможностью удаленного доступа;
- предоставлены для пользования принтеры, сканеры и ксероксы, что способствует эффективной самостоятельной деятельности аспирантов при освоении дисциплины.

