

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
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

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 организации и самостоятельному проведению научно-исследовательской работы с получением и последующим внедрением научных результатов, удовлетворяющих установленным требованиям в избранной области (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, в том числе в междисциплинарных областях

уметь:

- при решении исследовательских и практических задач генерировать новые идеи, поддающиеся операционализации исходя из наличных ресурсов и ограничений
- 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;

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 НИД, анализа полученных данных, формулировки выводов и рекомендаций по направленности (специальности) подготовки.

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	14/0,39	2/0.056	2/0.056	6/0.166	4/0.111

	веществ					
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. Вишнев 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. Вишнев 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.

