

Документ подписан простой электронной подписью
 Информация о владельце:
 ФИО: Аксенов Александр Викторович
 Должность: декан химико-фармацевтического факультета
 Дата подписания: 20.09.2023 16:40:53
 Уникальный программный ключ:
 a54a7e487a56aba02481c6fc0700bc921bd7a139

Аннотации к рабочей программе дисциплины

Наименование дисциплины (модуля)	Теоретические основы органической химии
Краткое содержание	Структура и свойства молекул. Теория молекулярных орбиталей. π-Связи в этилене, ацетилене, карбонильной группе. Теория возмущений молекулярных орбиталей. Возмущения первого и второго порядка. π-Орбитали линейных и циклических сопряжённых полиенов. Особенности строения нечётных линейных полиенов. Аллильный радикал, анион и катион. Циклические π-системы. Ароматичность и антиароматичность. Аннулены. Критерии ароматичности. Альтернантные и неальтернантные углеводороды и их свойства. Энергии делокализации и ароматичность. Канонические молекулярные орбитали тетраэдрической и плоской молекулы метана. Причины конфигурационной устойчивости тетраэдра. Теория гибридизации орбиталей; ее применение к описанию строения метана. Скелетные орбитали циклопропана и их построение из трех строительных блоков CH_2 с помощью метода возмущений. Плоскостные σ-орбитали циклопропана. σ-Свойства циклопропана: «банановость» σ-связей, протонирование «по ребру», предпочтительная конформация циклопропилалкильных катионов, устойчивость катионов, содержащих циклопропильные заместители. Скелетные орбитали циклобутана. Кислоты и основания. Разбавленные растворы. <i>Кислоты Бренстеда</i>. Сила кислот и оснований. Кислотный и основной катализ. Уравнение Брёнстеда. Концентрированные растворы. Кислотные функции и скорости реакций. <i>Кислоты Льюиса</i>. Жёсткие и мягкие кислоты и основания. Применение принципа ЖМКО к органическим реакциям. Суперкислые и суперосновные среды. Реакционноспособные интермедиаты органических реакций Радикалы; строение и основные способы генерирования. Обнаружение и установление строения свободных радикалов. Спектры ЭПР. Основные радикал-радикальные реакции: рекомбинация, диспропорционирование. Окисление и восстановление свободных радикалов. Реакции свободных радикалов с молекулами. Цепной механизм и его ключевые стадии. Бирадикалы и их роль в фотохимических реакциях. Конфигурационные взаимодействия в карбенах. Синглетные и триплетные карбены, их геометрия. Способы генерации карбенов. Реакции карбенов: присоединение к кратным связям, внедрение по связи C-H, перегруппировки, димеризация. Нитрены и ионы нитрения. Примеры реакций с их участием. Карбокатионы Карбониевые и карбениевые ионы. Генерация катионов. Строение катионов CH_3^+ и CH_5^+. Факторы, влияющие на стабильность

карбениевых ионов. Основные реакции карбениевых ионов: присоединение нуклеофилов, отщепление протона, перегруппировку. Неклассические карбокатионы.

Карбанионы

Свободные карбанионы в газовой фазе. Их исследование методами ион-циклотронного резонанса и масс-спектрометрии высокого давления. Получение карбанионов. Факторы, влияющие на стабильность карбанионов. Роль среды и противоиона. Контактные и сольватноразделенные ионные пары. СН-Кислоты. Кинетическая и термодинамическая кислотность. Амбидентные анионы и форма их МО. Факторы, определяющие направление реакций.

Методы исследования механизма органических реакций.

Основные типы реакций органических соединений. Общая классификация механизмов. Кинетические исследования. Уравнение Аррениуса. Понятие о переходном состоянии. Кинетический изотопный эффект. Стадии изучения механизма реакций. Термодинамические параметры реакций. Понятие о кинетическом и термодинамическом контроле реакций. Уравнение Гаммета. Константы заместителей и константы реакций, их знак и абсолютная величина. Индуктивный и мезомерный эффекты. Стерические эффекты. Уравнение Тафта. Соотношение линейности свободных энергий в исследовании переходного состояния.

Структура и механизм.

Алифатическое нуклеофильное замещение.

Механизмы $S_N 1$ и $S_N 2$. Экспериментальные доказательства для них. Ионные пары. Нормальный и специальный солевые эффекты. Стереохимия. Пограничная область. Сольволиз алкильных субстратов, Реакции первично-бензильных субстратов. Влияние структуры и растворителя на механизм. Структура субстрата. Уходящая группа. Нуклеофил. Нуклеофильность. Амбидентные нуклеофилы. Другие S_N -механизмы. Механизм $S_N i$. Аллильная перегруппировка. Участие соседних групп.

Реакции элиминирования.

Характеристики $E 1$ и $E 2$ механизмов. Характеристики $E 1cB$ механизма. Вариабельность переходного состояния $E 2$. Стереохимия. Правила Зайцева и Гофмана. Геометрическая ориентация. Баланс между элиминированием и замещением

Алифатическое электрофильное замещение.

Уходящая группа. Реакции $S_E 1$ и $S_E 2$. Нуклеофильное содействие в электрофильном замещении. SET -Механизм.

Присоединение по двойным углерод-углеродным связям.

Электрофильное присоединение Br_2 , Cl_2 , HBr и HCl . Правило Марковникова. Свободнорадикальное присоединение. Нуклеофильное присоединение. Гидроборирование.

Присоединение по карбонильной группе и родственные реакции.

Простое присоединение. Кислотно-основной катализ. Присоединение с последующим замещением. Кислотный катализ. Образование иминов из аминов и кетонов. Кислотный катализ этой реакции. Катализ основаниями на стадии элиминирования. Альдольная конденсация. Гидролиз эфиров карбоновых кислот.

	Замещение в ароматическом кольце. Нитрование. Природа электрофила. Аренониевый ион. Ориентация и реакционная способность. Факторы парциальных скоростей. Селективность и её связь со структурой переходного состояния. Ипсо-нитрование и механизм присоединения-отщепления. Другие реакции электрофильного замещения. Механизм $S_N 2(Ar)$. Комплекс Мейзенгеймера. Кинетика и катализ основаниями. Эффекты уходящей группы. Активирующие группы. Нуклеофильность. Механизм $S_N 1$ разложения диазониевых и иодониевых солей. Ариновый механизм. Эффекты уходящей группы. Влияние заместителей на стадию образования арина и стадию присоединения к арину. Механизм $S_{RN} 1$, включающий арильные радикалы. ANRORC-Механизм для замещения в шестичленных гетероциклах. Реакции алкилирования, арилирования и гидроксирования. Ориентация в реакции арилирования. Алкилирование шестичленных гетероциклов. Теория перициклических реакций. Коарктатные реакции. Классификация перициклических реакций по Вудворду-Хоффману. Молекулярно-орбитальная теория перициклических реакций. Перициклические орбитали; супраповерхностные и антаповерхностные взаимодействия. Разрешённые и запрещённые реакции. Объяснение разрешённых и запрещённых путей реакций методами возмущения МО, корреляционных диаграмм и ароматического и антиароматического переходного состояния. Сохранение орбитальной симметрии. Правила Вудворда-Хоффмана. Электроциклические реакции Их механизм. Конротаторные и дисротаторные процессы. Правила Вудворда-Хоффмана для электроциклических реакций. Применение метода корреляционных диаграмм и метода ароматического переходного состояния к этим реакциям. Синтетическое использование термических и фотохимических электроциклических реакций. Циклоприсоединение Метод корреляционных диаграмм и ароматического переходного состояния. Классификация реакций циклоприсоединения по числу электронов, типу орбиталей и геометрии перекрывания. Правила Вудворда-Хоффмана для циклоприсоединения. Сигматропные перегруппировки (сигматропные сдвиги) Определение. Классификация. Порядок сигматропного сдвига. Ароматическое и антиароматическое переходное состояние. Перегруппировки Вагнера-Меервейна и пинаколиновая. Миграция водорода и алкильных групп. Стереохимия перегруппировок. Коарктатные реакции. Определение. Топология электронных сдвигов. Организующие принципы сложных реакций и теория коарктатного переходного состояния. Линейные подсистемы и терминаторы.
Результаты освоения дисциплины (модуля)	Знает математические основы методов анализа экспериментальных данных Знает информационные основы методов анализа экспериментальных данных Умеет работать с источниками научно-технической информации, научной литературы, баз данных в области фундаментальной и прикладной химии, составлять готовый информационный продукт в области профессиональной деятельности

	Умеет пользоваться современными информационно-коммуникационными технологиями для поиска и обработки информации, работы с базами данных, презентации результатов в избранной предметной области Умеет планировать научные исследования в профессиональной деятельности и обобщать полученные результаты Умеет вести письменную и устную коммуникацию на иностранном языке на уровне, достаточном для решения профессиональных и научных задач Владеет навыками письменной и устной коммуникации на русском и на иностранном языках на уровне, достаточном для решения профессиональных и научных задач Знает концепции основных разделов современной химической науки Знает основные понятия и методы исследования фундаментальной и прикладной химии Знает правовые, экономические и профессиональные нормы и обязанности Знает технологические требования и нормативы Владеет основными методами исследований, применяемыми в различных областях химии Владеет навыками решения химических задач Владеет методами оформления результатов деятельности в избранной предметной области Владеет навыками научно-исследовательской работы в химических лабораториях Владеет навыками выступления на научных семинарах, участия в научных дискуссиях, подготовки научных текстов
Трудоемкость, з.е.	6
Форма отчетности	Экзамен, КР
Перечень основной и дополнительной литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)	
Основная литература	1. Губина Т.И. Основы органической химии. Часть 1 [Электронный ресурс]: учебное пособие/ Губина Т.И., Щербакова Л.Ф.— Электрон. текстовые данные.— Саратов: Саратовский государственный технический университет имени Ю.А. Гагарина, ЭБС АСВ, 2014.— 44 с.— Режим доступа: http://www.iprbookshop.ru/80111.html.— ЭБС «IPRbooks». 2. Реутов, О. А. Органическая химия : [Учебник для студ. вузов*] : В 4-х ч. / МГУ им. М.В. Ломоносова, Ч. 3. – М. : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2004. – 544 с. : ил. – (Классический университетский учебник). – ISBN 5-94774-109-1. – 5-94774-112-1
Дополнительная литература	1. Грандберг, И. И. Органическая химия : учебник для бакалавров / И.И. Грандберг, Н.Л. Нам. – 8-е изд. – Москва : Юрайт, 2013. – 607, [1] с. : ил. ; 22. – (Бакалавр. Базовый курс). – Гриф: Рек. МО. – Предм. указ.: с. 590-601. – ISBN 978-5-9916-2898-3 2. Organic Chemistry / J. Clayden, N.Greeves, S. Warren, P. Wothers. – New York : Oxford university Press, 2008. – 1515 p. – Index: p. 1491-1515. – ISBN 978-0-19-850346-0 //rusmarc.