

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
"Казанский (Приволжский) федеральный университет"
Химический институт им. А.М. Бутлерова



УТВЕРЖДАЮ

Проректор по образовательной деятельности КФУ

Проф. Д.А. Гаурский

(ДО КФУ)

» _____ 20__ г.

подписано электронно-цифровой подписью

Программа дисциплины

Теоретические основы органической и элементоорганической химии Б1.В.ОД.8

Специальность: 04.05.01 - Фундаментальная и прикладная химия

Специализация: Химия элементоорганических соединений

Квалификация выпускника: Химик. Преподаватель химии

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Автор(ы):

Черкасов Р.А.

Рецензент(ы):

Гарифзянов А.Р.

СОГЛАСОВАНО:

Заведующий(ая) кафедрой: Галкин В. И.

Протокол заседания кафедры No ____ от " ____ " _____ 201__ г

Учебно-методическая комиссия Химического института им. А.М. Бутлерова:

Протокол заседания УМК No ____ от " ____ " _____ 201__ г

Регистрационный No 73019

Казань
2019

Содержание

1. Цели освоения дисциплины
2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы
3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля
4. Структура и содержание дисциплины/ модуля
5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения
6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов
7. Литература
8. Интернет-ресурсы
9. Материально-техническое обеспечение дисциплины/модуля согласно утвержденному учебному плану

Программу дисциплины разработал(а)(и) профессор, д.н. (профессор) Черкасов Р.А. Кафедра высокомолекулярных и элементоорганических соединений Химический институт им. А.М. Бутлерова, Rafael.cherkasov@kpfu.ru

1. Цели освоения дисциплины

Приобретение знаний в области одной из новейших дисциплин химической науки и практики, сформированной в основном в 20 и 21 веках - теории строения и химических реакций органических и элементоорганических соединений. Положения и достижения этих дисциплин лежат в основе научно - технического прогресса последних десятилетий в области создания новых материалов и веществ с практически полезными свойствами, определивших в значительной степени лицо современной цивилизации. Понимание обучающимися основополагающих факторов создания веществ с заданной структурой и свойствами может быть получено лишь при изучении природы связи и структуры молекулы, взаимозависимости между строением, химическим поведением и свойствами конечного химического продукта. Это, в свою очередь,, предполагает освоение методологии получения подобного рода знаний, умения анализировать внутренние и внешние факторы химической реакционной способности, определяющих конечный синтетический результат. Теоретическая вооруженность обучающиеся является основой сознательного планирования и управления химическим процессом, умением предвидеть результат как экспериментальных, так и промышленных технологий химического процесса.

2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы высшего профессионального образования

Данная учебная дисциплина включена в раздел "Б1.В.ОД.8 Дисциплины (модули)" основной образовательной программы 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия и относится к обязательным дисциплинам. Осваивается на 4 курсе, 7 семестр.

Дисциплина относится к вариативной части блока дисциплин Б1. К данному моменту студентами должны быть получены знания по основным разделам химии (неорганической, аналитической, органической, физической), необходим базовый объем знаний по физике и математике.

В данном курсе даются представления о современных подходах к исследованию взаимосвязи между строением органических и элементоорганических соединений и их реакционной способностью, механизмах реакций и способах их установления, зависимости свойств органических производных элементов от их положения в Периодической системе. Приводятся новейшие достижения в развитии теоретических представлений о природе химической связи, пространственном и электронном строении органических и элементоорганических молекул, дается методология критического анализа современных положений и концепций в теоретической органической и элементоорганической химии, новейшие данные о практическом использовании новых достижений в указанных областях химии.

3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля

В результате освоения дисциплины формируются следующие компетенции:

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ОК-7 (общекультурные компетенции)	готовностью к саморазвитию, самореализации, использованию творческого потенциала
ОПК-1 (профессиональные компетенции)	способностью воспринимать, развивать и использовать теоретические основы традиционных и новых разделов химии при решении профессиональных задач

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ОПК-3 (профессиональные компетенции)	способностью использовать теоретические основы фундаментальных разделов математики и физики в профессиональной деятельности
ПК-3 (профессиональные компетенции)	владением системой фундаментальных химических понятий и методологических аспектов химии, формами и методами научного познания
ПК-5 (профессиональные компетенции)	способностью приобретать новые знания с использованием современных научных методов и владение ими на уровне, необходимом для решения задач, имеющих естественнонаучное содержание и возникающих при выполнении профессиональных функций
ПСК-1	способностью использовать основные закономерности химической науки и фундаментальные химические понятия в профессиональной деятельности в соответствии с выбранной специализацией

В результате освоения дисциплины студент:

1. должен знать:

основные подходы к установлению взаимосвязи между свойствами молекул и характером химических связей в них, основные типы химических реакций органических и элементоорганических соединений; основные характеристики функциональных групп; основные положения теории строения молекул и типов внешних факторов.

2. должен уметь:

уметь анализировать факторы, определяющие реакционную способность органических и элементоорганических соединений, иметь представления об эффектах функциональных групп; прогнозировать структуру и свойства молекул в зависимости от положения элемента в Периодической системе; сопоставлять общие и специфические особенности химического поведения органических и элементоорганических молекул; адекватно сопоставлять структуру молекулы с ее проявлениями в результатах инструментальных методов идентификации молекул.

3. должен владеть:

методологией анализа электронной и пространственной структуры молекул; подходами и способностью критически анализировать факторы, определяющие химическое поведение и свойства молекул; основными представлениями теории и практики использования методов изучения строения молекул и их реакций: общими представлениями о возможностях экспериментального и практического использования органических и элементоорганических соединений

4. должен демонстрировать способность и готовность:

к теоретической и экспериментальной научной деятельности в области синтеза, выделения, очистки и идентификации новых веществ; восприятия и понимания новейших теоретических представлений и практических достижений органической и элементоорганической химии; сопоставлению полученных экспериментальных и теоретических результатов с мировым опытом и литературными прецедентами и аналогиями; адекватно и на современном уровне представлять результаты и выводы индивидуальной научной работы.

4. Структура и содержание дисциплины/ модуля

Общая трудоемкость дисциплины составляет 5 зачетных(ые) единиц(ы) 180 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины: экзамен в 7 семестре.

Суммарно по дисциплине можно получить 100 баллов, из них текущая работа оценивается в 50 баллов, итоговая форма контроля - в 50 баллов. Минимальное количество для допуска к зачету 28 баллов.

86 баллов и более - "отлично" (отл.);

71-85 баллов - "хорошо" (хор.);

55-70 баллов - "удовлетворительно" (удов.);

54 балла и менее - "неудовлетворительно" (неуд.).

4.1 Структура и содержание аудиторной работы по дисциплине/ модулю

Тематический план дисциплины/модуля

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
1.	Тема 1. Специфика органически и элементоорганических молекул и их реакций	7	1	2	0	0	
2.	Тема 2. Химические связи в органических и элементоорганических соединениях	7	1	2	2	0	Реферат
3.	Тема 3. Многоцентровые многоэлектронные связи в элементоорганических молекулах.	7	2	2	0	0	
4.	Тема 4. Стереохимия органических и элементоорганических соединений.	7	2	2	3	0	
5.	Тема 5. Интермедиаты в химических реакциях.	7	3	2	2	0	

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
6.	Тема 6. Роль среды. Катализ в органических и элементоорганических реакциях	7	3	2	2	0	Контрольная работа
7.	Тема 7. Взаимосвязь электронной и пространственной структуры.	7	4	2	3	0	
8.	Тема 8. Методы установления механизмов реакций. Критерии истинности механизма.	7	4	2	3	0	
9.	Тема 9. Механизмы реакций нуклеофильного замещения у насыщенных центров.	7	5	2	3	0	
10.	Тема 10. Механизмы реакций нуклеофильного отщепления.	7	5	2	3	0	Письменная работа
11.	Тема 11. Реакции карбонильных соединений.	7	6	2	0	0	Письменная работа
12.	Тема 12. Реакции электрофильного замещения.	7	6	2	4	0	
13.	Тема 13. Реакции электрофильного присоединения.	7	7	2	4	0	
14.	Тема 14. Гомолитические реакции. Согласованные реакции. Циклоприсоединение.	7	7	2	2	0	
15.	Тема 15. Молекулярные перегруппировки органических и элементоорганических соединений	7	8	2	4	0	
16.	Тема 16. Органических производные металлов 1 и 2 групп.	7	8	2	2	0	

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
17.	Тема 17. Органические производных бора и алюминия.	7	9	2	2	0	
18.	Тема 18. Органические производные элементов 4 группы.	7	9	2	2	0	Письменная работа
19.	Тема 19. Органические производные переходных металлов.	7	10	2	3	0	
20.	Тема 20. Диеновые, циклопентадиенильные и ареновые комплексы.	7	10	2	0	0	
21.	Тема 21. Промышленный металлокомплексный катализ.	7	11	2	0	0	
	Тема . Итоговая форма контроля	7		0	0	0	Экзамен
	Итого			42	44	0	

4.2 Содержание дисциплины

Тема 1. Специфика органических и элементоорганических молекул и их реакций

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Полиэдрические структуры и многоцентровые многоэлектронные связи - предмет элементоорганической химии химии. Сходство и различие органических и элементоорганических молекул.

Тема 2. Химические связи в органических и элементоорганических соединениях

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Способ описания химических связей. Двухцентровые двухэлектронные связи. Концепция электроотрицательности и полярность связей.

практическое занятие (2 часа(ов)):

Анализ полярности связей на основе величин электроотрицательностей.

Тема 3. Многоцентровые многоэлектронные связи в элементоорганических молекулах.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Типы лигандов в МОС. Правило 18 электронов. Характер связей в электронодефицитных молекулах. Донорно-акцепторные и дативные связи

Тема 4. Стереохимия органических и элементоорганических соединений.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Пространственная структура. Хиральность, эффекты групп, прогнозирование реакционной способности.

практическое занятие (3 часа(ов)):

Анализ сходства и различия барьеров вращения в органических и элементоорганических молекулах. Основные принципы конформационного анализа.

Тема 5. Интермедиаты в химических реакциях.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Карбокатионы, карбанионы, радикалы, ион-радикалы, цвиттер-ионы, бирадикалы. Структура. Факторы стабилизации.

практическое занятие (2 часа(ов)):

Кинетическая и термодинамическая стабилизация метастабильных элементоорганических молекул

Тема 6. Роль среды. Катализ в органических и элементоорганических реакциях

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Современная концепция сольватации. Общий и специфический кислотный и основной катализ. Кислоты Бренстеда и Льюиса, принцип ЖМКО.

практическое занятие (2 часа(ов)):

Принципы анализа жесткости и мягкости реакционных центров и прогнозирование реакционной способности на их основе.

Тема 7. Взаимосвязь электронной и пространственной структуры.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Заполнение валентных слоев. Теория отталкивания валентных электронных пар. Принцип изолобальной аналогии.

практическое занятие (3 часа(ов)):

Оценка возможности создания потенциальных элементоорганических систем на основе принципа изолобальности

Тема 8. Методы установления механизмов реакций. Критерии истинности механизма.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Понятия механизма, стадий и скоростьопределяющих стадий. Типы механизмов. Критерии согласованных и ступчатых механизмов.

практическое занятие (3 часа(ов)):

Подходы к анализу количественной взаимосвязи "структура - свойство"

Тема 9. Механизмы реакций нуклеофильного замещения у насыщенных центров.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Диссоциативные и ассоциативные процессы. Механизмы присоединения-элиминирования. Переходные состояния и интермедиаы. Роль строения нуклеофила и субстрата. Нуклеофильное замещение у атома кремния.

практическое занятие (3 часа(ов)):

Анализ возможности согласованного и ступенчатого течения реакций замещения в химии углерода и кремния.

Тема 10. Механизмы реакций нуклеофильного отщепления.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Факторы, определяющие реакционную способность. Структура субстрата и нуклеофила. Правила Зайцева и Гофмана.

практическое занятие (3 часа(ов)):

Синтез соединений низкокординированных фосфора и элементов IV группы на основе реакций отщепления.

Тема 11. Реакции карбонильных соединений.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Тетраэдрические интермедиаы, роль уходящей группы, катализ, омыление и этерификация.

Тема 12. Реакции электрофильного замещения.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Согласованные и двустадийные процессы. Реакции в ряду металлоорганических соединений. Прото- и галоиддеметаллирование.

практическое занятие (4 часа(ов)):

Сходство и различие реакций ароматического и алифатического электрофильного замещения.

Тема 13. Реакции электрофильного присоединения.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Стереохимия, правило Марковникова, смешанное присоединение. Сольвоаддукты. Симметричные и асимметричные циклические интермедиаты. Кинетика. Продуктоопределяющая стадия.

практическое занятие (4 часа(ов)):

Современное состояние оценки интермедиатов в реакциях электрофильного присоединения. Примеры смены механизма электрофильного и нуклеофильного типов.

Тема 14. Гомолитические реакции. Согласованные реакции. Циклоприсоединение.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Механизмы радикальных реакций замещения и присоединения. Электроциклические реакции. Согласованные и несогласованные процессы. Правило Вудворта-Гоффмана.

практическое занятие (2 часа(ов)):

Реакции циклоприсоединения в элементоорганическом ряду.

Тема 15. Молекулярные перегруппировки органических и элементоорганических соединений

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Секстетные перегруппировки, нуклеофильные и радикальные 1,2-пергруппировки. Аллильные пергруппировки, Перегруппировки непредельных и фосфорорганических соединений.

практическое занятие (4 часа(ов)):

Элементотропия и анализ механизмов элементотропных превращений.

Тема 16. Органических производные металлов 1 и 2 групп.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Строение и методы синтеза. Литий и натрийорганические соединения. Реакция Виттига. Магнийорганические соединения. Цинк- и ртутьорганические соединения.

практическое занятие (2 часа(ов)):

Уравнение Шленки и процессы ассоциации в химии ЭОС

Тема 17. Органические производных бора и алюминия.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Природа связи в димерах и мономерах. Специфика химических реакций. Гидрометаллирование. Карбоалюминирование. Использование в органическом синтезе.

практическое занятие (2 часа(ов)):

Реакция Судзуки и другие реакции сочетания

Тема 18. Органические производные элементов 4 группы.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Изменение свойств связи элемент-углерод в группе. Методы синтеза и основные реакции. Силоксаны, -азаны, -атраны, силикаты. Реакция Стилле.

практическое занятие (2 часа(ов)):

Гипервалентные соединения кремния и олова. Новые достижения в использовании ЭОС в органическом синтезе. Реакция Симмонса-Смита и аналогичные процессы кросс-сочетания

Тема 19. Органические производные переходных металлов.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Связь элемент - переходный металл, сигма-комплексы. Олефиновые комплексы катионов и ноль-валентных металлов. Использование в синтезе

практическое занятие (3 часа(ов)):

Промышленные процессы функционализации олефинов на металлоорганических катализаторах

Тема 20. Диеновые, циклопентадиенильные и ареновые комплексы.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Ферроцен и сэндвичевые структуры. Реакции металлоорганических ароматических систем. Активация металлом ароматических систем.

Тема 21. Промышленный металлокомплексный катализ.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Ацетиленовый лиганд. Основные реакции и области применения металлокомплексных катализаторов. Стереоконтролируемый катализ. Работы Нобелевских лауреатов 2000-х годов в области каталитических процессов.

4.3 Структура и содержание самостоятельной работы дисциплины (модуля)

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
1.	Тема 1. Специфика органически и элементоорганических молекул и их реакций	7	1	Изучение материалов лекций и рекомендованных источников	2	Интерактивный опрос
2.	Тема 2. Химические связи в органических и элементоорганических соединениях	7	1	подготовка к реферату	2	реферат
3.	Тема 3. Многоцентровые многоэлектронные связи в элементоорганических молекулах.	7	2	Проработка материала конспектов	2	Интерактивный опрос
4.	Тема 4. Стереохимия органических и элементоорганических соединений.	7	2	Изучение материала лекций и источников	2	Интерактивный опрос
5.	Тема 5. Интермедиаты в химических реакциях.	7	3	Изучение материала лекций и источников	3	Интерактивный опрос
6.	Тема 6. Роль среды. Катализ в органических и элементоорганических реакциях	7	3	подготовка к контрольной работе	3	контрольная работа
7.	Тема 7. Взаимосвязь электронной и пространственной структуры.	7	4	Изучение материала лекций и источников	5	Интерактивный опрос
8.	Тема 8. Методы установления механизмов реакций. Критерии истинности механизма.	7	4	Выдача письменных заданий для составления краткого реферата	6	Анализ характерных ошибок и интерактивный опрос по его результатам

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
9.	Тема 9. Механизмы реакций нуклеофильного замещения у насыщенных центров.	7	5	Изучение материала лекций и источников	5	Интерактивный опрос
10.	Тема 10. Механизмы реакций нуклеофильного отщепления.	7	5	подготовка к письменной работе	5	письменная работа
11.	Тема 11. Реакции карбонильных соединений.	7	6	подготовка к письменной работе	10	письменная работа
12.	Тема 12. Реакции электрофильного замещения.	7	6	Изучение материала лекции	2	Интерактивный опрос
13.	Тема 13. Реакции электрофильного присоединения.	7	7	Поиск оригинальных примеров в Инетрнете по предлагаемым вопросам	2	Интерактивный опрос
14.	Тема 14. Гомолитические реакции. Согласованные реакции. Циклоприсоединение.	7	7	Работа с источником, предлагаемым преподавателм	2	Интерактивный опрос
15.	Тема 15. Молекулярные перегруппировки органических и элементоорганических соединений	7	8	Анализ сходства и различия перегруппировок в ряду органических и элементоорганических соединений	2	Интерактивный прос
16.	Тема 16. Органических производные металлов1 и 2 групп.	7	8	Механизмы реакций замещения. Реакция Вюрца.	1	Устный опрос
17.	Тема 17. Органические производных бора и алюминия.	7	9	Органические производные бора и алюминия в органическом синтезе	1	Устный опрос
18.	Тема 18. Органические производные элементов 4 группы.	7	9	подготовка к письменной работе	1	письменная работа

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
19.	Тема 19. Органические производные переходных металлов.	7	10	Контрольная работа по индивидуальным заданиям	2	Проверка письменных работ и рецензия преподавателя
	Итого				58	

5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения

Интерактивный опрос, компьютерные презентации лекций, составление рефератов с использованием интернет-ресурсов

6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов

Тема 1. Специфика органически и элементоорганических молекул и их реакций

Интерактивный опрос, примерные вопросы:

Предмет элементоорганической химии. История возникновения химии ЭОС. Терминология в русско- и англоязычной литературе. ЭОС в природе и в промышленности. Статика и динамика элементоорганической химии. Стабилизация неустойчивых структур в координационной сфере переходных металлов

Тема 2. Химические связи в органических и элементоорганических соединениях

реферат, примерные темы:

Сходство и различие в природе связи в органических и элементоорганических молекулах. Полярные, ковалентные и многоцентровые многоэлектронные связи. Специфика стабилизации неустойчивых структур. ЭОС в промышленности и в природе.

Тема 3. Многоцентровые многоэлектронные связи в элементоорганических молекулах.

Интерактивный опрос, примерные вопросы:

Электронная структура электронодефицитных молекул и недостаточность концепции простых связей для ее описания. Концепция многоцентровых многоэлектронных связей для описания строения гидридов бора и органоаланов. Гипervalентность и концепция многоцентровых многоэлектронных связей как альтернатива участия вакантных орбиталей. Специфика связи лиганд-переходный металл.

Тема 4. Стереохимия органических и элементоорганических соединений.

Интерактивный опрос, примерные вопросы:

Понятия конституция, конфигурация и конформация молекул. Хиральность. Энантио- и диастереомерия. Барьеры вращения и конформации органических и элементоорганических молекул. Цис- - транс-изомерия. Соотношения конфигурационных и конформационных взаимопереходов. Конформация лигандов в ферроцене. Стереoeлектронные эффекты. Стереоселективность и стереоспецифичность. Принципы региохимии.

Тема 5. Интермедиаты в химических реакциях.

Интерактивный опрос, примерные вопросы:

Карбокатионы, карбанионы, свободные радикалы. Способы генерирования, структура, факторы стабилизации. Методы идентификации на основе спектральных данных. Метод химических ловушек. Роль интермедиатов в реализации механизмов реакций. Биполярные ионы и бирадикалы, их соотношение с полярностью связей. Анион-радикалы. Одноэлектронный перенос.

Тема 6. Роль среды. Катализ в органических и элементоорганических реакциях

контрольная работа , примерные вопросы:

Вопросы к контрольной работе 1. Органических производных щелочных металлов. Современный взгляд на механизм реакции Вюрца. 2. Многоцентровые многоэлектронные связи в гидридах бора 3. Специфика связей в гидридных и органильных производных алюминия.. 4. Электрофильное замещение в алифатическом ряду. Реакции прото- и галоиддеметаллирования 5. Изменение характера связи и свойств органических производных элементов IV группы (сравнение ?сверху ? вниз?). 6. Природа связи в органических производных переходных металлов. Теория Дьюара- Чатта -Данкинсона 7. ?Изменения? в химических свойствах координированного олефина по сравнению со ?свободным? 8. Особенности химических свойств координированных циклопентадиенилов и аренов

Тема 7. Взаимосвязь электронной и пространственной структуры.

Интерактивный опрос , примерные вопросы:

Принципы развития электронной структуры атомов в соответствии с Периодическим законом -кинетическая энергия, притяжение к ядру и отталкивание электронов. Принцип Паули. Теория отталкивания валентных электронных пар. Взаимосвязь между электронной и постространственной структур элементорганических молекул как функция положения атома в Периодической системе. Связь координационного числа и вида полиэдра. Фантом-лиганды. Правило изолобальной аналогии и ее предсказательная сила.

Тема 8. Методы установления механизмов реакций. Критерии истинности механизма.

Анализ характерных ошибок и интерактивный опрос по его результатам , примерные вопросы: Свод правил при выработке гипотезы механизма реакции. Кинетические и термодинамические критерии, стереохимические и электронные признаки механизма. Методы корреляционного анализа. Кинетический изотопный эффект. Полярность связи и прогноз реакционной способности. Хемо-, регио- и стереоселективность и специфичность.

Тема 9. Механизмы реакций нуклеофильного замещения у насыщенных центров.

Интерактивный опрос , примерные вопросы:

Ассоциативный, диссоциативный, ион-парный и пуш-пулльный механизмы. Признаки и критерии диссоциативного мономолекулярного механизма замещения. Кинетика, стереохимия, роль среды. Особенности бимолекулярного замещения. Вальденовское обращение. кинетика и термехимия. Роль природы заместителей и влияние растворителей. Механизм присоединения-элиминирования замещения у атома кремния.

Тема 10. Механизмы реакций нуклеофильного отщепления.

письменная работа , примерные вопросы:

Факторы, определяющие течение конкурентных процессов. Согласованные и несогласованные механизмы. Правило Гофмана и Зайцева и их объяснение с современных позиций. Реакции отщепления в элементорганическом ряду.

Тема 11. Реакции карбонильных соединений.

письменная работа , примерные вопросы:

Двустадийные реакции карбонильных соединений. Роль четырехкоординационных интермедиатов. Соотношение реакций присоединения и замещения. Основные реакции карбонильных соединений. Кислый и основной катализ. Реакции этерификации и омыления.

Тема 12. Реакции электрофильного замещения.

Интерактивный опрос , примерные вопросы:

Реакции электрофильного замещения в металлоорганическом ряду. Прото- и галоддеметаллирование алифатических МОС. Кинетика, стереохимия, природа заместителей. Внутренний катализ. Реакции протодеметаллирования и галоиддеметаллирования в ароматических МОС. Сходство и различие с реакциями электрофильного ароматического замещения. Корреляционный анализ в реакциях галоиддегермилирования и -станнирования.

Тема 13. Реакции электрофильного присоединения.

Интерактивный опрос , примерные вопросы:

Природа электрофила и алкена, влияние заместителей. Доказательство многостадийности и скорость определяющая стадия. Природа интермедиатов - ониевые ионы, открытые, симметричные и несимметричные циклические интермедиаты. Правило Марковникова. Перегруппировки карбокатионов. Сольвоаддукты. Роль заместителя в нуклеофиле в региохимии процесса. Би- и тримолекулярные реакции. Продуктоопределяющая стадия.

Тема 14. Гомолитические реакции. Согласованные реакции. Циклоприсоединение.

Интерактивный опрос , примерные вопросы:

Методы генерирования свободных радикалов. Анализ вероятных механизмов радикального замещения. Сходство и различие с гетеролитическими процессами. Радикальные реакции присоединения. Радикальные реакции ФОС. Классификация реакций циклоприсоединения. Правило Вудворта-Гоффмана. Несогласованные процессы. Биполярные ионы и бирадикалы как интермедиаты реакций циклоприсоединения

Тема 15. Молекулярные перегруппировки органических и элементоорганических соединений

Интерактивный опрос , примерные вопросы:

Секстетные перегруппировки гетеролитического типа. Перегруппировки Беккера, Хока, пинаколиновая. Перегруппировка Хараша. Аллильные перегруппировки, перегруппировка Клайзена. Перегруппировки в металлоорганическом ряду. Фосфорилотропные перегруппировки, вклад химиков Казани

Тема 16. Органических производные металлов 1 и 2 групп.

Устный опрос , примерные вопросы:

Активные металлоорганические соединения. Органические производные щелочных металлов. Синтез и строение. структура ассоциатов и многоцентровые многоэлектронные связи. Реакция Вюрца. Магнийорганические соединения. Цинкорганические соединения. Ртутьорганические соединения.

Тема 17. Органические производных бора и алюминия.

Устный опрос , примерные вопросы:

Гидриды бора и алюминия. Модели многоцентровых многоэлектронных связей в структуре боранов и аланов. Реакции гидрометаллирования. Карбоалюминирование. Органические соединения бора и алюминия в органическом синтезе.

Тема 18. Органические производные элементов 4 группы.

письменная работа , примерные вопросы:

Изменение характеристик связей элемент-углерод в группе. Методы синтеза и основные реакции. Реакции гидрометаллирования. Реакции электрофильного замещения в алифатическом и ароматическом ряду. Прото- и галоиддеметаллирование. Гетероатомные соединения. Силоксаны, элементаркарбены, элементаралокены. Гипervalентные соединения.

Тема 19. Органические производные переходных металлов.

Проверка письменных работ и рецензия преподавателя , примерные вопросы:

Природа связи металл-лиганд. Сигма-комплексы. Олефиновые катионные и нольвалентные комплексы. Влад сигма и пи-компонент связи. Реакционная способность координированного олефина. Диеновые и циклобутадиеновые комплексы. Циклопентадиенильные и ареновые комплексы. Ацетилен как лиганд. Изменение природы непредельных лигандов при координации с переходным металлом

Тема 20. Диеновые, циклопентадиенильные и ареновые комплексы.

Тема 21. Промышленный металлокомплексный катализ.

Итоговая форма контроля

экзамен (в 7 семестре)

Примерные вопросы к экзамену:

ВОПРОСЫ К ЭКЗАМЕНУ

Область химии элементоорганических соединений, ее место в ряду других химических дисциплин. Открытие, применение и практическое значение ЭОС. Общие и специфические свойства органических и элементоорганических молекул и их реакций.

Реакции нуклеофильного отщепления. Механизмы E1 и E2.

Теория отталкивания валентных электронных пар и ее применение для установления структуры молекул. Принцип изолабальной аналогии.

Литийорганические соединения.

Типы химических связей в органических и элементоорганических соединениях. Ионные и ковалентные связи, полярность, степень ионности, поляризуемость; закономерности изменения этих характеристик в зависимости от положения элемента в Периодической системе.

Общая характеристика органических производных элементов I группы (сравнительный анализ).

Многоцентровые многоэлектронные связи в металлоорганических соединениях, гидриде бора и диалкилборанах.

Нуклеофильное замещение в ароматическом ряду.

Связи металл-углерод в карбонилах металлов, олефиновых, аллильных, циклопентадиенильных и ареновых комплексах.

Реакции электрофильного присоединения.

Кратные связи элемент-углерод и элемент-элемент, пути стабилизации элементоалкенов и алкинов, сходство и различие с углерод-углеродными кратными связями.

Нуклеофильное замещение у насыщенного углерода; типы механизмов; сравнение с аналогичными реакциями соединений кремния.

Взаимосвязь пространственной и электронной структуры органических и элементоорганических молекул. Конституция, конфигурация и конформация. Зарядовое распределение, МО характеристики.

Органические соединения элементов IV группы. Сравнительный анализ строения и свойств соединений со связью углерод-элемент.

Многоцентровые связи в π -комплексах переходных металлов; правило 18 электронов.

S_N2 реакции у насыщенных центров.

Дативное и донорно-акцепторное взаимодействия в металлоорганических соединениях. Проблема участия d-орбиталей в образовании связей в элементоорганических молекулах.

Аллильные перегруппировки органических и элементоорганических молекул.

Структура и реакционная способность органических и элементоорганических молекул в приближении изолированной молекулы. Принцип Белла-Эванса-Поляни и постулат Хэммонда.

Диеновые, циклопентадиенильные и ареновые комплексы переходных металлов.

Типы интермедиатов в химических реакциях. Факторы их стабильности.

Ртутьорганические соединения; механизмы их наиболее характерных реакций.

Пути химических реакции; энергетические диаграммы, понятие поверхности потенциальной энергии, методы оценки структуры активированного комплекса.

Электрофильное ароматическое замещение.

Интермедиаты в гетеролитических реакциях. Карбанионы и карбокатионы: методы генерирования, обнаружения и идентификации. Факторы, определяющие стабильность.

Олефиновые комплексы переходных металлов.

Гомолитические реакции. Методы генерирования свободных радикалов, факторы стабильности, структура, методы обнаружения, механизмы основных реакций. Бирадикалы, карбены.

Органические соединения бора и алюминия. Структура, характер связей, механизмы основных реакций.

Влияние внешних факторов на реакционную способность органических и элементоорганических соединений. Современная теория сольватации.

Секстетные перегруппировки.

Катализ в органических реакциях. Кислотно ? основной катализ. Понятия о теориях Бренстеда и Льюиса. Принцип ЖМКО.

Механизмы электрофильного замещения в алифатическом ряду.

Основы корреляционного анализа и его применение для установления механизмов реакций.

Согласованные реакции. Механизм реакций циклоприсоединения. Правило Вудворта ? Гофмана.

Развитие электронной системы атомов в Периодической системе и современная интерпретация Периодического закона. Взаимосвязь электронной и пространственной структуры молекул. Теория отталкивания валентных электронных пар.

Механизмы радикальных реакций. Реакции замещения и присоединения.

Общий подход к изучению механизмов реакций. Основные понятия теории химических реакций. Критерии истинности. Методы изучения механизмов реакции.

Магнийорганические соединения.

Соотношение понятий переходного состояния, активированного комплекса и интермедиата химических реакций. Методы оценки их структуры.

Нуклеофильные реакции карбонильных соединений.

7.1. Основная литература:

1. Реутов, О.А. Органическая химия : в 4-х частях : учебник для студентов высших учебных заведений, обучающихся по направлению и специальности 'Химия' / О. А. Реутов, А. Л. Курц, К. П. Бутин .? 5-е изд. ? Москва : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2014 .? ; 22 см .? (Химия) .? ISBN 978-5-94774-611-2. Ч. 1 .? [2014] .? 566, [1] с. : ил.
2. Реутов, О.А. Органическая химия : в 4-х частях : учебник для студентов высших учебных заведений, обучающихся по направлению и специальности 'Химия' / О. А. Реутов, А. Л. Курц, К. П. Бутин .? 5-е изд. ? Москва : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2014 .? ; 22 см .? (Химия) .? ISBN 978-5-94774-611-2. Ч. 2 .? [2013] .? 622, [1] с. : ил.
3. Реутов, О.А. Органическая химия : в 4-х частях : учебник для студентов высших учебных заведений, обучающихся по направлению и специальности 'Химия' / О. А. Реутов, А. Л. Курц, К. П. Бутин ; Моск. гос. ун-т им. М. В. Ломоносова .? Москва : БИНОМ, Лаборатория знаний, 2014 .? ; 22 .? (Классический университетский учебник / ред. совет: В.А. Садовничий [и др.]) .Ч. 3 .? 2-е изд. ? [2014] .? 543, [1] с.
4. Эльшенбройх К. Металлоорганическая химия [Электронный ресурс] : . ? Электрон. дан. ? М. : 'Лаборатория знаний' (ранее 'БИНОМ. Лаборатория знаний'), 2014. ? 745 с. ? Режим доступа: http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=50536 ? Загл. с экрана.
5. Семчиков Ю. Д. Введение в химию полимеров [Электронный ресурс] : учебное пособие / Семчиков Ю. Д., Жильцов С. Ф., Зайцев С. Д. ? Электрон. дан. ? СПб. : Лань, 2014. ? 223 с. ? Режим доступа: http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=4036 ? Загл. с экрана.
6. Кленин В.И., Федусенко И.В. Высокомолекулярные соединения: учебник. [Электронный ресурс] - 2-е изд., испр. - Санкт-Петербург, 2013. - 512 с.
Режим доступа:http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_cid=25&pl1_id=5842
7. Туб М. Механизмы неорганических реакций /М. Туб, Дж. Берджесс ; пер. с англ. -Эл. изд. - М. : БИНОМ.Лаборатория знаний, 2012. - 678 с.
http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=8697

7.2. Дополнительная литература:

1. Реутов, О.А. Органическая химия. 4 ч. [Электронный ресурс] : учебник / О.А. Реутов, А.Л. Курц, К.П. Бутин. ? Электрон. дан. ? М. : 'Лаборатория знаний' (ранее 'БИНОМ. Лаборатория знаний'), 2013. ? 728 с. ? Режим доступа: http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=3155 ? Загл. с экрана.
2. Нанобиотехнологии : практикум / под ред. А. Б. Рубина. - М. : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2013. - 384 с. Режим доступа: http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=3130
3. Семчиков, Ю.Д. Высокомолекулярные соединения: учеб. для студентов вузов, обучающихся по спец. 011000 'Химия' и направлению 510500 'Химия' / Ю.Д. Семчиков. ?3-е изд., стер..?Москва: Академия, 2006.?366, [1] с

7.3. Интернет-ресурсы:

гид в области металлорганической химии -

<http://www.freebookcentre.net/Chemistry/OrganoMetallic-Chemistry-Books.html>

интернет-лекции по химии элементоорганических соединений -

<http://www.scs.uiuc.edu/white/index.php?p=lectures>

каталог литературы по металлорганической химии -

<http://web.uvic.ca/~mcindoe/423/423syllabus.html>

мировые новости в химии элементоорганических соединений -

http://www.chemport.ru/chemnews.php?tag=elementorganic_chemistry

словарь терминов металлорганической химии - <http://www.ilpi.com/organomet/>

электронная библиотечная система -

http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_cid=25&pl1_id=4036

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины(модуля)

Освоение дисциплины "Теоретические основы органической и элементоорганической химии" предполагает использование следующего материально-технического обеспечения:

Мультимедийная аудитория, вместимостью более 60 человек. Мультимедийная аудитория состоит из интегрированных инженерных систем с единой системой управления, оснащенная современными средствами воспроизведения и визуализации любой видео и аудио информации, получения и передачи электронных документов. Типовая комплектация мультимедийной аудитории состоит из: мультимедийного проектора, автоматизированного проекционного экрана, акустической системы, а также интерактивной трибуны преподавателя, включающей тач-скрин монитор с диагональю не менее 22 дюймов, персональный компьютер (с техническими характеристиками не ниже Intel Core i3-2100, DDR3 4096Mb, 500Gb), конференц-микрофон, беспроводной микрофон, блок управления оборудованием, интерфейсы подключения: USB, audio, HDMI. Интерактивная трибуна преподавателя является ключевым элементом управления, объединяющим все устройства в единую систему, и служит полноценным рабочим местом преподавателя. Преподаватель имеет возможность легко управлять всей системой, не отходя от трибуны, что позволяет проводить лекции, практические занятия, презентации, вебинары, конференции и другие виды аудиторной нагрузки обучающихся в удобной и доступной для них форме с применением современных интерактивных средств обучения, в том числе с использованием в процессе обучения всех корпоративных ресурсов. Мультимедийная аудитория также оснащена широкополосным доступом в сеть интернет. Компьютерное оборудование имеет соответствующее лицензионное программное обеспечение.

Компьютерный класс, представляющий собой рабочее место преподавателя и не менее 15 рабочих мест студентов, включающих компьютерный стол, стул, персональный компьютер, лицензионное программное обеспечение. Каждый компьютер имеет широкополосный доступ в сеть Интернет. Все компьютеры подключены к корпоративной компьютерной сети КФУ и находятся в едином домене.

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе "КнигаФонд", доступ к которой предоставлен студентам. Электронно-библиотечная система "КнигаФонд" реализует легальное хранение, распространение и защиту цифрового контента учебно-методической литературы для вузов с условием обязательного соблюдения авторских и смежных прав. КнигаФонд обеспечивает широкий законный доступ к необходимым для образовательного процесса изданиям с использованием инновационных технологий и соответствует всем требованиям новых ФГОС ВПО.

компьютерный класс, ноутбук

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО и учебным планом по специальности: 04.05.01 "Фундаментальная и прикладная химия" и специализации Химия элементоорганических соединений .

Автор(ы):

Черкасов Р.А. _____

"__" _____ 201__ г.

Рецензент(ы):

Гарифзянов А.Р. _____

"__" _____ 201__ г.