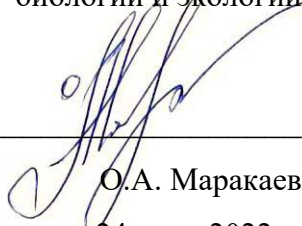


МИНОБРНАУКИ РОССИИ
Федеральное государственное бюджетное образовательное
учреждение высшего образования
«Ярославский государственный университет им. П.Г. Демидова»

Институт фундаментальной и прикладной химии

УТВЕРЖДАЮ
Декан факультета
биологии и экологии



О.А. Маракаев
«24» мая 2022 г.

Рабочая программа дисциплины

«Специальная дисциплина в соответствии с темой диссертации на соискание ученой степени кандидата наук по научной специальности 1.4.3 Органическая химия»

программы подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре

Форма обучения очная

Программа одобрена на заседании института
фундаментальной и прикладной химии
от «14» апреля 2022 года, протокол № 8

Ярославль

1. Цели освоения дисциплины

Целью освоения дисциплины является

- знание основных законов и объектов современной органической химии;
- представление о современных синтетических методах и способов установления структуры;
- представления об основных механизмах органических реакций.

2. Место дисциплины в структуре программы аспирантуры

Данная дисциплина относится к разделу обязательные дисциплины (2.1.3) и направлена на подготовку к сдаче кандидатского экзамена по специальной дисциплине в соответствии с темой диссертации на соискание ученой степени кандидата наук по научной специальности 1.4.3 Органическая химия.

3. Планируемые результаты освоения дисциплины:

В результате освоения дисциплины аспирант должен:

Знать:

основные теоретические положения современной органической химии.

Уметь:

- осуществлять синтез заданных структур;
- анализировать структуры органических соединений;
- управлять органическим синтезом на основе знаний о механизмах реакций.

Владеть:

- методами синтеза и анализа органических структур.

4. Объем, структура и содержание дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 8 зачетных единиц, 288 акад. часов

Дисциплина изучается в течение четырех семестров.

№ п/п	Темы (разделы) дисциплины, их содержание	Семестр	Виды учебных занятий и их трудоемкость (в академических часах)					Формы текущего контроля успеваемости
			лекции	практические	лабораторные	консультации	самостоятельная работа	Форма промежуточной аттестации (по семестрам)
1.	Современные проблемы органической химии..	2	2			1	33	
2.	Основы современной теории строения органических структур.	2	2			1	33	
								Зачет
	Всего за семестр	2	4			2	66	
3	Механизмы органических реакций	3	2				34	

4	Интермедиаты и переходные состояния в органических реакциях	3	2				34	
								Зачет
	Всего за семестр	3	4				68	
5	Установление структуры органических соединений	4	2			1	34	
6	Методы контроля протекания органических реакций	4	2			1	34	
								Зачет
	Всего за семестр	4	4				68	
7	Реакционная способность органических соединений. Методы установления механизмов органических реакций	5	2			1	15	
8	Современные синтетические методы	5	2			1	15	
							36	Экзамен
	Всего за семестр	5	4			2	66	
	Всего		16			4	268	

Содержание разделов дисциплины:

Тема 1. Современные проблемы органической химии. Физический фундамент химии. Объекты и структура органической химии сегодня. Новые химические структуры и материалы. Методы и тенденции развития органической химии.

Тема 2. Основы современной теории химического строения. Уравнение Шредингера для атомов и молекул. Электронные, колебательные и вращательные состояния молекул. Поверхность потенциальной энергии. Представление молекулярных орбиталей (МО) в виде линейной комбинации атомных орбиталей (ЛКАО). Связи в органических соединениях. Электронные эффекты заместителей. Межмолекулярное взаимодействие и его описание в квантовой химии. Прикладные программы квантово-химического моделирования.

Тема 3. Механизмы органических реакций. Формирование связей в органических структурах. Свободнорадикальные реакции, особенности их протекания. Ионные реакции, их закономерности. Факторы управления процессами.

Тема 4. Интермедиаты и переходные состояния в органических реакциях. Карбокатионы. Карбанионы. Карбанионы. Ион-радикалы. Карбены. Переходные состояния, их характеристики. Поиск структуры переходных состояний.

Тема 5. Установление структуры органических соединений. Общая схема исследования структуры органических объектов. Атомная эмиссионная спектроскопия. Электронная

спектроскопия. Методы колебательной спектроскопии. Спектроскопия ядерного магнитного резонанса. Метод электронного парамагнитного резонанса. Метод масс-спектрометрии.

Тема 6. Методы контроля протекания органических реакций. Хроматографические методы. Электрохимические методы. Спектральные методы. Обработка результатов анализа.

Тема 7. Теория реакционной способности органических соединений. Связь структура – свойства. Методология QSAR. Индексы реакционной способности: индексы свободной валентности, заряды на атомах, индексы Фукуи, энергии катионной, анионной и радикальной локализации. Кислоты и основания в органической химии. Методы установления механизмов органических реакций. Общая схема изучения механизмов органических реакций. Эксперимент и компьютерное моделирование при установлении механизмов.

Тема 8. Современные синтетические методы. Планирование синтеза. Информационная поддержка синтетических исследований. Синтетический анализ в планировании органического синтеза. Ретросинтетический анализ. Активация реакционных центров. Нетрадиционные способы активации. Защитные группы в синтезе. Ассиметрический синтез. Комбинаторный синтез.

5. Образовательные технологии, в том числе технологии электронного обучения и дистанционные образовательные технологии, используемые при осуществлении образовательного процесса по дисциплине

В процессе обучения используются следующие образовательные технологии:

Вводная лекция – дает первое целостное представление о дисциплине и ориентирует студента в системе изучения данной дисциплины. Дается краткий обзор курса, история развития науки и практики, достижения в этой сфере, имена известных ученых, излагаются перспективные направления исследований. На этой лекции высказываются методические и организационные особенности работы в рамках данной дисциплины, а также дается анализ рекомендуемой литературы.

Академическая лекция с элементами лекции-беседы – последовательное изложение материала, осуществляемое преимущественно в виде монолога преподавателя. Элементы лекции-беседы обеспечивают контакт преподавателя с аудиторией, что позволяет привлекать внимание аспирантов к наиболее важным темам дисциплины, активно вовлекать их в учебный процесс, контролировать темп изложения учебного материала в зависимости от уровня его восприятия.

Проблемная лекция – изложение материала, предполагающее постановку проблемных и дискуссионных вопросов, освещение различных научных подходов, связанные с различными моделями интерпретации изучаемого материала. Проблемная лекция начинается с вопросов, с постановки проблемы, которую в ходе изложения материала необходимо решить. В лекции сочетаются проблемные и информационные начала. При этом процесс познания аспирантом в сотрудничестве и диалоге с преподавателем приближается к поисковой, исследовательской деятельности.

Консультации – вид учебных занятий, являющийся одной из форм контроля самостоятельной работы аспирантов. На консультациях по просьбе аспирантов рассматриваются наиболее сложные разделы дисциплины, преподаватель отвечает на вопросы аспирантов, которые возникают у них в процессе самостоятельной работы.

В процессе обучения используются следующие технологии электронного обучения и дистанционные образовательные технологии:

Электронный учебный курс «Органическая химия» в LMS Электронный университет Moodle ЯрГУ, в котором:

- представлены задания для самостоятельной работы аспирантов по темам дисциплины;
- представлен список литературы, рекомендуемой для освоения дисциплины;
- представлена информация о форме и времени проведения консультаций по дисциплине в случае их проведения в дистанционном формате в режиме онлайн.

6. Перечень основной и дополнительной литературы, ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» (при необходимости), рекомендуемых для освоения дисциплины

а) основная литература

1. Реутов О. А. Органическая химия: учебник для вузов: в 4 ч / О. А. Реутов, А. Л. Курц, К. П. Бутин; М-во образования РФ. Ч. 1. - 3-е изд. - Б.м.: Б.и., 2009. 567 с.
http://www.lib.uniya.ac.ru/opac/bk_cat_card.php?rec_id=642957&cat_cd=YARSU
2. Реутов О. А. Органическая химия: учебник для вузов: в 4 ч / О. А. Реутов, А. Л. Курц, К. П. Бутин; М-во образования РФ. Ч. 2. - 3-е изд. испр. - Б.м.: Б.и., 2009. 623 с.
http://www.lib.uniya.ac.ru/opac/bk_cat_card.php?rec_id=643328&cat_cd=YARSU
3. Реутов О. А. Органическая химия: учебник для вузов: в 4 ч / О. А. Реутов, А. Л. Курц, К. П. Бутин; М-во образования РФ. Ч. 3. - 3-е изд. испр. - Б.м.: Б.и., 2009. 544 с.
http://www.lib.uniya.ac.ru/opac/bk_cat_card.php?rec_id=643357&cat_cd=YARSU
4. Реутов О. А. Органическая химия: учебник для вузов: в 4 ч / О. А. Реутов, А. Л. Курц, К. П. Бутин; М-во образования РФ. Ч. 4. - 3-е изд. испр. - Б.м.: Б.и., 2009. 723 с.
http://www.lib.uniya.ac.ru/opac/bk_cat_card.php?rec_id=643384&cat_cd=YARSU
5. Титце Л., Айхер Т. Препаративная органическая химия: Реакции и синтезы в практикуме органической химии и научно-исследовательской лаборатории. Пер. с нем. – М.: Мир. 1999. 704 с.
http://lib.uniya.ac.ru/opac/bk_cat_card.php?rec_id=283122&cat_cd=YARSU

б) дополнительная литература

б) дополнительная литература

1. Свойства органических соединений. Справочник / под ред. А.А. Потехина. - Л.: Химия, 1984.
2. Задачи по органической химии с решениями: учебное пособие / Курц А.Л. и др. - 2-е изд., испр. - М.: БИНОМ, Лаборатория знаний, 2006. 264 с.
http://www.lib.uniya.ac.ru/opac/bk_cat_card.php?rec_id=356407&cat_cd=YARSU

в) ресурсы сети «Интернет» (при необходимости)

1. Электронная библиотека учебных материалов ЯрГУ (http://www.lib.uniya.ac.ru/opac/bk_cat_find.php).
2. Химический факультет МГУ (<http://www.chem.msu.ru/>).

7. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине

Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине включает в свой состав следующие помещения:


- учебные аудитории для проведения лекций;
- учебные аудитории для проведения групповых и индивидуальных консультаций;
- учебные аудитории для проведения промежуточной аттестации;

- помещения для самостоятельной работы.

Помещения для самостоятельной работы оснащены компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду ЯрГУ.

Автор:

Профессор института
фундаментальной и прикладной химии, д.х.н.
(должность, ученая степень)


(подпись)

В.Ю. Орлов
(Фамилия И.О.)

Приложение №1 к рабочей программе дисциплины
«Специальная дисциплина в соответствии с темой диссертации
на соискание ученой степени кандидата наук»
по научной специальности 1.4.3 Органическая химия

Оценочные материалы
для проведения текущей и/или промежуточной аттестации
аспирантов по дисциплине

1. Контрольные задания и (или) иные материалы,
используемые в процессе текущего контроля успеваемости

Задания для самостоятельной работы:

1. Ознакомление с основной и дополнительной литературой по тематике лекций.
2. Ознакомление с периодической литературой по тематике лекций и подготовка обзоров современного состояния проблемы.

2. Список вопросов и (или) заданий для проведения промежуточной аттестации

1.1 Список вопросов и (или) заданий для проведения промежуточной аттестации

Список вопросов к зачету (2 семестр):

1. Иерархия общих проблем химии.
2. Химический синтез.
3. Управление химическими процессами.
4. Химическая структура и функция.
5. Классические подходы к выявлению количественных соотношений структура – активность. Общее понятие о дескрипторах молекулярной структуры.
6. Компьютерные технологии в химии.
7. Основы компьютерного молекулярного моделирования и QSAR.
8. Связь биологических свойств и структуры органических соединений.
9. Основные понятия медицинской химии. Биологические мишени действия физиологически активных веществ и принципы создания структур лигандов этих мишеней.
10. Принципы зеленой химии. Новые подходы к использованию природных ресурсов. Критерии «зеленого» процесса. Оценка химических реакций и процессов с точки зрения зеленой химии.
11. Химическая аналитика и диагностика.
12. Химические основы жизни. Биомолекулы: структура и свойства. Биосинтез.
13. Объекты нанохимии. Свойства наноразмерных объектов. Методы синтеза наноразмерных частиц. Нанореакторы.
14. Понятие супрамолекулярной химии.
15. Общие принципы создания полимерных композиционных материалов. Классификация полимерных композиционных материалов и полимерных нанокомпозитов.
16. Уравнение Шредингера для атомов и молекул. Электронные, колебательные и вращательные состояния молекул. Представление молекулярных орбиталей (МО) в виде линейной комбинации атомных орбиталей (ЛКАО).

17.Электронные эффекты заместителей. Влияние электронных эффектов заместителей на стабильность и реакционную способность органических соединений и промежуточных частиц. Резонансные структуры, правила их построения.

Список вопросов к зачету (3 семестр):

1. Какие существуют подходы к классификации реакций?
2. Проиллюстрируйте любыми примерами следующие термины: электрофил, нуклеофил, карбен, радикал, анион-радикал, карбокатион, карбанион.
3. Укажите тип реакции – S_N2 , приведите конкретный пример, разберите по стадиям.
4. К какому типу реакций относится полимеризация?
5. Дайте определение понятиям: гомолитические (радикальные реакции) и гетеролитические (ионные реакции). Какими особенностями связи обусловлен ее распад по гомолитическому или гетеролитическому механизму?
6. Изобразите схемой и кратко изложите современные представления о механизме реакции нитрования бензола. В каком валентном состоянии (тип гибридизации) находится атом углерода в интермедиатах?
7. Рассмотрите механизм бромирования 2,2,5,5-тетраметилгексана. Укажите медленную стадию. Приведите ряд изменения реакционной способности галогенов в реакции с 2,2,5,5-тетраэтилгексаном. Дайте объяснения.
8. Как классифицируются органические реакции по характеру реагирующих частиц? Приведите примеры: а) нуклеофильного реагента и нуклеофильной реакции, б) электрофильного реагента и электрофильной реакции.

Список вопросов к зачету (4 семестр):

1. Физико-химические методы анализа. ИК-, УФ- спектроскопия.
2. Хроматографический анализ.
3. ЯМР анализ.
4. Хромато-масс спектрометрия.
6. Химические методы анализа.
7. Метод титриметрического анализа.
8. Микроскопия в химии.

Список вопросов к экзамену.

Кандидатский экзамен по специальной дисциплине проводится устно по экзаменационным билетам.

Каждый экзаменационный билет содержит три вопроса.

На подготовку к ответу дается от 60 до 120 минут.

1. Уравнение Шредингера для атомов и молекул. Электронные, колебательные и вращательные состояния молекул. Представление молекулярных орбиталей (МО) в виде линейной комбинации атомных орбиталей (ЛКАО).
2. Электронные эффекты заместителей. Влияние электронных эффектов заместителей на стабильность и реакционную способность органических соединений и промежуточных частиц. Резонансные структуры, правила их построения.
3. Кислоты и основания (И.Бренстед, Г.Льюис). Сопряженные кислоты и сопряженные основания. Кислотно-основные равновесия. Константа кислотности pK_a , константа основности pK_b . Влияние заместителей в молекуле на кислотность и основность органических соединений. Теория жестких и мягких кислот и оснований (ЖМКО).
4. Радикальные реакции алканов. Хлорирование метана. Механизм

5. Электрофильное присоединение к алкенам. Присоединение хлора и брома к алкенам. Механизм, стереохимия, влияние заместителей на стереохимию присоединения.
6. Механизмы органических реакций. Формирование связей в органических структурах. Реакции нуклеофильного замещения у насыщенного атома углерода в алкилгалогенидах как метод создания связи углерод — углерод, углерод — азот, углерод — кислород, углерод — сера, углерод — фосфор (получение алкилгалогенидов, спиртов, тиолов, простых эфиров, нитросоединений, аминов, нитрилов, сложных эфиров и др.)
7. Механизмы органических реакций.. Реакции элиминирования. α - и β -Элиминирование. Классификация механизмов β - элиминирования: E1, E2 и E1cb. Направление элиминирования.
8. . Механизм реакций электрофильного замещения в ароматическом ряду. Представление о π - и σ -комплексах. Аренииевые ионы в реакциях электрофильного замещения. Электронодонорные и электроноакцепторные заместители. Согласованная и несогласованная ориентация двух или нескольких заместителей в ароматическом кольце.
9. Общие представления о механизме нуклеофильного замещения. Механизм отщепления-присоединения. Механизм присоединения-отщепления S_NAr . Анионные σ -комплексы Мейзенгеймера и их строение. S_N1 -Механизм ароматического нуклеофильного замещения в реакциях гидролиза катиона арендиазония. Механизм $S_{RN}1$ в ароматическом ряду и область его применения. Иницирование ион-радикальной цепи..
10. Основные типы интермедиатов. Особенности структуры и поведения радикальных частиц.
11. Основные типы интермедиатов. Особенности структуры и поведения ионных частиц.
12. Основные типы интермедиатов. Особенности структуры и поведения ион-радикальных частиц.
13. Установление структуры органических соединений. Общая схема исследования структуры органических объектов.
14. Теория реакционной способности органических соединений. Связь структура – свойства. Методология QSAR.
15. . Индексы реакционной способности: индексы свободной валентности, заряды на атомах, индексы Фукуи, энергии катионной, анионной и радикальной локализации.
16. Современные синтетические методы. Планирование синтеза. Информационная поддержка синтетических исследований.
17. Синтетический анализ в планировании органического синтеза. Ретросинтетический анализ.
18. Активация реакционных центров. Нетрадиционные способы активации.
19. Защитные группы в синтезе.
20. Ассиметрический синтез.
21. Комбинаторный синтез.

2.1 Описание процедуры выставления оценки

По итогам зачета выставляется одна из оценок: «зачтено», «незачтено».

Правила выставления оценки на зачете:

Устный ответ студента на зачете оценивается по 2-х балльной системе.

Отметка «зачтено» ставится, если:

- знания отличаются глубиной и содержательностью, дается полный исчерпывающий ответ, как на основные вопросы к зачету, так и на дополнительные;

- аспирант свободно владеет научной терминологией;
- ответ аспиранта структурирован, содержит анализ существующих теорий, научных школ, направлений и их авторов;
- ответ аспиранта логично и доказательно раскрывает проблему, предложенную для решения;
- ответ аспиранта характеризуется глубиной, полнотой и не содержит фактических ошибок;
- ответ аспиранта иллюстрируется примерами, в том числе из собственной научно-исследовательской деятельности;
- аспирант демонстрирует умение аргументировано вести диалог и научную дискуссию;
- аспирант демонстрирует навыки поиска и обработки научной информации и экспериментальных данных.

Отметка «незачтено» ставится, если:

- ответ аспиранта обнаружил незнание или непонимание сущностной части дисциплины;
- содержание вопросов не раскрыто, допускаются существенные фактические ошибки, которые аспирант не может исправить самостоятельно;
- на большую часть дополнительных вопросов по содержанию зачета аспирант затрудняется дать ответ или не дает верных ответов;
- аспирант не демонстрирует навыки поиска и обработки научной информации и экспериментальных данных.

По итогам экзамена выставляется одна из оценок: «отлично», «хорошо», «удовлетворительно» или «неудовлетворительно».

Оценка «Отлично» выставляется аспиранту, который демонстрирует глубокое и полное владение содержанием материала и понятийным аппаратом дисциплины; осуществляет межпредметные связи; умеет связывать теорию с практикой. Аспирант дает развернутые, полные и четкие ответы на вопросы экзаменационного билета и дополнительные вопросы, соблюдает логическую последовательность при изложении материала. Грамотно использует научную терминологию.

Оценка «Хорошо» выставляется аспиранту, ответ которого на экзамене в целом соответствует указанным выше критериям, но отличается меньшей обстоятельностью, глубиной, обоснованностью и полнотой. В ответе имеют место отдельные неточности (несущественные ошибки), которые исправляются аспирантом после дополнительных и (или) уточняющих вопросов экзаменатора.

Оценка «Удовлетворительно» выставляется аспиранту, который дает недостаточно полные и последовательные ответы на вопросы экзаменационного билета и дополнительные вопросы, но при этом демонстрирует умение выделить существенные и несущественные признаки и установить причинно-следственные связи. При ответах аспирант допускает ошибки в определении и раскрытии отдельных понятий, формулировке положений, которые аспирант затрудняется исправить самостоятельно. При аргументации ответа аспирант не обосновывает свои суждения. На часть дополнительных вопросов студент затрудняется дать ответ или дает неверные ответы.

Оценка «Неудовлетворительно» выставляется аспиранту, который демонстрирует разрозненные, бессистемные знания; беспорядочно и неуверенно излагает материал; не умеет выделять главное и второстепенное, не умеет соединять теоретические положения с практикой, не устанавливает межпредметные связи; допускает грубые ошибки при определении сущности раскрываемых понятий, явлений, вследствие непонимания их существенных и несущественных признаков и связей; дает неполные ответы, логика и последовательность изложения которых имеют существенные и принципиальные нарушения, в ответах отсутствуют выводы. Дополнительные и уточняющие вопросы экзаменатора не приводят к коррекции ответов аспиранта.

Оценка «Неудовлетворительно» выставляется также аспиранту, который взял экзаменационный билет, но отвечать отказался.