



МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«ИРКУТСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
ФГБОУ ВО «ИГУ»
Химический факультет
Кафедра теоретической и прикладной органической химии и
полимеризационных процессов



УТВЕРЖДАЮ

декан, А.Г. Пройдаков

“04” августа 2018 г.

Рабочая программа дисциплины

Индекс дисциплины по УП: **Б1.В.ДВ.1.1**

Наименование дисциплины: **«Избранные главы теоретических основ органической химии»**

Направление подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре:
04.06.01 «Химические науки»

Направленность программы подготовки кадров высшей квалификации (программы аспирантуры): **Высокомолекулярные соединения**

Форма обучения: **очная**

Согласовано с УМК
химического факультета

Протокол № 5 от «04» августа 2018 г.

Председатель _____
Пройдаков А.Г.

Рекомендовано кафедрой теоретической и
прикладной органической химии и
полимеризационных процессов

Протокол № 4 от «06» марта 2018 г.

Зав. кафедрой _____
Эдельштейн О.А.

Иркутск 2018г.

Содержание

	стр.
1. Цели и задачи дисциплины.	3
2. Место дисциплины в структуре ООП.	3
3. Требования к результатам освоения дисциплины.	3
4. Объем дисциплины и виды учебной работы.	4
5. Содержание дисциплины.	4
5.1 Содержание разделов и тем дисциплины.	4
5.2 Разделы дисциплины и междисциплинарные связи с обеспечиваемыми (последующими) дисциплинами.	6
5.3. Разделы и темы дисциплин и виды занятий.	7
6. Перечень семинарских, практических занятий и лабораторных работ.	7
7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины:	8
а) федеральные законы и нормативные документы	8
б) основная литература;	8
в) дополнительная литература;	9
г) программное обеспечение;	9
д) базы данных, поисково-справочные и информационные системы	9
8. Материально-техническое обеспечение дисциплины.	10
9. Образовательные технологии.	10
10. Оценочные средства. (ОС).	10

1. Цели и задачи дисциплины:

Цель настоящей дисциплины для аспирантов - химиков – обобщение механизмов и закономерностей протекания химических реакций в органической химии на основе природы химической связи в органических молекулах.

В задачи данного курса входит:

- рассмотрение основных типов механизмов реакций для различных классов органических соединений;
- обобщение вопросов, связанных с оценкой реакционной способности различных органических соединений на основе электронных эффектов, кислотности и основности органических молекул, классификации органических реакций, типов реагентов, условий проведения реакций;
- получение фундаментальных представлений о возможности количественной оценки реакционной способности органических соединений, о регио- и стерео-направленности протекания реакций.

–

2. Место дисциплины в структуре ООП.

В учебном плане аспирантов 04.06.01 дисциплина «Избранные главы теоретических основ органической химии» относится к вариативной части профессионального цикла Б1.В.ДВ.1.1.

Данная дисциплина является составной частью подготовки высококвалифицированных аспирантов в области органической химии и физической органической химии. Для успешного овладения материалом курса необходимы знания всех основных курсов химических дисциплин, курс "Избранные главы теоретических основ органической химии" целесообразно считать обобщающим для аспирантов, специализирующихся в области органической химии.

Для освоения дисциплины "Теоретические основы органической химии" обучающиеся используют знания, умения, практические навыки, способы деятельности и установки, сформированные в ходе изучения предметов на предыдущем уровне образования (магистратура).

Освоение дисциплины "Избранные главы теоретических основ органической химии" является необходимой основой для последующего углублённого изучения дисциплин по учебному плану - курсов по выбору аспирантов, для выполнения диссертационной работы.

3. Требования к результатам освоения дисциплины.

3.1 Выпускник, освоивший программу аспирантуры, должен обладать следующими общекультурными компетенциями:

- ОПК-1 способностью самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий

3.2 Выпускник, освоивший программу аспирантуры, должен обладать следующими универсальными компетенциями:

- УК-3 готовностью участвовать в работе российских и международных исследовательских коллективов по решению научных и научно-образовательных задач.

3.3 Выпускник, освоивший программу аспирантуры, должен обладать следующими профессиональными компетенциями:

- ПК-1 уметь собирать и анализировать научную литературу с целью выбора направления исследования и самостоятельно составлять план исследования в рамках выбранного направления подготовки;

- ПК-2 самостоятельно определять перечень необходимых инструментальных методов исследования, используемых при выполнении диссертационной работы по выбранному направлению подготовки; современные способы обработки и интерпретации получаемых результатов; представлять возможности и ограничения методов;

- ПК-3 использовать современные специализированные вычислительные комплексы и базы данных при планировании химических исследований, для обработки и анализа

Государственному образовательному стандарту по направлению подготовки 04.06.01 «Химия» направленность «Органическая химия».

5.1.1. ВВЕДЕНИЕ.

Цели и задачи курса (УК-3, ОПК-1, ПК-1,2,3,4).

ХИМИЧЕСКИЕ СВЯЗИ В ОРГАНИЧЕСКИХ МОЛЕКУЛАХ.

Типы химических связей в органических молекулах. Природа химической связи. Характеристика ковалентных связей. Метод валентных схем (локализованных пар). Метод молекулярных орбиталей. Метод возмущенных молекулярных орбиталей и метод молекулярных орбиталей Хюккеля. Взаимное влияние атомов в органических соединениях. Полярность и поляризуемость связей. Индукционный эффект. Эффект сопряжения. Влияние структурных факторов на проявление эффекта сопряжения. Эффект сверхсопряжения (УК-3, ОПК-1, ПК-1,2,3,4).

5.1.2. КЛАССИФИКАЦИЯ ОРГАНИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ И РЕАГЕНТОВ.

Классификация химических реакций и типы реагентов. Представление о механизме органических реакций и методах его познания. Характеристика механизма элементарных реакций. Особенности переходного состояния (активированного комплекса). Постулат Хэммонда. Классификация реакций по типу разрыва ковалентной связи и по типу реагента. Нуклеофильные, электрофильные и радикальные реагенты. Способы их генерирования и их строение. Карбокатионы, карбанионы, свободные радикалы, ион-радикалы. Жесткие и мягкие реагенты. Амбидентные реагенты (УК-3, ОПК-1, ПК-1,2,3,4).

5.1.3. КИСЛОТНЫЕ И ОСНОВНЫЕ СВОЙСТВА ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ.

Характеристика кислотности и основности органических соединений. Кислотность и основность по Бренстеду и Льюису. Основность и нуклеофильность. Кислотность органических соединений, величина pK_a . Основные факторы, влияющие на кислотность. Кислотность некоторых классов органических соединений: незамещенные и замещенные алифатические кислоты, спирты и фенолы, ароматические кислоты. Проявление N-H, S-H и C-H – кислотности в органических соединениях.

Основность органических соединений. Способы выражения основности, pK_b . Алифатические и ароматические основания. Основные факторы, влияющие на их основность. Гетероциклические основания. Сопряженные кислоты и основания.

Принцип жестких и мягких кислот и оснований (ЖМКО). Метод молекулярных орбиталей и принцип ЖМКО.

Зависимость кислотности и основности от среды. Роль растворителей и их классификация. Изменение характера реакций в зависимости от среды (УК-3, ОПК-1, ПК-1,2,3,4).

5.1.4. КОЛИЧЕСТВЕННОЕ РАССМОТРЕНИЕ РЕАКЦИОННОЙ СПОСОБНОСТИ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ.

Элементы корреляционного анализа в органической химии. Факторы, определяющие равновесие и скорость реакции. Принцип линейности свободных энергий. Уравнение Гаммета. Константы заместителей. Принцип полилинейности. Возможность количественного учета индукционного, мезомерного и стерического эффектов заместителей. Модификации уравнения Гаммета. Множественность констант заместителей. Использование корреляционных уравнений для изучения механизмов реакций (ПК-1, ПК-3, ПК-4).

5.1.5. МЕХАНИЗМЫ ГЕТЕРОЛИТИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ В АРОМАТИЧЕСКОМ РЯДУ.

Механизмы некоторых реакций органических соединений. Механизм нуклеофильного замещения в алифатическом ряду. Характеристика механизма SN_2 . Влияние природы субстрата и нуклеофила, стерических факторов, растворителя на скорость этой реакции. Стереохимия замещения. Механизм SN_1 . Влияние различных факторов на скорость этих реакций, стереохимия реакции. Образование карбокатионов и их стабильность. Побочные реакции при замещении по механизмам SN_1 и SN_2 . Условия преимущественного протекания реакций по конкурентному механизму. Амбидентные реагенты в реакциях нуклеофильного замещения при насыщенном атоме углерода (зарядовый и орбитальный контроль, принцип ЖМКО при объяснении образования продуктов замещения этими реагентами).

Механизм реакций электрофильного присоединения к алкенам и алкинам. Свойства π -систем, как оснований. Механизм реакций присоединения, π - и σ - комплексы и их структура. Влияние замещающих групп на регионаправленность присоединения (правило Марковникова). Стереохимия присоединения. Особенности электрофильного присоединения к алкинам. Возможность нуклеофильного присоединения к кратным связям и механизм этих реакций. Реакции анелирования.

Механизм реакций отщепления (элиминирования). Механизмы E_1 , E_2 , E_{1cB} . Стереохимия реакций отщепления. Правило Зайцева и правило Гофмана.

Механизм реакций нуклеофильного присоединения и замещения в карбонильных соединениях. Кето-енольная таутомерия и С-Н кислотность. Влияние замещающих групп на перераспределение электронной плотности в карбонильных соединениях. Основность уходящих групп в реакциях замещения. Механизм реакций альдольной и кротоновой конденсации, сложноэфирной конденсации, конденсации карбонильных соединений с другими соединениями, проявляющими С-Н кислотность (ПК-1, ПК-3, ПК-4).

5.1.6 МЕХАНИЗМЫ ГЕТЕРОЛИТИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ В АЛИФАТИЧЕСКОМ РЯДУ.

Электронное строение бензола, ароматичность, неароматичность, антиароматичность. Правило Хюккеля применительно к указанным системам.

Небензоидные ароматические соединения. Метод молекулярных орбиталей Хюккеля. Механизм электрофильного замещения. Введение первого заместителя. Основные факторы, определяющие ориентацию замещения в производных ароматических соединений. Рассмотрение механизма ориентации в зависимости от электронной структуры ароматической системы в стационарном и переходном состояниях. Доказательства зависимости скорости электрофильного замещения от стабильности π -комплекса.

Нуклеофильное замещение в ароматических соединениях. Механизм присоединения-элиминирования (комплексы Мейзенгеймера) и элиминирования – присоединения. Влияние замещающих групп, природы ароматического соединения и нуклеофильного реагента.

Гетероциклические соединения. Особенности реакций электрофильного замещения в пятичленных гетероциклах. Ориентация замещения. Реакции нуклеофильного и электрофильного замещения в шестичленных гетероциклах. Ориентация реакций замещения (ПК-1, ПК-3, ПК-4).

5.1.7 МЕХАНИЗМЫ ГОМОЛИТИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ.

Свободные радикалы и гомолитические реакции. Общие способы получения свободных радикалов, виды гомолиза. Причины высокой энергии свободных радикалов, возможности снижения энергии и стабилизации свободных радикалов: влияние замещающих групп, изменение условий и др. Цепные реакции, Стереохимия свободных радикалов. Примеры гомолитических реакций и их механизм. Признаки протекания реакций по гомолитическому механизму. Гомолитическое замещение в алканах и ароматических соединениях. Радикальное присоединение к алкенам и алкинам. Механизмы этих реакций. Перегруппировки и реакции фрагментации свободных радикалов (ПК-1, ПК-3, ПК-4).

5.1.8 МЕХАНИЗМЫ СОГЛАСОВАННЫХ РЕАКЦИЙ.

Понятие о синхронных реакциях при термическом и фотохимическом возбуждении. Перициклические реакции. Орбитальный контроль реакции. Связь симметрии молекул и молекулярных орбиталей. Правило Вудворда-Хофмана. Реакции циклоприсоединения и циклоэлиминирования. Механизм реакции Дильса – Альдера (ПК-1, ПК-3, ПК-4).

5.2 Разделы дисциплины и междисциплинарные связи с обеспечиваемыми (последующими) дисциплинами

Дисциплина является основой для выполнения квалификационных работ аспирантов, необходима в будущей практической деятельности.

5.3 Распределение часов по темам и видам работ

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетных ед., 108 час.

№	Тема, раздел	Всего часов	Аудиторные занятия			Самостоятельная работа студентов		
			лекции	семина.	лабор.	СРС	КСР	Вид КСР
2	Химические связи в органических молекулах	6	2			4		
3	Классификация органических реакций и реагентов	14	2	4		8		
4	Кислотные и основные свойства органических соединений	14	2	4		8		
5	Количественное рассмотрение реакционной способности органических соединений	16	4	4		8		
6	Механизмы гетеролитических реакций в алифатическом ряду	16	4	4		8		
7	Механизмы гетеролитических реакций в ароматическом ряду	16	4	4		8		
8	Механизмы гомолитических реакций	16	4	4		8		
9	Механизмы согласованных реакций	12	2	2		8		
10	Зачет с оценкой							
	Всего часов	108	24	24		60		

6. Перечень семинарских занятий

№ п/п	№ темы дисциплины	Наименование семинара	Трудоемкость (часы)	Оценочные средства	Формируемые компетенции
1.	5.1.1	Типы химических связей, теория строения химических молекул.	2	тесты	ОПК-1, ПК-1,2, 3,4

2.	5.1.2	Классификация химических реакций. Типы реагентов.	2	тесты	ПК-1,3,4
3.	5.1.3	Кислотность и основность органических соединений. Электронные эффекты в органических молекулах.	2	тестов, ситуационных задач, деловых и ролевых игр, диспутов, тренингов	ПК-1,3,4
4.	5.1.4	Факторы, определяющие реакционную способность органических соединений.	1	Устное собеседование	ПК-1,3,4
		Количественная оценка реакционной способности органических соединений.	1		
		Корреляционный анализ в органической химии.	1	тренинг	
		Кинетический и термодинамический контроль реакций.	1		
5.	5.1.5	Механизм реакций нуклеофильного замещения при насыщенном атоме углерода.	2	тесты	ПК-1,3,4
6.		Механизм реакций электрофильного присоединения к кратным С - С – связям. Механизм реакций нуклеофильного присоединения к кратным С - С – связям.	2	Ситуационные задачи, тесты	ПК-1,3,4 УК-3
7.		Ароматичность органических соединений. Реакционная способность и механизмы реакций ароматических соединений.	2	Устное собеседование, тесты	ПК-1,3,4 УК-3
8.	5.1.6	Гетероциклические ароматические соединения.	2	Устное собеседование	ПК-1,3,4
9.		Реакции соединений, содержащих карбонильную группу. Реакционная способность карбоновых кислот и их производных.	2	Ситуационные задачи	ПК-1,3,4 УК-3
10.	5.1.7	Свободные радикалы и механизмы гомолитических реакций.	2	тест	ПК-1,3,4
11.	5.1.8	Синхронные реакции (термо- и фотохимические реакции).	2	диспут	ПК-1,3,4 УК-3

7. Учебно-методическое и информационное обеспечение курса

а) федеральных законов и нормативных документов – нет

б). Основная литература

1. **Реутов О. А.** Органическая химия [Электронный ресурс] : учеб. для студ. вузов, обуч. по направл. и спец. "Химия" : в 4 ч. / О. А. Реутов. - 4-е изд. - ЭВК. - М. : Бином. Лаборатория знаний, 2012 - . - (Классический университетский учебник). - Режим доступа: ЭЧЗ "Библиотех". - Неогранич. доступ. **Ч. 1. - ISBN 978-5-94774-611-2**

2. **Реутов О. А.** Органическая химия [Электронный ресурс] : учеб. для студ. вузов, обуч. по направл. и спец. "Химия" : в 4 ч. / О. А. Реутов. - 4-е изд. - ЭВК. - М. : Бином. Лаборатория знаний, 2012 - . - (Классический университетский учебник). - Режим доступа: ЭЧЗ "Библиотех". - Неогранич. доступ. - ISBN 978-5-94774-611-**Ч. 2.** - 2012. - ISBN 978-5-9963-0809-5 :
3. **Реутов О. А.** Органическая химия [Электронный ресурс] : учеб. для студ. вузов, обуч. по направл. и спец. "Химия" : в 4 ч. / О. А. Реутов. - 3-е изд. - ЭВК. - М. : Бином. Лаборатория знаний, 2012 - . - (Классический университетский учебник). - Режим доступа: ЭЧЗ "Библиотех". - Неогранич. доступ. - ISBN 978-5-94774-611-**Ч. 3.** - 2012. - ISBN 978-5-9963-1099-9 :
4. **Реутов О. А.** Органическая химия [Электронный ресурс] : учеб. для студ. вузов, обуч. по направл. и спец. "Химия" : в 4 ч. / О. А. Реутов. - 2-е изд. - ЭВК. - М. : Бином. Лаборатория знаний, 2012 - . - (Классический университетский учебник). - Режим доступа: ЭЧЗ "Библиотех". - Неогранич. доступ. - ISBN 978-5-94774-611-**Ч. 4.** - 2013. - ISBN 978-5-9963-2276-3 :
5. **Травень Ф. В.** Органическая химия. Т. 1 [Электронный ресурс] / Ф. В. Травень. - 4-е изд. - Москва : Бином. Лаборатория знаний, 2015. - 401 с. - (Учебник для высшей школы). - **Режим доступа:** http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=84108. - Режим доступа: ЭБС "Издательство "Лань". - Неогранич. доступ. - ISBN 978-5-9963-2939-7 :
6. **Травень Ф. В.** Органическая химия. Т. 2 [Электронный ресурс] / Ф. В. Травень. - 4-е изд. - Москва : Бином. Лаборатория знаний, 2015. - 550 с. - (Учебник для высшей школы). - **Режим доступа:** https://e.lanbook.com/book/84109#book_name. - Режим доступа: ЭБС "Издательство "Лань". - Неогранич. доступ. - ISBN 978-5-9963-2940-3
7. **Травень Ф. В.** Органическая химия. Т. 3 [Электронный ресурс] / Ф. В. Травень. - 4-е изд. - Москва : Бином. Лаборатория знаний, 2015. - 391 с. - (Учебник для высшей школы). - **Режим доступа:** https://e.lanbook.com/book/84110#book_name. - Режим доступа: ЭБС "Издательство "Лань". - Неогранич. доступ. - ISBN 978-5-9963-2941-0
8. **Финкельштейн Б. Л.** Органическая химия [Текст] : в 2 ч. / Б. Л. Финкельштейн, О. А. Эдельштейн, А. Г. Пройдаков ; рец.: А. В. Иванов, Д. Ф. Кушнарев ; Иркутский гос. ун-т, Хим. фак. - Иркутск : Изд-во ИГУ, 2013 - . - 20 см. - ISBN 978-5-9624-0809-5. **Ч. 1.** - 2013. - 147 с. - ISBN 978-5-9624-0810-1 : - 51 экз.
9. **Органическая химия** [Текст] : учеб. пособие : в 2 ч. / О. А. Эдельштейн [и др.] ; рец.: А. В. Иванов, А. В. Рохин ; Иркут. гос. ун-т, Хим. фак. - Иркутск : Изд-во ИГУ. - 21 см. - ISBN 978-5-9624-0809-5. **Ч. 2** : Нуклеофильные реакции в органической химии. - 2014. - 95 с. : ил. - Библиогр.: с. 95. - ISBN 978-5-9624-1144-6 : 36 экз.

в) Дополнительная литература.

1. **Задачи по органической химии с решениями** [Текст] : учеб. пособие для студ. вузов, обуч. по спец. 01100- Химия / А. Л. Курц, М. В. Ливанцов, А. В. Чепраков и др. - М. : Бином. Лаборатория знаний, 2004. - 263 с. ; 22 см. - ISBN 5-94774-053-2 : 9 экз.
2. **Неконденсированные вицинальные триазолы** [Текст] : справ. пособие / Иркут. гос. ун-т ; сост. Т. В. Голобокова [и др.] ; рец.: А. Ф. Шмидт, Г. А. Гареев. - Иркутск : Изд-во ИГУ, 2012. - 133 с. ; 21 см. - Библиогр.: с. 133. - ISBN 978-5-9624-0666-4 : 11 экз.

г) программное обеспечение:

Интернет источниками по данной дисциплине являются:

- <http://www.chem.msu.ru/rus/weldept.html#lib> (Библиотека Химического факультета МГУ им. Ломоносова)
- <http://www.gpntb.ru/> (Государственная публичная научно-техническая библиотека)
- www.scirus.com – поиск научной информации по журналам и web
- www.elibrary.ru – научная электронная библиотека РФФИ

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины:

Мультимедийный аппарат, компьютеры.

Курс теоретический, использование реактивов и др. материалов не предусмотрено.

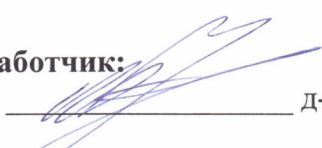
9. Образовательные технологии:

В процессе изучения дисциплины используются как традиционные, так и инновационные технологии, активные и интерактивные методы и формы обучения: технология объяснительно-иллюстративного объяснений с элементами проблемного изложения, технология профессионально-ориентированного обучения, лекции, объяснительно-иллюстративный метод с элементами проблемного изложения, контрольные, разбор конкретных ситуаций, решение ситуационных задач.

10. Оценочные средства:

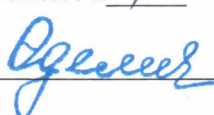
Оценочные средства текущего контроля (могут быть в виде тестов, ситуационных задач, устного собеседования, диспутов, тренингов и др.) Назначение оценочных средств ТК - выявить сформированность компетенций ПК-1, ПК-2, ПК-3, ПК-4, УК-3, ОПК-1.

Разработчик:

 д-р хим. наук, профессор Пройдаков А.Г.

Программа рассмотрена на заседании кафедры теоретической и прикладной органической химии и полимеризационных процессов химического факультета

«06» ~~сентября~~ 2018 г. Протокол № 4

Зав. кафедрой, доцент  Эдельштейн О.А.

Настоящая программа не может быть воспроизведена ни в какой форме без предварительного письменного разрешения факультета-разработчика программы.

**Лист согласования, дополнений и изменений
на 2019/2020 учебный год**

К рабочей программе **Б1.В.ДВ.1.1** дисциплины (модуля): **«Избранные главы теоретических основ органической химии»** по направленности программы подготовки кадров высшей квалификации (программы аспирантуры)
Высокомолекулярные соединения

В рабочую программу дисциплины вносятся следующие дополнения:

Нет дополнений

В рабочую программу дисциплины вносятся следующие изменения:

Нет изменений

Изменения одобрены Ученым советом химического факультета,
протокол № 5 от 17.06.2019 г.

Зав. кафедрой теоретической и
прикладной органической
химии и полимеризационных
процессов

/О.А.Эдельштейн /