

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

ОДОБРЕНО

Ученым советом
ИОС УрО РАН
«22» апреля 2015 г.
Протокол № 6

УТВЕРЖДАЮ

Директор ИОС УрО РАН
академик РАН _____ В.Н. Чарушин
«22» апреля 2015 г.
Приказ № _____

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Строение и реакционная способность органических соединений

Шифр и название направления подготовки **04.06.01 Химические науки**

Направленность **02.00.03 Органическая химия**

Квалификация: **«Исследователь. Преподаватель-исследователь»**

Форма обучения: **Очная (Заочная)**

Статус дисциплины:

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

Автор:

Старший научный сотрудник ИОС УрО РАН,
к.х.н., доцент

А.В. Пестов

Екатеринбург – 2015

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», утвержденной приказом Министерства образования и науки РФ № 274 от 08.10.2007 г., и учебным планом ИОС УрО РАН по основной образовательной программе аспирантской подготовки.

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 изучения дисциплины – формирование у аспирантов умения:

- работать на современной научной аппаратуре, применяемой при проведении химических экспериментов, аналитических и физико-химических исследований;
- изучать строение и свойства, проводить экспертную оценку органических материалов.

Задачи дисциплины – освоение современных представлений о взаимосвязи строения и реакционной способности органических соединений. Понимание роли молекулярных орбиталей, выработка навыков анализа локализации и энергии граничных молекулярных орбиталей, их превращений в ходе реакции является критичным для освоения курса. Это требует от аспиранта использование современной литературы, интерактивных электронных ресурсов, специализированного программного обеспечения. Умение объяснять химические превращения в рамках изменения электронного строения позволяет выбирать правильные и эффективные пути управления химическими процессами. Бурное развитие квантовой химии в последнее десятилетие позволило переосмыслить многие реакции органической химии и найти новые пути планирования химического синтеза. Аспирант должен уметь использовать эти подходы при изучении конкретных реакций, для чего ему требуется освоить спектральные методы для определения механизмов и кинетики реакций.

1.2 ТРЕБОВАНИЯ К УРОВНЮ ПОДГОТОВКИ АСПИРАНТА, ЗАВЕРШИВШЕГО ИЗУЧЕНИЕ ДАННОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Аспиранты, завершившие изучение данной дисциплины, должны:

знать:

- методы, способы и средства получения, хранения, переработки информации
- приборы, применяемые при изучении строения и свойств химических материалов
- приборы, применяемы при создании органических веществ
- методологию исследования новых органических материалов
- устройство и принцип действия современных физико-химических приборов
- источники химических, физических и физико-химических данных;

уметь:

- находить, анализировать и адаптировать описанные методики
- использовать нормы безопасности при проведении химических экспериментов
- работать на современной научной аппаратуре при проведении химических экспериментов
- применять основные законы различных разделов химии при проведении исследований
- регистрировать и обрабатывать изучения химических экспериментов

- применять законы химии при планировании, проведении исследования и обсуждении полученных результатов
- пользоваться современными физико-химическими приборами
- находить и корректно использовать химическую и физико-химическую информацию
- переводить физико-химическую информацию на современный профессиональный язык;

владеть:

- опытом поиска и анализа информации
- опытом работы с базами данных
- опытом работы на современной физико-химической аппаратуре
- опытом проведения исследований с учетом норм безопасности
- опытом обсуждения, полученных результатов
- опытом использования специальных программ для обработки результатов физико-химических экспериментов
- опытом подготовки отчетов и экспертных заключений.

1.3 СВЯЗЬ С ПРЕДШЕСТВУЮЩИМИ ДИСЦИПЛИНАМИ

Курс предполагает наличие у аспирантов знаний по органической химии 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) - 1 год аспирантуры; вид отчетности – экзамен кандидатского минимума.

Вид учебной работы	Объем часов / зачетных единиц
Трудоемкость изучения дисциплины	108 / 3
Обязательная аудиторная учебная нагрузка (всего)	54 / 1.5
в том числе:	
лекции	18 / 0.5
практические занятия	18 / 0.5
лабораторные работы	18 / 0.5
Самостоятельная работа аспиранта (всего)	54 / 1.5
в том числе:	
Подготовка к практическим занятиям	0
Подготовка реферата	0
Изучение тем, вынесенных на самостоятельную проработку	54 / 1.5

2.2 РАЗДЕЛЫ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ ЗАНЯТИЙ

№ п/п	Название раздела дисциплины	Объем часов / зачетных единиц			
		лекции	практические занятия	лабораторные работы	Самостоятельная работа
1	Применение метода молекулярных орбиталей для описания органических веществ	2 / 0.06	2 / 0.06	6 / 0.18	4 / 0.12
2	Мезомерный эффект	2 / 0.06	1 / 0.03	0	8 / 0.20
3	Ароматичность	2 / 0.06	1 / 0.03	0	5 / 0.15
4	Кислотность, основность.	2 / 0.06	4 / 0.12	6 / 0.18	6 / 0.18
5	Нуклеофильность Влияние пространственного строения на реакционную способность	2 / 0.06	1 / 0.03	0	7 / 0.17
6	Перициклические реакции	2 / 0.06	2 / 0.06	0	6 / 0.18
7	Равновесие и скорость реакции	2 / 0.06	4 / 0.12	0	8 / 0.20
8	Механизмы реакций	2 / 0.06	1 / 0.03	0	4 / 0.12
9	Катализ реакций между органическими веществами	2 / 0.06	2 / 0.06	6 / 0.18	6 / 0.18
	<i>Итого:</i>	18	18	18	54

2.3 ЛЕКЦИОННЫЙ КУРС

Тема 1. 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

Тема 2. Мезомерный эффект.

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

Тема 3. Ароматичность.

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

Тема 4. 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.

Тема 5. 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.

Тема 6. 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.

Тема 7. 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.

Тема 8. 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.

Тема 9. Катализ реакций между органическими веществами.

Общий кислотно-основный 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.

2.4 ПРАКТИЧЕСКИЕ (СЕМИНАРСКИЕ) ЗАНЯТИЯ

Раздел, тема дисциплины	Тема занятия	Объем учебного времени, час./ зачетные единицы
1. Применение метода молекулярных	Описание молекулярных орбиталей в органических	2 / 0.06

орбиталей для описания органических веществ.	веществах	
2. Мезомерный эффект.	Описание электронного строения органических молекул	1 / 0.03
3. Ароматичность.	Описание молекулярных орбиталей ароматических систем	1 / 0.03
4. Кислотность, основность. Нуклеофильность.	Зависимость величины pK_a от растворителя и строения органических соединений	4 / 0.12
5. Влияние пространственного строения на реакционную способность.	Конформационный анализ.	1 / 0.03
6. Перициклические реакции	Взаимодействие граничных орбиталей	2 / 0.06
7. Равновесие и скорость реакции.	Константа скорости реакции. Константа равновесия	4 / 0.12
8. Механизмы реакций	Влияние строения органического вещества на особенность реализации механизма	1 / 0.03
9. Катализ реакций между органическими веществами	Особенности координационного катализа	2 / 0.06
		18 / 0.5

2.5. ЛАБОРАТОРНЫЕ ЗАНЯТИЯ

Раздел, тема дисциплины	Наименование работы	Объем учебного времени, час. / зачетные единицы
1. Применение метода молекулярных орбиталей для описания органических веществ.	Описание молекулярных орбиталей в органических веществах с помощью спектроскопических методов	6 / 0.16
4. Кислотность, основность. Нуклеофильность.	Определение величины pK_a в воде и неводных растворителях	6 / 0.16
9. Катализ реакций между органическими веществами	Влияние природы металлоцентра на катализ реакции перэтерификации	6 / 0.16
		18 / 0.5

3 ОРГАНИЗАЦИЯ ТЕКУЩЕГО И ПРОМЕЖУТОЧНОГО КОНТРОЛЯ ЗНАНИЙ

3.1 КОНТРОЛЬНЫЕ РАБОТЫ – НЕ ПРЕДУСМОТРЕНЫ.

3.2 СПИСОК ВОПРОСОВ ДЛЯ ПРОМЕЖУТОЧНОГО ТЕСТИРОВАНИЯ – НЕ ПРЕДУСМОТРЕНЫ.

3.3 САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА

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

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

- библиография по проблемам строения и реакционной способности органических соединений;
- публикации (в том числе электронные) источников по проблемам строения и реакционной способности органических соединений;
- научно-исследовательская литература по актуальным проблемам строения и реакционной способности органических соединений;

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

3.3.1 ПОДДЕРЖКА САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ

Электронные образовательные ресурсы

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/

Программное обеспечение

Пакет программ для квантово-химических расчетов Orca 2.8.0

Визуализатор пространственной структуры и молекулярных орбиталей Chemcraft

1.6

Базы данных, информационно-справочные и поисковые системы

Химическая энциклопедия (*сайт www.xumuk.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-himicheskikh-reakcij-po-teme-kislorodosoderzhashie-or.html> - Федеральный центр образовательных ресурсов

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

3.3.2 ТЕМАТИКА РЕФЕРАТОВ – НЕ ПРЕДУСМОТРЕНЫ.

ИТОГОВЫЙ КОНТРОЛЬ - проводится в виде экзамена кандидатского минимума.

4 ТЕХНИЧЕСКИЕ СРЕДСТВА ОБУЧЕНИЯ И КОНТРОЛЯ, ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ЭВМ (Перечень обучающих, контролирующих и расчетных программ, диафильмов, слайдфильмов, кино- и телефильмов).

Программы пакета Microsoft Office;

Пакет программ для квантово-химических расчетов Orca 2.8.0;

Визуализатор пространственной структуры и молекулярных орбиталей Chemcraft;

Информационные сервисы: Sciencedirect, Elibrary, Chemtube3D.

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

5 АКТИВНЫЕ МЕТОДЫ ОБУЧЕНИЯ (ДЕЛОВЫЕ ИГРЫ, НАУЧНЫЕ ПРОЕКТЫ) - НЕ ПРЕДУСМОТРЕНЫ.

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

Институт располагает 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.

7 ЛИТЕРАТУРА

7.1 РЕКОМЕНДУЕМАЯ 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. *Кери 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.
10. *Органические растворители* / А. Вайсбергер, Э. Проскауэр, Дж. Риддик, Э. Тупс. М. : Изд-во иностр. лит., 1956.

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.

7.2. 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.

7.3 УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКИЕ МАТЕРИАЛЫ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

1. Вишников А. А., Ятлук Ю. Г., Пестов А. В. Номенклатурные правила ациклических, ароматических, гетероциклических углеводов 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.

ДОПОЛНЕНИЯ И ИЗМЕНЕНИЯ В РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЕ

за _____ / _____ учебный год

В рабочую программу курса ОД.А.05, «**Строение и реакционная способность органических соединений**», цикл ОД.А.00 «Обязательные дисциплины» основной образовательной программы подготовки аспиранта по специальности 02.00.03 – Органическая химия(отрасль - химические науки), вносятся следующие дополнения и изменения:

Номер изменения	Номера листов		Основание для внесения изменений	Подпись	Расшифровка подписи	Дата	Дата введения изменения
	замененных	новых					