

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ (НИ ТГУ)

Химический факультет

УТВЕРЖДЕНО:
И.о. декана
А. С. Князев

Рабочая программа дисциплины

Теоретические основы органической химии

по специальности

04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

Специализация:

Фундаментальная и прикладная химия

Форма обучения

Очная

Квалификация

Химик / Химик-специалист. Преподаватель химии

Год приема

2024

СОГЛАСОВАНО:
Руководитель ОП
В.В. Шелковников

Председатель УМК
В.В. Шелковников

Томск – 2024

1. Цель и планируемые результаты освоения дисциплины

Целью освоения дисциплины является формирование следующих компетенций:

ОПК-1. Способен анализировать и интерпретировать результаты химических экспериментов, наблюдений и измерений в различных областях химии;

ОПК-2. Способен проводить синтез, анализ, изучение структуры и свойств веществ и материалов, исследовать процессы с их участием;

ПК-1. Способен планировать работу и выбирать адекватные методы решения научно-исследовательских задач в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках.

Результатами освоения дисциплины являются следующие индикаторы достижения компетенций:

РООПК 1.1 Знает теоретические основы неорганической, органической, физической и аналитической химии, применяет их при решении профессиональных задач в других областях химии.

РООПК 1.2 Умеет систематизировать и интерпретировать результаты экспериментов и расчетно-теоретических работ с использованием теоретических основ традиционных и новых разделов химии

РООПК 1.3 Умеет грамотно формулировать заключения и выводы по результатам работы

РООПК 2.1 Знает стандартные приемы и операции, используемые при получении веществ неорганической и органической природы

РООПК 2.2 Знает теоретические основы методов изучения состава, структуры и свойств для грамотного выбора метода исследования

РОПК 1.1 Умеет разрабатывать стратегию научных исследований, составляет общий план и детальные планы отдельных стадий.

РОПК 1.2 Умеет выбирать экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи, используя достижения современной химической науки, и исходя из имеющихся, материальных, информационных и временных ресурсов.

2. Задачи освоения дисциплины

– Научиться оценивать влияние различных факторов (природа реагентов, природа растворителя, катализатор, температура и др.) на скорость, селективность и направление конкурирующих реакций в органической химии, сопоставлять общие и специфические особенности химического поведения органических молекул;

– Научиться применять теории строения и реакционной способности органических соединений и современные подходы к рассмотрению химических реакций (теория молекулярных орбиталей, теория переходного состояния) для объяснения закономерностей протекания химических реакций в органической химии.

– Предлагать логически обоснованный механизм химической реакции, а также способы его подтверждения.

– Научиться применять понятийный аппарат квантовой, физической, органической химии для решения практических задач профессиональной деятельности.

3. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина относится к Блоку 1 «Дисциплины (модули)».

Дисциплина относится к части образовательной программы, формируемой участниками образовательных отношений, предлагается обучающимся на выбор. Дисциплина входит в модуль Модуль Органическая химия.

4. Семестр(ы) освоения и форма(ы) промежуточной аттестации по дисциплине

Восьмой семестр, зачет с оценкой

5. Входные требования для освоения дисциплины

Для успешного освоения дисциплины требуются результаты обучения по следующим дисциплинам: «неорганическая химия», «физическая химия», «органическая химия», «строение вещества», где приобретают необходимые профессиональные компетенции по атомно-молекулярной теории строения соединений, образования химических связей, их энергетике, а также принципам физико-химических методов исследования органических веществ. До изучения дисциплины «Теоретические основы органической химии» студенты должны знать механизмы органических реакций, уметь определять реакционную способность органических соединений, видеть связь и различие между классами органических соединений.

6. Язык реализации

Русский

7. Объем дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 з.е., 144 часов, из которых:

-лекции: 32 ч.

-практические занятия: 32 ч.

в том числе практическая подготовка: 32 ч.

Объем самостоятельной работы студента определен учебным планом.

8. Содержание дисциплины, структурированное по темам

Раздел 1. Методы исследования механизмов органических реакций

Тема 1. Общие представления о механизмах органических реакций

Стадии изучения механизма реакций. Эффекты заместителей в органических соединениях. Кинетический изотопный эффект.

Тема 2. Представления о взаимном влиянии атомов в молекулах

Полярность ковалентных связей. Поляризуемость ковалентных связей. Индукционный механизм передачи влияния заместителей. Эффект поля. Количественная оценка индукционного влияния заместителей. Уравнение Тафта. Сопряженный механизм передачи влияния заместителей. Качественная оценка силы и направления мезомерных эффектов $\pm M$ -заместителей. Количественная оценка электронного влияния заместителей по эффекту сопряжения. Уравнение Гаммета. Термодинамический анализ уравнения Гаммета. Изоэнтальпийная, изоэнтропийная серии. Эффекты сверхсопряжения и обратного сверхсопряжения.

Раздел 2. Реакционноспособные интермедиаты в органических реакциях

Тема 3. Свободные радикалы

Алкильные радикалы; строение и основные способы генерирования. Термодинамическая и кинетическая устойчивость радикалов. Обнаружение и установление строения свободных радикалов. Спин-ловушки. Методы изучения радикалов, использование явления ХПЯ для выявления радикальных стадий химических реакций. σ - и π - Радикалы. Основные радикал-радикальные реакции: рекомбинация, диспропорционирование. Окисление и восстановление свободных радикалов. Стабильные радикалы.

Тема 4. Карбены и нитрены

Способы генерирования и реакции с участием карбенов. Основные методы изучения строения карбенов. Влияние заместителей на относительную устойчивость алкилкарбенов.

Строение метилена и диформетилена. Спектроскопия матричной изоляции. Нитрены и ионы нитрения. Примеры реакций с их участием.

Тема 5. Карбокатионы и частицы с электронодефицитными атомами азота и кислорода

Карбониевые и карбениевые ионы. Генерация *трет*-бутильного катиона в суперкислых средах. Строение катионов CH_3^+ и CH_5^+ . Основные типы карбокатионов (алкильные, бензильные, енильные, арениевые, ароматические, с гетероатомами у карбониевого центра, винильные и др.) и механизмы их стабилизации. Катион тропилия и его свойства. Шкала стабильности карбениевых ионов pK_{R^+} . Неклассические карбокатионы.

Тема 6. Карбанионы

Свободные карбанионы в газовой фазе. Получение карбанионов в растворах в суперосновных средах. Факторы, влияющие на стабильность карбанионов. Роль среды и противоиона. Контактные и сольватно-разделенные ионные пары. $\text{C}\equiv\text{N}$ -Кислоты. Кинетическая и термодинамическая кислотность.

Тема 7. Катион- и анион-радикалы

Методы их генерирования в растворах. Реакции с участием ион-радикалов. Основные методы получения информации о структуре и электронном строении ион-радикалов. Типы ион-радикалов. Теория КПЗ. SET-Механизм в органических реакциях и его обнаружение методом ХПЯ. Примеры таких реакций. Одноэлектронный сдвиг. Стабильные ион-радикалы.

Тема 8. Редкие интермедиаты. Напряженные углеводороды

Раздел 3. Согласованные реакции и роль орбитальной симметрии в реакциях согласованного типа

Тема 9. Теория перциклических реакций

Классификация перциклических реакций по Вудворду-Хоффману. Молекулярно-орбитальная теория перциклических реакций. Перциклические орбитали; супраповерхностные и антароповерхностные взаимодействия. Хюккелевская и мёбиусовская топология переходного состояния. Разрешённые и запрещённые реакции. Сохранение орбитальной симметрии. Правила Вудворда-Хоффмана.

Тема 10. Циклоприсоединение

Применение метода ВМО к анализу этих реакций. Метод граничных орбиталей, корреляционных диаграмм и ароматического переходного состояния. Классификация реакций циклоприсоединения по числу электронов, типу орбиталей и геометрии перекрывания.

Тема 11. Электроциклические реакции. Сигматропные перегруппировки

Механизм. Конротаторные и дисротаторные процессы. Правила Вудворда-Хоффмана для электроциклических реакций. Порядок сигматропного сдвига. Примеры сигматропных сдвигов. Перегруппировки Вагнера-Меервейна, пинаколиновая и др.

9. Текущий контроль по дисциплине

Текущий контроль по дисциплине проводится путем контроля посещаемости, тестов по лекционному материалу, индивидуальных заданий (докладов), выполнения домашних заданий и фиксируется в форме контрольной точки не менее одного раза в семестр.

Оценочные материалы текущего контроля размещены на сайте ТГУ в разделе «Информация об образовательной программе» - <https://www.tsu.ru/sveden/education/eduop/>.

10. Порядок проведения и критерии оценивания промежуточной аттестации

Зачет с оценкой в восьмом семестре проводится в письменной форме по билетам. Экзаменационный билет состоит из трех частей. Продолжительность зачета с оценкой 1 час.

Оценочные материалы для проведения промежуточной аттестации размещены на сайте ТГУ в разделе «Информация об образовательной программе» - <https://www.tsu.ru/sveden/education/eduop/>.

11. Учебно-методическое обеспечение

- а) Электронный учебный курс по дисциплине в среде электронного обучения iDO - <https://lms.tsu.ru/enrol/index.php?id=23453>
- б) Оценочные материалы текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине.
- в) План практических занятий по дисциплине.
- г) Методические указания по организации самостоятельной работы студентов.

12. Перечень учебной литературы и ресурсов сети Интернет

- а) основная литература:
 - Реутов О.А., Курц А.Л., Бутин К.П. Органическая химия. М.: Изд. Бинум, 2012. – Т. 1–4.
 - Днепровский А. С. Теоретические основы органической химии: Строение, реакционная способность и механизмы реакций органических соединений: Учебник для вузов / А. С. Днепровский, Т. И. Темникова. – 2-е изд., перераб.. – Л.: Химия, Ленинградское отделение, 1991. – 560 с.
 - Ингольд К. К. Теоретические основы органической химии / К. Ингольд; Пер. с англ. К. П. Путина; Под ред. И. П. Белецкой. – М.: Мир, 1973. – 1055 с.
 - Терней А. Л. Современная органическая химия: В 2 т. / Пер. с англ. Е.И. Карпейской, М.И. Верховцевой; Под ред. Н. Н. Суворова. – М.: Мир, 1981.
- б) дополнительная литература:
 - Кери Ф. Углубленный курс органической химии: В 2 кн. Кн. 1 / Ф. Кери, Р. Сандберг; Пер. с англ. Г. В. Гришиной и др.; Под ред. В. М. Потапова. – М.: Химия, 1981. – 519 с. – URL: <http://sun.tsu.ru/limit/2016/000049573/000049573.djvu>
 - Кери Ф. Углубленный курс органической химии: В 2 кн.. Кн. 2 / Ф. Кери, Р. Сандберг; Пер. с англ. Г. В. Гришиной и др. ; Под ред. В. М. Потапова. – М.: Химия, 1981. – 454 с. – URL: <http://sun.tsu.ru/limit/2016/000049522/000049522.djvu>
 - Сайкс П. Механизмы реакций в органической химии / П. Сайкс; Пер. с англ. Н. Г. Луценко; Под ред. В. Ф. Травеня. – 4-е изд. – М. : Химия, 1991. – 448 с.
 - Теоретические основы органической химии: учебное пособие. Вып. 1А / [сост.] Прялкин Б. С. ; Нац. исслед. Том. гос. ун-т, Каф. органической химии. – Томск: 2013. – 34 с.
 - Химия гиперкоординированного атома углерода // Дж. Ола, Г. К. Пракаш, Р. Е. Уильямс, Л. Д. Филд, К. Уэйд – М.: Мир, 1990.
 - Лен Ж.-М. Супрамолекулярная химия. Концепции и перспективы. – Новосибирск: Наука СО РАН, 1998. – 334 с.
 - Джилкрист Т., Сторр. Р. Органические реакции и орбитальная симметрия. – М.: Мир, 1976.

– Глоссарий терминов, используемых в теоретической органической химии. // Ж. органич. химии. 2001. – Т. 37. – вып. 1. – С. 156–160; вып. 2. – С. 310–313; вып. 3. – С. 476–480; вып. 4. – С. 637–640; вып. 5. – С. 794–800; вып. 6. С. 948–952; вып. 7. С. 1105–1112.

в) ресурсы сети Интернет:

– ScienceDirect [Electronic resource] / Elsevier B.V. – Electronic data. – Amsterdam, Netherlands, 2016. – URL: <http://www.sciencedirect.com/>

– Oxford University Press [Electronic resource]: journals / Oxford University Press (OUP), University of Oxford. – Electronic data. – Oxford, United Kingdom, 2015. – URL: <http://www.oxfordjournals.org/en/>

– Таблицы значений рКа – <https://organicchemistrydata.org/hansreich/resources/pka/>

13. Перечень информационных технологий

а) лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение:

– Microsoft Office Standart 2013 Russian: пакет программ. Включает приложения: MS Office Word, MS Office Excel, MS Office PowerPoint, MS Office On-eNote, MS Office Publisher, MS Outlook, MS Office Web Apps (Word Excel MS PowerPoint Outlook);

– публично доступные облачные технологии (Google Docs, Яндекс диск и т.п.).

б) информационные справочные системы:

– Электронный каталог Научной библиотеки ТГУ – <http://chamo.lib.tsu.ru/search/query?locale=ru&theme=system>

– Электронная библиотека (репозиторий) ТГУ – <http://vital.lib.tsu.ru/vital/access/manager/Index>

– ЭБС Консультант студента – <http://www.studentlibrary.ru/>

– ЭБС ZNANIUM.com – <https://znanium.com/>

14. Материально-техническое обеспечение

Аудитории для проведения занятий лекционного типа.

Аудитории для проведения занятий семинарского типа, индивидуальных и групповых консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации.

Помещения для самостоятельной работы, оснащенные компьютерной техникой и доступом к сети Интернет, в электронную информационно-образовательную среду и к информационным справочным системам.

Специализированная лаборатории по хроматографии, оснащенная газовыми хроматографами «Хром-5», «Agilent 6890N».

Аудитории для проведения занятий лекционного и семинарского типа индивидуальных и групповых консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации в смешанном формате («Актру»).

15. Информация о разработчиках

Бугаева Александра Игоревна, канд. хим. наук, кафедра органической химии Национального исследовательского Томского государственного университета, доцент.