

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова»
Химический факультет

УТВЕРЖДАЮ

Декан химического факультета,
Акад. РАН, профессор



/В.В. Лунин/

«27» февраля 2017 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

**Теоретические основы органической химии. Современные подходы к
изучению механизма реакции**

Уровень высшего образования:
Специалитет

Направление подготовки (специальность):

04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

Направленность (профиль) ОПОП:

Органическая химия

Форма обучения:

очная

Рабочая программа рассмотрена и одобрена
Учебно-методической комиссией факультета
(протокол №1 от 27.01.2017)

Москва 2017

Рабочая программа дисциплины разработана в соответствии с самостоятельно установленным МГУ образовательным стандартом (ОС МГУ) для реализуемых основных профессиональных образовательных программ высшего образования по направлению подготовки / специальности 04.05.01 «Фундаментальная и прикладная химия» (программа специалитета), утвержденного приказом МГУ от 22 июля 2011 года № 729 (в редакции приказов МГУ от 22 ноября 2011 года № 1066, от 21 декабря 2011 года № 1228, от 30 декабря 2011 года № 1289, от 27 апреля 2012 года № 303, от 30 декабря 2016 года № 1671).

Год (годы) приема на обучение 2014/2015, 2015/2016, 2016/2017, 2017/2018,
2018/2019

1. Наименование дисциплины (модуля) **Теоретические основы органической химии. Современные подходы к изучению механизма реакции**
2. Уровень высшего образования – **специалитет.**
3. Направление подготовки: **04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия.**
4. Место дисциплины (модуля) в структуре ООП: вариативная часть ООП, блок ПД.
5. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников)

Компетенция	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)
ОПК-1.С. Способность решать современные проблемы фундаментальной и прикладной химии, используя методологию научного подхода и систему фундаментальных химических понятий и законов	Уметь анализировать научную литературу с целью выбора направления и методов, применяемых в исследовании по теме выпускной квалификационной работы, Уметь: самостоятельно составлять план исследования Владеть: навыками поиска, критического анализа, обобщения и систематизации научной информации, постановки целей исследования и выбора оптимальных путей и методов их достижения
СПК-1.С. Способность использовать фундаментальные понятия органической химии и основные теоретические подходы к изучению механизмов реакций органических соединений при решении задач профессиональной деятельности	Знать: основные типы органических реакций, механизмы их протекания и основные интермедиаты Уметь: Использовать теоретические знания для решения конкретных задач, возникающих в ходе исследования. Владеть: формами и методами научного познания применительно к методам теоретической органической химии
СПК-2.С. Способность определять стратегию проведения реакции и ее результат (состав продуктов и их стереохимию, возможность катализа, оптимизацию растворителя и т.п.) на основе теоретических знаний в области органической химии	Знать: основные теоретические подходы к изучению механизмов реакций органических соединений; Уметь: самостоятельно оптимизировать условия проведения конкретной реакции исходя из базовых теоретических представлений о механизме реакции и факторах, определяющих реакционную способность. Владеть: Методами построения молекулярных и базисных орбиталей органических молекул

<p>СПК-3. С. Способность самостоятельно оптимизировать условия проведения конкретной реакции исходя из базовых теоретических представлений о механизме реакции и факторах, определяющих реакционную способность</p>	<p>Знать: основные принципы, определяющие стратегию проведения реакции и ее результат (состав продуктов и их стереохимию, возможность катализа, оптимизацию растворителя и т.п.); информативные возможности различных подходов к изучению механизма реакции. Уметь: составлять план изучения механизма конкретной реакции Владеть: опытом работы с химической литературой</p>
<p>СПК-4.С. Способность использовать современные физико-химические методы анализа для интерпретации результатов органического синтеза</p>	<p>Знать: основные закономерности, связывающие строение и свойства органических соединений; Уметь: использовать теоретические знания для решения конкретных задач, возникающих в ходе исследования;</p>

6. Объем дисциплины в зачетных единицах с указанием количества академических или астрономических часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся:

Объем дисциплины (модуля) составляет 2 зачетных единицы, всего 72 часа, из которых 58 часов составляет контактная работа студента с преподавателем (36 часов занятия лекционного типа, 18 часов – занятия семинарского типа, 2 часа – групповые консультации, 2 часа – промежуточный контроль успеваемости), 14 часов составляет самостоятельная работа студента.

7. Входные требования для освоения дисциплины (модуля), предварительные условия.

Обучающийся должен

Знать: основные типы органических реакций и условия их реализации; методы доказательства структуры органических соединений

Уметь: обсуждать результаты проведенного исследования и идентифицировать продукты реакции;

Владеть: основными химическими теориями, концепциями, законами, описывающими физико-химические явления, применять основные законы химии при обсуждении полученных результатов, в том числе с привлечением информационных баз данных.

8. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам.

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины (модуля), форма промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)	Всего (часы)	В том числе								
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы из них					Самостоятельная работа обучающегося, часы из них			
		Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа	Групповые консультации	Индивидуальные консультации	Учебные занятия, направленные на проведение текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации	Всего	Выполнение домашних заданий	Подготовка рефератов и т.п.	Всего
Тема 1. Основные подходы к изучению механизмов реакций	11	6	3				9	2		2
Тема 2. Конкурирующие пути реакций. Шкалы нуклеофильности, электрофильности и основности. Принцип линейности свободных энергий. Уравнения Гамметта и	9	4	3				7	2		2

Тафта										
Тема 3. Согласованные реакции. Теория перциклических реакций. Принципы построения молекулярных орбиталей π -систем	16	8	4				12	4		4
Тема 4. Реакционноспособные интермедиаты органических реакций	13	8	3				11	2		2
Тема 5. Донорно-акцепторные взаимодействия в органической химии	16	8	4	2			14	2		2
Тема 6. Стереoeлектронные эффекты	5	2	1				3	2		2
Промежуточная аттестация <i>зачет</i>	2					2	2			
Итого	72	36	18	2		2	58	14		14

9. Образовательные технологии:

- применение компьютерных симуляторов, обработка данных на компьютерах, использование компьютерных программ, управляющих приборами;
- использование средств дистанционного сопровождения учебного процесса;
- преподавание дисциплин в форме авторских курсов по программам, составленным на основе результатов исследований научных школ МГУ.

10. Учебно-методические материалы для самостоятельной работы по дисциплине (модулю):

1. Т.В.Магдесиева, *Применение орбитального подхода в органической химии*, Методическое пособие для студентов и аспирантов, МГУ, 2008, 100 с.

2. Т.В.Магдесиева, П.К.Сазонов, Сборник задач по курсу лекций «Применение орбитального подхода в органической химии», Методическое пособие для студентов и аспирантов, МГУ, 2008, 75 с.

11. Ресурсное обеспечение:

- Перечень основной и вспомогательной учебной литературы ко всему курсу

Основная литература

1. Конспект лекций
2. Т.В.Магдесиева, *Применение орбитального подхода в органической химии*, Методическое пособие для студентов и аспирантов, МГУ, 2008, 100 с.
3. Т.В.Магдесиева, *Орбитальное строение металлокомплексов*, Методическое пособие для студентов и аспирантов, МГУ, 2011, 108 с.
4. Т.В.Магдесиева, П.К.Сазонов, Сборник задач по курсу лекций «Применение орбитального подхода в органической химии», Методическое пособие для студентов и аспирантов, МГУ, 2008, 75 с.
5. Т.В.Магдесиева, . «Коарктатные реакции» Методическое пособие для студентов и аспирантов, МГУ, 2006, 52 с
6. A.Rauk, *Orbital Interaction Theory of Organic Chemistry*, 2001, J. Wiley & Sons, Inc., 256 p

Дополнительная литература

1. О.А.Реутов, А.Л.Курц, К.П.Бутин, *Органическая химия*, т.1-4, М., Бином, 2004.
2. К.Эльшенбройх, *Металлоорганическая химия*, М., Бином. Лаборатория знаний, 2011, 746 с.
3. В.Г.Цирельсон, *Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела*, М., Бином. Лаборатория знаний, 2010, 495 с.
4. I.Fleming *Molecular Orbitals and Organic Reactions*, 2010, Wiley, 510 p.
5. Ф.Кэрри, Р. Сандберг, *Углубленный курс органической химии*, т.1, 2, Москва, Химия, 1981, 518 с.
6. Дж.Кдайден, Н.Гривз, С.Уоррен, П.Уозерс. «Органическая химия, т.1-3, Оксфорд, 2001.

- Материально-техническое обеспечение: специальных требований нет, занятия проводятся в обычной аудитории, оснащенной доской и мелом (маркерами)

12. Язык преподавания – русский

13. Преподаватели: д.х.н., профессор, Магдесиева Татьяна Владимировна, (8) 495 939 30 65 tvm@org.chem.msu.ru.

Фонды оценочных средств, необходимые для оценки результатов обучения

Образцы оценочных средств для текущего контроля усвоения материала и промежуточной аттестации - зачета. На зачете проверяется достижение промежуточных индикаторов компетенций, перечисленных в п.5.

Вопросы для зачета:

1. Основные подходы к изучению механизмов реакций: материальный баланс, кинетика, стереохимические корреляции, изотопные и структурные метки, влияние заместителей, растворителя, катализаторов, поиск нестабильных интермедиатов. Понятие о переходном состоянии.
2. Постулат Хэммонда. Принцип Кертвина-Гамметта. Селективность реакции. Кинетический и термодинамический контроль реакции
3. Соотношение линейности свободных энергий в исследовании переходного состояния. Уравнение Гаммета. Константы заместителей и константы реакций. Уравнение Тафта.
4. Конкуренция между различными механизмами реакции; факторы, ее определяющие.
5. Шкалы нуклеофильности и электрофильности (по Де Майру). Редокс-потенциалы реагентов
6. Интермедиаты органических реакций, способы генерирования и методы детектирования. Рассмотрение стабилизирующего влияния заместителей методом возмущений молекулярных орбиталей
7. Карбокатионы, строение. Неклассические карбокатионы.
8. σ - и π -Радикалы; строение и основные способы генерирования. Орбитальное рассмотрение стабилизации радикальных центров.
9. σ - и π -карбанионы; факторы, влияющие на их стабильность. Роль среды и противоиона. Амбидентные анионы и форма их МО. Шкала СН- кислотности.
10. Синглетные и триплетные карбены: Способы генерации, геометрия; Орбитальное рассмотрение стабилизирующего влияния заместителей на S^0 и T^1 состояния.
11. Генерирование катион- и анион-радикалов: химическое, фотохимическое, электрохимическое. Стабильные ион-радикалы
12. π -Орбитали линейных и циклических сопряжённых полиенов, их построение на основе метода возмущений, симметрия и узловые свойства. Особенности строения нечётных линейных полиенов.
13. Классификация перициклических реакций по Вудворду-Хоффману. Характерные особенности: высокая стерео- и региоселективность, изменение селективности при переходе от термической к фотохимической активации.
14. Реакция циклоприсоединения и ретродиеновый распад. Региоселективность реакции и величина коэффициентов на концевых атомах граничных орбиталей диена и диенофила. Понятие о периселективности.
15. 1,3-Дипольное циклоприсоединение. 1,3-Диполи и их строение и классификация. Региоселективность.

16. Метод корреляционных диаграмм и его применение к анализу электроциклических реакций. Конротаторные и дисротаторные процессы.
17. Топологический анализ переходных состояний. Современные представления об ароматичности и антиароматичности. Примеры реальных систем, обладающих мебиусовской ароматичностью. Мебиусовские расширенные порфирины
18. Донорно-акцепторные взаимодействия как элементарный акт многих органических и природных процессов. Кислоты Льюиса. Жёсткие и мягкие кислоты и основания. Орбитальный и зарядовый контроль. Применение принципа ЖМКО к органическим реакциям.
19. «Рыхлые льюисовы пары» (Frustrated ion pairs) – новые уникальные системы для активации малых молекул.
20. Кислоты Брёнстеда. Связь между протонной и льюисовской основностью, уравнение Эдвардса. Концентрированные растворы. Кислотные функции H_0 , H_A , H_R . Суперкислые среды.
21. Суперосновные среды. Система ДМСО-ОН⁻ как суперосновная среда. Функция H .
22. Специфический и общий кислотный и основной катализ.
23. Слабые (нековалентные) взаимодействия различной природы и их роль в биохимических процессах. Примеры слабых нековалентных взаимодействий: водородные связи, π стэкинг, образование интеркалятов, агостические взаимодействия.
24. Стереoeлектронные эффекты, их влияние на селективность реакции
25. Правила Болдуина.

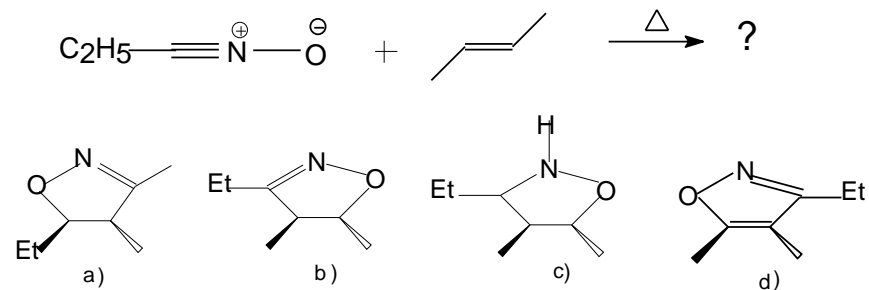
Примеры вопросов и задач для контрольных работ:

• **Контрольные вопросы;**

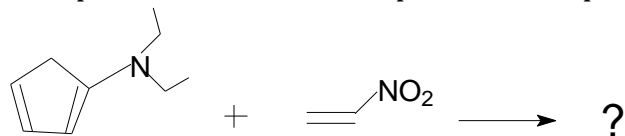
1. Каковы основные принципы построения молекулярных орбиталей с использованием метода возмущений (проиллюстрируйте на любом примере).
2. Используя орбитальные представления, объясните, почему при смешении циклопентадиена и этилена образуется только дициклопентадиен, а не норбонен (бицикло[2.2.1]гептен-2)?
3. Покажите, используя метод корреляционных диаграмм, что фотохимическое раскрытие циклобутена должно происходить дисротаторным путем (это доказано экспериментально)
4. Как объяснить нелинейную Гамметтовскую зависимость, наблюдаемую при гидролизе замещенных ацилхлоридов?
5. Объясните, какой циклогептатриенилиден более устойчив – синглетный или триплетный? Нарисуйте схему МО

• **Расчетные задачи или тесты**

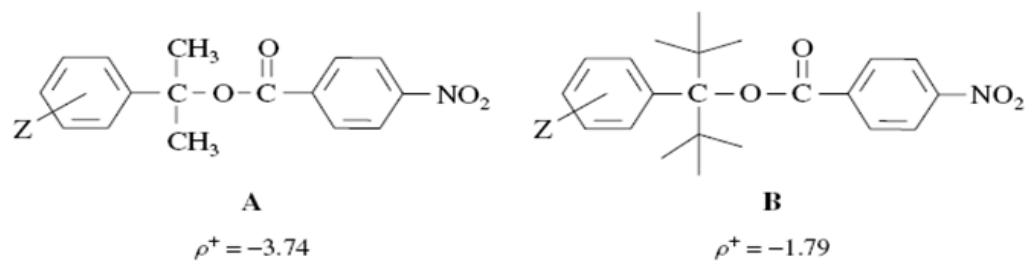
1. Пользуясь справочными таблицами, рассчитайте, насколько быстрее будет протекать гидролиз в воде для 4-бромбензилхлорида по сравнению с 4-нитробензилхлоридом? ($\rho = -1.31$)
2. Укажите правильный продукт реакции. Используя метод возмущений, покажите, какой тип взаимодействия орбиталей реализуется (s,s; s,a; a,a)?



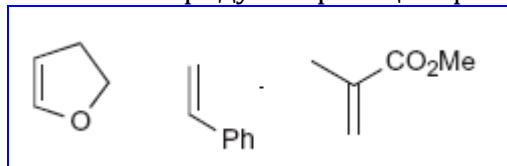
3. Рассмотрев взаимодействие орбиталей, определите региоселективность реакции и ее продукт:



4. Для сольволиза соединений А и В получены следующие значения ρ . Предложите механизм сольволиза. Чем отличаются ПС для реакций сольволиза А и В и на основании чего сделаны выводы?



5. Напишите продукты реакции фенилазида с алкенами и оцените региоселективность



Методические материалы для проведения процедур оценивания результатов обучения

Шкала оценивания знаний, умений и навыков является единой для всех дисциплин (приведена в таблице ниже)

ШКАЛА И КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТА ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)				
Оценка \ Результат	2	3	4	5
Знания	Отсутствие знаний	Фрагментарные знания	Общие, но не структурированные знания	Сформированные систематические знания
Умения	Отсутствие умений	В целом успешное, но не систематическое умение	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы умение (допускает неточности неприципиального характера)	Успешное и систематическое умение
Навыки (владения)	Отсутствие навыков	Наличие отдельных навыков	В целом, сформированные навыки, но не в активной форме	Сформированные навыки, применяемые при решении задач

РЕЗУЛЬТАТ ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)	ФОРМА ОЦЕНИВАНИЯ
<p>Знать: основные типы органических реакций, механизмы их протекания и основные интермедиаты</p> <p>Знать: основные теоретические подходы к изучению механизмов реакций органических соединений;</p> <p>Знать: основные принципы, определяющие стратегию проведения реакции и ее результат (состав продуктов и их стереохимию, возможность катализа, оптимизацию растворителя и т.п.); информативные возможности различных подходов к изучению механизма реакции.</p> <p>Знать: основные закономерности, связывающие строение и свойства органических соединений;</p>	<p>мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на зачете</p>
<p>Уметь анализировать научную литературу с целью выбора направления и методов, применяемых в исследовании по теме выпускной квалификационной работы,</p> <p>Уметь: самостоятельно составлять план исследования</p> <p>Уметь: Использовать теоретические знания для решения конкретных задач, возникающих в</p>	<p>мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на зачете</p>

<p>ходе исследования.</p> <p>Уметь: самостоятельно оптимизировать условия проведения конкретной реакции исходя из базовых теоретических представлений о механизме реакции и факторах, определяющих реакционную способность.</p> <p>Уметь: составлять план изучения механизма конкретной реакции</p> <p>Уметь: использовать теоретические знания для решения конкретных задач, возникающих в ходе исследования</p>	
<p>Владеть: навыками поиска, критического анализа, обобщения и систематизации научной информации, постановки целей исследования и выбора оптимальных путей и методов их достижения</p> <p>Владеть: формами и методами научного познания применительно к методам теоретической органической химии</p> <p>Владеть: Методами построения молекулярных и базисных орбиталей органических молекул</p> <p>Владеть: опытом работы с химической литературой</p>	<p>мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на зачете</p>