

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Федеральное государственное автономное учреждение
высшего профессионального образования
"Казанский (Приволжский) федеральный университет"
Химический институт им. А.М. Бутлерова

УТВЕРЖДАЮ
Проректор по научной деятельности КФУ
Проф. Д.К. Нургалиев
" 20/4 г.



Программа дисциплины

Б1.В.ОД.7 Органическая химия

Направление подготовки 04.06.01 – Химические науки

Профиль подготовки: 02.00.03 – Органическая химия

Квалификация выпускника «Исследователь. Преподаватель-исследователь»

Форма обучения: очная

Язык обучения: русский

Аннотация

1. Цели освоения дисциплины

Цель изучения дисциплины (модуля) "Органическая химия" – углубить теоретические знания аспирантов по проблемам органической химии, в первую очередь, в области структуры и синтеза основных классов органических соединений; создать теоретическую базу для проведения экспериментального исследования.

Целями освоения дисциплины являются:

- подготовка научных и научно-педагогических кадров высшей квалификации для решения проблем органической химии в науке и производстве рамках профиля научной специальности 02.00.03 – «Органическая химия» (направления 04.06.01 Химические науки);
- формирование навыков самостоятельной научно-исследовательской деятельности в области органической химии;
- знание структуры, свойств и механизмов химических реакций основных классов органических соединений;
- владение основными концепциями и современными теоретическими принципами органической химии.

Изучение дисциплины «Органическая химия» способствует подготовке к успешной сдаче кандидатского экзамена по профилю «Органическая химия».

2. Место дисциплины в структуре программы аспирантуры

Дисциплина «Органическая химия» (Б1.В.ОД.7) включена в раздел Б1.В.ОД «Обязательные дисциплины» основной профессиональной образовательной программы высшего образования – программы подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре. Освоение курса "Органическая химия" необходимо для сдачи кандидатского экзамена по органической химии.

3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины (модуля) в соответствии с ФГОС ВО программ подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре

Знать:

- задачи, принципы, методы и проблемы современной органической химии;
- основы классификации и номенклатуры (ИЮПАК, рациональной) органических соединений;
- основные теоретические представления в органической химии,
- основные химические свойства и взаимные превращения основных классов органических соединений.

Уметь:

- использовать полученные знания в собственном химическом эксперименте;
- анализировать зависимость “структура–свойство”, планировать синтетическую часть диссертационной работы;
- составлять схему многостадийного синтеза нужного препарата, пользоваться справочной, обзорной литературой, базами данных в области органической химии.

Владеть:

- основными концепциями современной органической химии;
- способностью планировать синтетический эксперимент;
- методами органического синтеза для осуществления собственного исследования.

В результате освоения дисциплины формируются компетенции:

Индекс компетенции	Расшифровка компетенции
УК-1	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-2	способность проектировать и осуществлять комплексные исследования, в том числе междисциплинарные, на основе целостного системного научного мировоззрения с использованием знаний в области истории и философии науки
ОПК-1	способностью самостоятельно осуществлять научно- исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий
ОПК-3	готовностью к преподавательской деятельности по основным образовательным программам высшего образования
ПК-1	умением применять основные законы химии при обсуждении полученных результатов, в том числе с привлечением информационных баз данных
ПК-2	Способностью анализировать полученные результаты, делать необходимые выводы и формулировать предложения
ПК-3	владением методами планирования, регистрации и обработки результатов химического эксперимента, основными синтетическими и аналитическими методами получения и исследования химических веществ и реакций
ПК-4	Владением современными компьютерными технологиями, применяемыми при обработке результатов научных экспериментов и сборе, обработке, хранении и передаче информации при проведении самостоятельных научных исследований
ПК-5	Формированием опыта профессионального участия в научных дискуссиях, умением представлять полученные в исследованиях результаты в виде отчетов и научных публикаций
ПК-6	Способностью организовать и проводить исследования в рамках химических и смежных специальностей

4. Структура и содержание дисциплины (модуля)

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетных единиц 108 часов.

Лекции – 36, самостоятельная работа -72.

Форма аттестации по дисциплине: экзамен в 5 семестре.

	Раздел дисциплины	Семестр	Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	Самостоятельная работа
1.	Тема 1. Современные представления о строении и природе химической связи.	5	2			4

2.	Тема 2. Пространственное строение органических молекул.	5	2			4
3.	Тема 3. Общие принципы реакционной способности органических соединений.	5	4			8
4.	Тема 4. Контрольная работа 1.	5	2			4
5.	Тема 5. Принципы современного органического синтеза и установления строения органических соединений.	5	4			8
6.	Тема 6. Синтетические методы в органической химии и химические свойства основных классов органических соединений. I. Алифатические углеводороды.	5	4			8
7.	Тема 7. Синтетические методы в органической химии и химические свойства основных классов органических соединений. II. Ароматические углеводороды.	5	3			6
8.	Тема 8. Синтетические методы в органической химии и химические свойства основных классов органических соединений. III. Галоген и кислород-содержащие соединения.	5	4			8
9.	Тема 9. Синтетические методы в органической химии и химические свойства основных классов органических соединений. IV. Азотсодержащие соединения.	5	3			6
10.	Тема 10. Контрольная работа 2.	5	2			4
11.	Тема 11. Методы синтеза и реакции ароматических гетероциклических соединений.	5	6			12

4.2 Содержание дисциплины

Тема 1. Современные представления о строении и природе химической связи.

Предмет органической химии и связь с другими химическими науками, биологией, медициной. Формирование и основные положения теории строения органических соединений. Структурные представления Купера, Кекуле, теория химического строения А.М.Бутлерова.

Электронные представления о природе связей. Электронные эффекты.

Приближение МО-ЛКАО. Метод МО Хюккеля и более строгие квантово-химические методы расчета. Теория возмущений МО. Метод граничных орбиталей. Зарядовый и орбитальный контроль органических реакций.

Понятие о резонансе (сопряжении) в классической и квантовой химии. Сопряжение в методе МО Хюккеля. Концепция ароматичности. Правило Хюккеля. Мезоионные соединения. Антиароматичность.

Тема 2. Пространственное строение органических молекул.

Структурные формулы как средство отображения строения органических соединений. Изомерия, гомология, изология. Структурная изомерия и ее разновидности.

Стереохимия: понятия о конфигурации и конформации. Конформационный анализ. Молекулярные модели. Способы изображения пространственных структур (проекционные формулы Фишера, Ньюмена и т.д.). Факторы, определяющие энергию конформеров. Связь конформации и реакционной способности. Принцип Кертина—Гаммета.

Стерический и стереоэлектронный контроль реакций. Стереоселективность и стереоспецифичность. Энантиомерия. Асимметрия и хиральность. Атропоизомерия. Эквивалентные, энантиотопные и диастереотопные группы; их проявление в химическом поведении молекул в хиральных и ахиральных средах и спектрах ЯМР.

Способы получения и разделения энантиомеров. Оптическая чистота и методы ее определения. Определение абсолютной и относительной конфигурации.

Тема 3. Общие принципы реакционной способности органических соединений.

Классификация реакций по типу образования и разрыва связей в лимитирующей стадии, по типу реагента и по соотношению числа молекул реагентов и продуктов.

Теория переходного состояния. Гиперповерхность потенциальной энергии, координата и энергетический профиль реакции. Термодинамические параметры активации. Кинетические уравнения основных типов реакций. Методы экспериментального изучения кинетики и механизмов реакций.

Эмпирический (экстратермодинамический) подход к реакционной способности. Корреляционные уравнения, принцип линейности свободных энергий Гиббса. Уравнения Гаммета и Тафта. Связь параметров корреляционных уравнений с механизмом реакций.

Принцип ЖМКО; его обоснование на основе теории возмущений МО.

Кислоты Бренстеда и Льюиса. Кислотно-основное равновесие. Понятие рН. Кинетическая и термодинамическая кислотность. Уравнение Бренстеда. Общий и специфический кислотно-основной катализ. Постулат Гаммета.

Тема 4. Контрольная работа 1. Теоретические основы органической химии.

Тема 5. Принципы современного органического синтеза и установления строения органических соединений.

Использование химических и физико-химических методов для установления структуры органических соединений. Спектроскопия ЯМР, ЭПР, колебательная и электронная спектроскопия, масс- и хромато-масс-спектрометрия. Газожидкостная и жидкостная хроматография, ионообменная и гельпроникающая хроматография, электрофорез. Рентгеноструктурный анализ и электронография. Рефрактометрия.

Тема 6. Синтетические методы в органической химии и химические свойства основных классов органических соединений. I. Алифатические углеводороды.

Гомологический ряд алканов: реакции, протекающие с гомолитическим разрывом связи. Механизм цепных свободно-радикальных реакций замещения в алканах (галогенирование, сульфохлорирование, нитрование, окисление). Факторы, определяющие стабильность свободных радикалов. Связь между стабильностью и селективностью в реакциях свободно-радикального замещения.

Основные типы механизмов в химических превращениях алкенов. Реакции электрофильного присоединения кислот, галогеноводородов, воды, галогенов. Регио- и стереоселективность электрофильного присоединения. Реакции радикального присоединения. Перекисный эффект (Караша-Майо) и обращение ориентации присоединения галогеноводородов как результат изменения механизма реакции. Координация олефинов с переходными металлами, образование π -комплексов. Гидроборирование и каталитическое гидрирование. Окислительные реакции: эпоксилирование, цис-, транс-гидроксилирование, озонлиз, окислительное расщепление. Катионная, свободнорадикальная и координационная полимеризация алкенов, теломеризация. Реакции алкенов по аллильному положению: галоидирование, окисление.

Химические свойства алкинов: каталитическое гидрирование, гидратация (реакция Кучерова), карбоксилирование, присоединение спиртов, карбоновых кислот, галогенов, галогеноводородов. Электрофильный и нуклеофильный механизмы присоединения. Димеризация и циклоолигомеризация алкинов. Окислительные превращения ацетиленов. Кислотные свойства алкинов-1, ацетилениды металлов.

Тема 7. Синтетические методы в органической химии и химические свойства основных классов органических соединений. II. Ароматические углеводороды.

Реакции ароматического электрофильного замещения: изотопный обмен, сульфирование, нитрование, галоидирование, алкилирование, ацилирование. Особенности ацилирования фенолов, перегруппировка Фриса. Формилирование по Гаттерману-Коху, Гаттерману и Вильсмейеру. Синтетическое использование реакций электрофильного замещения в ароматическом ряду.

Механизм реакции: π - и σ -комплексы. Протонные кислоты и кислоты Льюиса как катализаторы электрофильного замещения. Влияние заместителей в бензольном кольце на изомерный состав продуктов и скорость реакции. Правила ориентации.

Реакции радикального замещения и присоединения. Алкилбензолы. Реакции радикального замещения в боковой цепи, бензильная π -система.

Тема 8. Синтетические методы в органической химии и химические свойства основных классов органических соединений. III. Галоген и кислород-содержащие соединения.

Химические свойства галогенпроизводных: нуклеофильное замещение атомов галогенов, представления о механизмах SN_1 , SN_2 . Реакции отщепления, правило Зайцева. Комплексообразование галогеналканов с ионами металлов и кислотами Льюиса. Восстановление галогеналканов водородом и йодистым водородом. Взаимодействие с металлами: образование металлорганических соединений, реакция Вюрца.

Химические свойства спиртов: кислотные свойства, получение алкоголятов и их использование в органическом синтезе, замещение гидроксильной группы, дегидратация. Эфирирование: простые и сложные эфиры. Присоединение спиртов к ацетиленам. Окисление и дегидрирование спиртов. Многоатомные спирты: окисление йодной кислотой,

взаимодействие с борной кислотой, превращение в α -окиси, дегидратация, pinaколиновая перегруппировка, образование комплексов с ионами металлов, дегидратация.

Реакции нуклеофильного присоединения по карбонильной группе. Взаимодействие с гетероатомными O, S, N, C-нуклеофилами. Механизм этих реакций, кислотный и основной катализ. Кето-енольная таутомерия и связанные с ней свойства карбонильных соединений: галогенирование и галоформное расщепление, алкилирование. Альдольно-кетоновая конденсация, конденсации с соединениями, содержащими активную метиленовую группу.. Каталитическое гидрирование, восстановление комплексными гидридами металлов, спиртами в присутствии алкоголятов алюминия, цинком в соляной кислоте. Восстановление кетонов металлами с образованием металлкетиллов и pinaконов. Реакции Канницарро, Тищенко. Бензоиновая конденсация.

Производные карбоновых кислот: соли, сложные эфиры, галогенангидриды, ангидриды, амиды, нитрилы. Соли: реакция декарбокислирования и ее каталитические варианты, анодное окисление карбоксилат-анионов (реакция Кольбе), действие галогенов на серебряные соли (реакция Бородин-Хундикера). Галогенангидриды: реакции с нуклеофилами и использование хлорангидридов в качестве ацилирующих реагентов. Сложные эфиры: каталитическое гидрирование, восстановление комплексными гидридами металлов. Реакции гидролиза (омыления), переэтерификации и сложноэфирной конденсации. Ангидриды карбоновых кислот: реакции с нуклеофилами (ацилирование). Амиды: кислотные-основные свойства, основные пути превращения в амины (восстановление, реакция Гофмана и родственные ей превращения гидразидов, азидов и гидроксамовых кислот). Взаимопревращения амидов и нитрилов. Свойства нитрилов: каталитическое гидрирование, восстановление алюмогидридом лития, реакции с магниорганическими соединениями.

Тема 9. Синтетические методы в органической химии и химические свойства основных классов органических соединений. IV. Азотсодержащие соединения.

Нитроалканы. Синтез из алкилгалогенидов. Кислотность и таутомерия нитроалканов. Конденсация с карбонильными соединениями (Анри). Восстановление в амины. Превращение вторичных нитроалканов в кетоны (Мак-Марри).

Методы получения аминов: алкилирование аммиака и аминов по Гофману, фталимида калия (Габриэль), восстановление азотсодержащих производных карбонильных соединений и карбоновых кислот, нитросоединений, алкилазидов. Перегруппировки Гофмана и Курциуса. Синтез аминов с третичным алкильным радикалом (Риттер), взаимодействие альдегидов и кетонов с формиатом аммония (Лейкарт).

Реакции аминов. Алкилирование и ацилирование. Термическое разложение гидроксидов тетраалкиламмония по Гофману. Окисление третичных аминов до N-оксидов, их термолиз (Коуп). Получение нитронов из N,N-диалкилгидроксиаминов. Реакции [3+2]-циклоприсоединения нитронов (образование пятичленных азотистых гетероциклов).

Тема 10. Контрольная работа 2. Химические свойства основных классов органических соединений.

Тема 11. Методы синтеза и реакции ароматических гетероциклических соединений.

Пятичленные гетероциклы с одним гетероатомом. Фуран, пиррол, тиофен. Синтез из 1,4-дикарбонильных соединений (Пааль—Кнорр). Синтез пирролов по Кнорру и по Ганчу. Синтез 3,4-дизамещенных тиофенов по Хинсбергу. Реакции электрофильного замещения в пятичленных ароматических гетероциклах: нитрование, сульфирование, галогенирование, формилирование, ацилирование. Индолл. Синтез производных индола из фенилгидразина и кетонов (Фишер). Синтез индола и его производных из 2-аминаминутолуолов (Маделунг).

Реакции электрофильного замещения в пиррольном кольце индола: нитрование, формилирование, галогенирование.

Шестичленные ароматические гетероциклы с одним гетероатомом. Пиридин и хинолин. Синтез производных пиридина по Ганчу. Синтез частично гидрированных производных пиридина путем [4+2]-циклоприсоединения (гетеро-реакция Дильса—Альдера). Синтез хинолина и замещенных хинолинов из анилинов по Скраупу и Дебнеру—Миллеру. Реакции пиридина и хинолина с алкилгалогенидами. Окисление и восстановление пиридина и хинолина. Реакции электрофильного замещения в пиридине и хинолине: нитрование, сульфирование, галогенирование. N-окиси пиридина и хинолина и их использование в реакции нитрования. Нуклеофильное замещение атомов водорода в пиридине и хинолине в реакциях с амидом натрия (Чичибабин) и фениллитием. 2- и 4-метилпиридины и хинолины как метиленовые компоненты в конденсациях с альдегидами.

5. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

На лекциях:

- компьютерные презентации лекций;

На практических занятиях:

- контрольная работа по темам 1-3;
- контрольная работа по темам 5-9.

6. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЯ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ ОБУЧАЮЩИХСЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ (МОДУЛЮ)

САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА АСПИРАНТОВ (СРА) включает следующие виды работ:

- изучение теоретического лекционного материала, подготовка к интерактивному опросу по материалам лекций;
- проработка теоретического материала (конспекты лекций, основная и дополнительная литература);
- проведение имитационного симулирования с использованием бесплатных версий программ в Интернет;
- подготовка к зачету.
- поиск информации по интернет-ресурсам, знакомство с новыми публикациями по теме собственных научных исследований.

Практические занятия – не предусмотрены.

7. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ

7.1. Оценочные средства текущего контроля

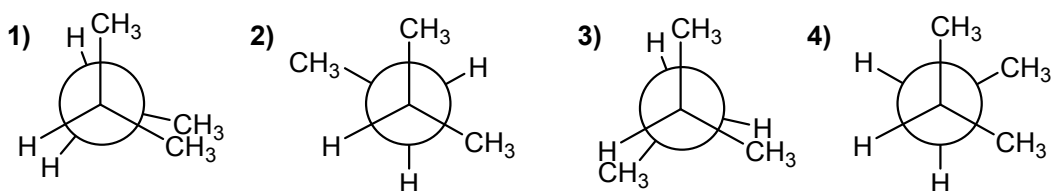
Контрольная работа 1. Теоретические основы органической химии.

Примеры контрольных заданий.

1. Непредельные соединения, в молекулах которых заместитель при двойной связи проявляет отрицательный индуктивный эффект

- 1) хлористый аллил; 2) бутен-1; 3) пропеналь; 4) этенамин; 5) виниллитий

2. Последовательность расположения экстремальных конформаций 2-метилбутана в порядке увеличения их стабильности

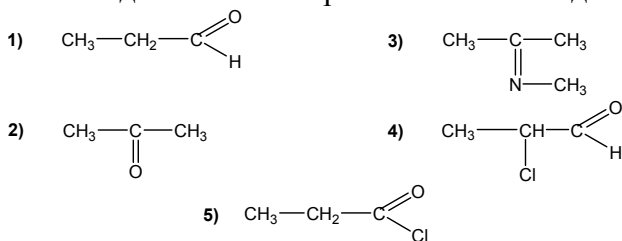


3. Последовательность расположения радикалов в порядке увеличения их стабильности:
 1) бензильный; 2) метильный; 3) *tert*-бутильный; 4) 2-фенилэтильный; 5) втор-бутильный

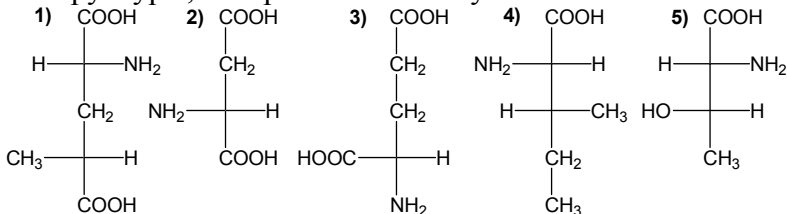
4. Установите соответствие между анионами и типами электронных эффектов, с помощью которых заместители (выделены жирным шрифтом) влияют на анионный центр :

- 1) $\text{NO}_2\text{-CH=CH-CH=CH-COO}^\ominus$ А) + М
- 2) $\text{Cl-CH=CH-CH=CH-COO}^\ominus$ Б) - М
- 3) $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-}\underset{\text{NH}_2}{\text{CH}}\text{-COO}^\ominus$ В) + I
- 4) $\text{CH}_3\text{-CH}_2\text{-}\underset{\text{CH}_3}{\text{CH}}\text{-COO}^\ominus$ Г) - I

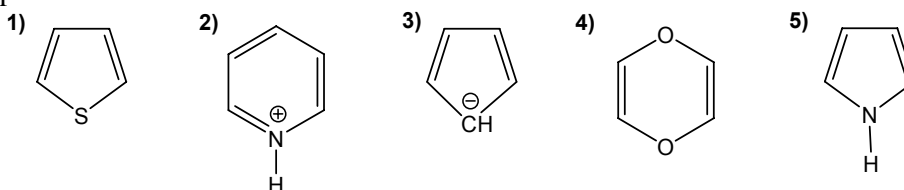
5. Последовательность расположения соединений в порядке увеличения их электрофильности:



6. Структуры, которые соответствуют L-аминокислотам



7. К ароматическим системам не относится

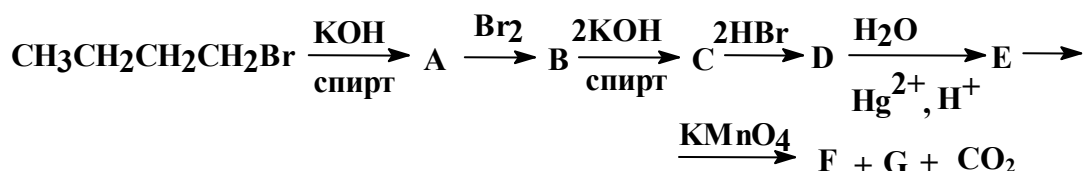


Контрольная работа 2. Химические свойства основных классов органических соединений.

Примеры контрольных заданий.

Билет N1

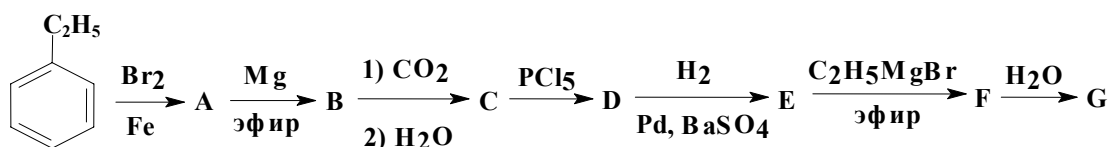
- Взяв в качестве исходного вещества изобутиловый спирт, получите 2-метилпропандиол-1,2.
- В каком порядке изменяется подвижность брома в реакциях, проходящих по механизму S_N1 и S_N2 , в следующих соединениях: а) 5-бром-2-метилпентан, б) 3-бром-2-метилпентен-2, в) 4-бром-2-метилбутен-2? Приведите соответствующие пояснения.
- Напишите формулы конечных и промежуточных продуктов реакций:



4. Напишите схемы получения бутанола-2 из указанных соединений: а) 2-хлорбутана; б) бутена-1; в) бутанона-2; г) бутина-2, д) уксусного альдегида, е) пропионового альдегида.

Билет N2

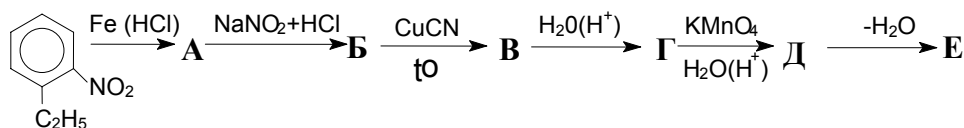
1. Напишите реакции хлорангидрида 2-метилпропионовой кислоты с: а) бензолом (AlCl₃); б) хлором; в) NaOH, г) пропанолом-2; д) диэтиламином.
2. Получите нитрил 2-этилбутановой кислоты из малонового эфира и этилена, используя любые другие неорганические реагенты.
- 3.



4. Расположите в порядке возрастания кислотности следующие карбоновые кислоты: а) CH₃COOH, б) CH₃-CH₂-COOH, в) HOOC-COOH, г) ClCH₂-CH₂-COOH, д) ClCH₂-COOH. Дайте соответствующие пояснения.

Билет N3

1. Напишите реакции бензиламина с: а) соляной кислотой; б) NaNO₂+HCl; в) иодистым метилом г) уксусным ангидридом; д) диэтикетонном.
2. Получите из бензола 3,5-дибромфенилгидразин. Проведите реакцию его конденсации с ацетоном.
3. Осуществите следующую цепь превращений:



4. Расположите в порядке возрастания активности (скорости) в реакциях азосочетания с 2,4-динитрофенилдиазоний хлоридом нижеприведенные соединения: а) 4-метилфенол; б) анилин; в) нитробензол; г) бензол; д) 4-аминофенол. Напишите схемы реакций и дайте пояснения.

7.2. Оценочные средства итогового контроля

Вопросы программы кандидатского экзамена по специальности 02.00.03 «Органическая химия»

1.1. Современные представления о природе химической связи.

Электронные представления о природе связей. Типы связей в органической химии.

Гибридизация атомов углерода и азота. Электронные эффекты. Электроотрицательность атомов и групп.

Основные положения квантовой химии. Атомные и молекулярные орбитали. Приближение МО-ЛКАО. Метод МО Хюккеля и более строгие квантово-химические методы расчета. Понятие о полуэмпирических методах, основанных на приближении Хартри—Фока (MNDO, AM1, PM3 и др.). Методы ab initio. Метод функционала плотности (DFT). Компромиссные подходы

(локализованные связи, гибридизация, частичный учет делокализации электронов на примере - - приближения).

Теория возмущений МО. Возмущения первого и второго порядков. Индексы реакционной способности. Метод граничных орбиталей. Зарядовый и орбитальный контроль органических реакций.

Понятие о резонансе (сопряжении) в классической и квантовой химии. Сопряжение в методе МО Хюккеля. Концепция ароматичности. Правило Хюккеля. Мезоионные соединения. Антиароматичность.

1.2. Стереохимия. Пространственное строение органических молекул. Пространственное взаимодействие несвязанных атомов и групп, ван-дер-ваальсовы радиусы.

Понятие о конформации молекулы. Вращение вокруг связей: величины и симметрия потенциальных барьеров. Факторы, определяющие энергию конформеров. Влияние эффектов сопряжения на стабильность конформеров. Номенклатура конформеров. Угловое напряжение и другие типы напряжения в циклических системах. Средние циклы и трансаннулярные взаимодействия. Инверсия циклов и азотсодержащих соединений.

Связь конформации и реакционной способности. Принцип Кертина—Гаммета. Стерический и стереоэлектронный контроль реакций. Стереоселективность и стереоспецифичность.

Пространственное строение этиленовых и диеновых систем. Номенклатура геометрических изомеров. Конформация диенов и триенов. Атропоизомерия.

Энантиомерия. Асимметрия и хиральность. Эквивалентные, энантиотопные и диастереотопные группы; их проявление в химическом поведении молекул в хиральных и ахиральных средах и спектрах ЯМР. Номенклатура оптических антиподов. Неуглеродные атомы как центры хиральности.

Способы получения и разделения энантиомеров. Оптическая чистота и методы ее определения. Определение абсолютной и относительной конфигурации. Понятие о дисперсии оптического вращения и круговом дихроизме.

2. Общие принципы реакционной способности

2.1. Классификация реакций по типу образования и разрыва связей в лимитирующей стадии, по типу реагента и по соотношению числа молекул реагентов и продуктов.

Теория переходного состояния. Гиперповерхность потенциальной энергии, координата и энергетический профиль реакции. Термодинамические параметры активации. Кинетические уравнения основных типов реакций. Методы экспериментального изучения кинетики и механизмов реакций. Метод стационарного состояния (принцип Боденштейна). Постулат Хэммонда.

Эмпирический (экстратермодинамический) подход к реакционной способности.

Корреляционные уравнения, принцип линейности свободных энергий Гиббса. Уравнения Гаммета и Тафта. Связь параметров корреляционных уравнений с механизмом реакций.

Принцип ЖМКО; его обоснование на основе теории возмущений МО.

2.2. Количественная теория кислот и оснований. Кислоты Бренстеда и Льюиса. Кислотно-основное равновесие. Понятие рН. Кинетическая и термодинамическая кислотность. Уравнение Бренстеда. Общий и специфический кислотно-основный катализ. Супер-кислоты. Функции кислотности. Постулат Гаммета.

2.3. Влияние среды на скорости и равновесие органических реакций. Специфическая и неспецифическая (универсальная) сольватация. Клеточный эффект. Водородная связь. Классификация и шкалы параметров растворителей. Влияние сольватации на скорость и равновесие органических реакций. Уравнения Уинштейна и Грюнвальда, Копеля-Пальма. Кислотность и основность в газовой фазе.

Ассоциация ионов. Типы ионных пар и доказательства их существования. Влияние ассоциации ионов на их реакционную способность. Уравнение Акри.

Межфазный катализ. Краун-эфиры, криптанды, поданды, катализаторы межфазного переноса.

Понятие о супрамолекулярной химии.

2.4. Основные типы интермедиатов.

Карбениевые ионы (карбокатионы). Генерация карбокатионов в растворах и в газовой фазе. Влияние структурных и сольватационных факторов на стабильность карбокатионов. Строение карбокатионов. Понятие о неклассических ионах. Основные типы реакций карбокатионов и области их синтетического использования. Скелетные перегруппировки и гидридные сдвиги в карбокатионах.

Карбанионы и СН-кислоты. Влияние структурных и эффектов среды на стабилизацию карбанионов. Основные реакции карбанионов, анионные перегруппировки. Амбидентные и полиидентные анионы. Карбены. Электронная структура, синглетное и триплетное состояние карбенов. Методы генерации карбенов и использование их в органическом синтезе. Нитрены, их генерация, строение и свойства.

Свободные радикалы и ион-радикалы. Методы генерирования радикалов. Электронное строение и факторы стабилизации свободных радикалов. Типы стабильных свободных радикалов. Основы методов ЭПР и ХПЯ. Катион- и анион-радикалы. Методы генерирования и свойства. Основные реакции ион-радикалов. Комплексы с переносом заряда.

3. Основные типы органических реакций и их механизмы

3.1. Нуклеофильное замещение в алифатическом ряду. Механизмы SN1 и SN2, смешанный ионно-парный механизм. Влияние структуры субстрата и полярности растворителя на скорости и механизм реакции. Анхимерное содействие и синергетическое ускорение, участие соседних групп, перегруппировки в ходе нуклеофильного замещения. Корреляционные уравнения Суэйна—Скотта и Эдвардса.

3.2. Нуклеофильное замещение при кратной углерод-углеродной связи и в ароматическом ядре. Типичные механизмы нуклеофильного замещения у sp²-гибридного атома углерода. Винильный катион. Моно- и бимолекулярные процессы нуклеофильного замещения в ароматическом ряду. Катализ переходными металлами. Нуклеофильное замещение в нитропроизводных бензола. Нуклеофильное замещение водорода (викариозное замещение). Комплексы Мейзенгеймера. Нуклеофильное замещение в ароматических гетероциклах. Кине-замещение.

3.3. Электрофильное замещение у атома углерода. Механизмы замещения SE1, SE2, SEi. Нуклеофильный катализ электрофильного замещения. Влияние структуры субстрата и эффектов среды на скорость и направление реакций. Замещение у олефинового атома углерода и в ароматическом кольце. Генерирование электрофильных реагентов. Правила ориентации и их молекулярно-орбитальная интерпретация. Электрофильное замещение других групп, кроме водорода. Ипсо-замещение. Кинетические изотопные эффекты.

3.4. Реакции элиминирования (отщепления). Механизмы гетеролитического элиминирования E1 и E2. Стереoeлектронные требования и стереоспецифичность при E2-элиминировании. Термическое син-элиминирование.

3.5. Присоединение по кратным углерод-углеродным связям. Электрофильное присоединение. Сильные и слабые электрофилы, механизм и стереохимия присоединения, регио- и стереоселективность реакций. Присоединение к сопряженным системам. Катионная полимеризация олефинов. Нуклеофильное присоединение по кратным связям С С. Механизм процесса. Влияние структуры нуклеофила и субстрата и эффектов среды на скорость и направление реакции. Реакция Михаэля. Анионная полимеризация олефинов.

3.6. Нуклеофильное присоединение к карбонильной группе: присоединение оснований, включая карбанионы, металлоорганических соединений. Реакция Анри. Кислотный и основной катализ присоединения. Енолизация альдегидов и кетонов. Механизм этерификации кислот и получение ацеталей. Конденсации карбонильных соединений, карбоновых кислот и их производных. Нуклеофильное присоединение к альд- и кетиминам и карбоний-иммониевым ионам (реакция Манниха).

3.7. Перегруппировки в карбокатионных интермедиатах. Классификация перегруппировок: пинаколиновая и ретропинаколиновая, перегруппировка Демьянова. Перегруппировка Вагнера—Мейервейна. Перегруппировки с миграцией к атому азота (Гофмана, Курциуса, Бекмана). Реакция Байера—Виллигера.

3.8. Радикальные и ион-радикальные реакции присоединения, замещения и элиминирования.

Цепные радикальные реакции. Полимеризация, теломеризация, реакции автоокисления. Ингибиторы, инициаторы и промоторы цепных реакций. Редокс-реакции. Электросинтез органических соединений.

3.9. Молекулярные реакции (цис-транс-изомеризация, распад молекул, размыкание циклов). Коарктатные реакции.

3.10. Согласованные реакции. Концепция сохранения орбитальной симметрии и правила Вудворда—Гофмана. Электроциклические реакции, сигматропные перегруппировки. Перициклические реакции (2+2) и (2+4)-циклоприсоединения. 1,3-диполярное циклоприсоединение.

3.11. Двойственная реакционная способность и таутомерия органических соединений. Прототропные и сигматропные перегруппировки. Правило Корнблума. Кето-енольное равновесие. Нитросоединения и нитроновые кислоты, нитрозосоединения и оксимы. Металлотропия.

3.12. Основы фотохимии органических соединений. Синглетные и триплетные состояния, флуоресценция и фосфоресценция, ин-теркомбинационная конверсия. Основные типы фотохимических реакций. Явление фотохромизма.

4. Принципы современного органического синтеза и установления строения органических соединений

4.1. Выбор оптимального пути синтеза. Принцип ретросинтетического анализа. Линейные и конвергентные схемы синтеза. Синтоны и синтетические эквиваленты. Защита функциональных групп. Методы введения и удаления защитных групп.

4.2. Основные пути построения углеродного скелета.

4.3. Методы введения важнейших функциональных групп и пути перехода от одних функций к другим.

4.4. Элементоорганические соединения (производные фосфора, бора, кремния, меди, лития, магния, олова) в органическом синтезе. Металлокомплексный катализ.

4.5. Использование химических и физико-химических методов для установления структуры органических соединений. Спектроскопия ЯМР, ЭПР, колебательная и электронная спектроскопия, масс- и хромато-масс-спектрометрия. Газожидкостная и жидкостная хроматография, ионообменная и гелепроникающая хроматография, электрофорез. Рентгеноструктурный анализ и электронография. Рефрактометрия.

4.6. Особенности оборудования и методики проведения реакций в гетерофазных и гетерогенных системах. Современные методы обработки реакционных масс, очистки и выделения продуктов. Проведение реакций на твердых носителях. Принципы комбинаторной химии.

4.7. Техника безопасности и экологические проблемы органического синтеза. «Зеленая химия». Термохимия органических реакций. Тепловой взрыв.

5. Использование ЭВМ в органической химии и информатика

5.1. Основные представления о применении неэмпирических и полуэмпирических методов квантово-химических вычислений и расчетов методами молекулярной механики для определения электронного и пространственного строения, конформационного состава, теплот образования, энергий напряжения и активации химических реакций, колебательных и электронных спектров, реакционной способности органических соединений.

5.2. Традиционные средства химической информации и методы их использования.

Автоматизированные информационно-поисковые системы.

Понятие об эмпирических корреляциях структура-свойство (QSAR, QSPR). Спектро-структурные корреляции. Машинное планирование и поиск путей синтеза органических соединений. Метод расчленения, выбор трансформов, ретронов и синтонов, способов связывания синтонов друг с другом.

II. Синтетические методы в органической химии и химические свойства соединений

1. Алканы

1.1. Методы синтеза: гидрирование непредельных углеводородов, синтез через

литийдиалкилкупраты, электролиз солей карбоновых кислот (Кольбе), восстановление карбонильных соединений.

1.2. Реакции алканов: галогенирование, сульфохлорирование. Селективность радикальных реакций и относительная стабильность алкильных радикалов. Термический и каталитический крекинг. Ионные реакции алканов в суперкислых средах (дейтероводород-ный обмен и галогенирование).

1.3. Циклоалканы. Методы синтеза и строение циклопропанов, циклобутанов, циклопентанов и циклогексанов. Синтез соединений со средним размером цикла (ацилоиновая конденсация). Типы напряжения в циклоалканах и их подразделение на малые, средние и макроциклы. Конформационный анализ циклогексана, моно- и дизамещенных циклогексанов; аксиальные и экваториальные связи. Влияние конформационного положения функциональных групп на их реакционную способность в ряду производных циклогексана на примере реакций замещения, отщепления и окисления. Реакции расширения и сужения циклов при дезаминировании первичных аминов (Демьянов). Сужение цикла в реакции Фаворского (-галогенциклоалканоны).

2. Алкены

2.1. Методы синтеза: элиминирование галогеноводородов из алкилгалогенидов, воды из спиртов. Синтез алкенов из четвертичных аммониевых солей (Гофман), N-окисей третичных аминов (Коуп). Стереоселективное восстановление алкинов. Стереоселективный синтез цис- и транс-алкенов из 1,2-диолюв (Кори, Уинтер). Региоселективный синтез алкенов из тозилгидразонов (Шапи-ро). Реакция Виттига как региоспецифический метод синтеза алкенов. Основания, используемые в реакции. Стабилизированные и нестабилизированные илюды. Стереохимия реакции. Хемоселективность реакции Виттига. Получение эфиров алкилфосфоновых кислот (Михаэль—Арбузов) и их использование в синтезе алкенов (вариант Виттига—Хорнера—Эммонса). Область применения реакции.

2.2. Реакции алкенов: электрофильное присоединение галогенов, галогеноводородов, воды. Процессы, сопутствующие AdE-реакциям: сопряженное присоединение, гидридные и алкильные миграции. Гидрокси- и алкоксимеркурирование. Регио- и стерео-селективное присоединение гидридов бора. Региоспецифические гидроборирующие агенты. Превращение борорганических соединений в алканы, спирты, алкилгалогениды. Окисление алкенов до оксиранов (Прилежаев). Понятие об энантиомерном эпокси-дировании алкенов по Шарплесу (в присутствии изопропилата титана и эфира L-(+)-винной кислоты). Цис-гидроксилирование алкенов по Вагнеру (KMnO4) и Криге (OsO4). Окисление алкенов галогеном в присутствии солей серебра: цис-(Вудворт) и транс-(Прево) гидроксилирование. Радикальные реакции алкенов: присоединение бромистого водорода по Харашу, сероводорода и тио-люв. Аллильное галогенирование по Циглеру. Внутримолекулярная радикальная циклизация б-галогеналканов при действии три-бутилолювогидрида. Гетерогенное гидрирование: катализаторы, каталитические яды. Гидрогенолиз связей углерод-гетероатом. Гомогенное гидрирование: катализаторы, механизм. Региоселективность гомогенного гидрирования. Присоединение синглетных и триплетных карбенов к алкенам. Карбеноиды, их взаимодействие с алкенами.

3. Алкины

3.1. Методы синтеза: отщепление галогеноводородов из дигалогенидов, реакция 1,2-дигидразонов с оксидом ртути (II) и тетра-ацетатом свинца. Усложнение углеродного скелета алкинов: реакции ацетиленидов натрия и меди, магниорганических производных алкинов. Конденсация алкинов-1 с кетонами и альдегидами (Фаворский, Реппе).

3.2. Реакции алкинов. Галогенирование, гидрогалогенирование, гидратация (Кучеров). Ацетилен-алленовая изомеризация. Смещение тройной связи в терминальное положение. Окислительная конденсация терминальных алкинов в присутствии солей меди.

4. Алкадиены

4.1. Методы синтеза 1,3-диенов: дегидрирование алканов, синтез Фаворского—Реппе, кросс-сочетание на металлокомплексных катализаторах.

4.2. Реакции 1,3-диенов: галогенирование и гидрогалогенирование, 1,2- и 1,4-присоединение. Реакция Дильса—Альдера с алкенами и алкинами, ее типы: карбо-реакция, гетеро-реакция.

Диены и диенофилы. о-хинодиметаны в качестве диенов. Катализ в реакции Дильса—Альдера. Стереохимия реакции. Региоселективность [4+2]-циклоприсоединения в случае несимметричных диенов и диенофилов. Ретро-реакция Дильса—Альдера. Применение силоксидиенов в синтезе алициклов и гетероциклов.

5. Спирты и простые эфиры

5.1. Методы синтеза одноатомных спиртов: из алкенов, карбонильных соединений, сложных эфиров и карбоновых кислот.

5.2. Реакции одноатомных спиртов: замещение гидроксильной группы в спиртах на галоген (под действием галогеноводородов, галогенидов фосфора и хлористого тионила). Реагенты регио- и стереоселективного замещения (комплексы трифенилфосфина с галогенами и четыреххлористым углеродом). Дегидратация спиртов. Окисление первичных и вторичных спиртов. Реагенты окисления на основе соединений хрома (VI), диоксида марганца и диметилсульфоксида (методы Моффета и Сверна).

5.3. Методы синтеза и реакции двухатомных спиртов. Окислительное расщепление 1,2-диолов (иодная кислота, тетраацетат свинца). Пинаколиновая перегруппировка.

5.4. Методы синтеза простых эфиров: реакция Вильямсона, алкоксимеркурирование спиртов.

5.5. Реакции простых эфиров: образование оксониевых солей, расщепление кислотами.

5.6. Гидропероксиды. Краун-эфиры, их получение и применение в синтезе.

5.7. Оксираны. Способы получения. Раскрытие оксиранового цикла под действием электрофильных и нуклеофильных агентов.

6. Альдегиды и кетоны

6.1. Методы получения альдегидов и кетонов: из спиртов, производных карбоновых кислот, алкенов (озонолиз), алкинов (гидроборирование), на основе металлорганических соединений. Ацилирование и формилирование аренов.

6.2. Реакции альдегидов и кетонов: присоединение воды, спиртов, тиолов. 1,3-Дитианы и их использование в органическом синтезе. Обращение полярности С=О-группы. Получение бисульфитных производных и циангидринов. Взаимодействие альдегидов и кетонов с илами фосфора (Виттиг) и серы. Взаимодействие альдегидов и кетонов с азотистыми основаниями. Перегруппировка Бекмана. Взаимодействие альдегидов и кетонов с металлорганическими соединениями. Енамины, их алкилирование и ацилирование. Альдольно-кетоновая конденсация альдегидов и кетонов как метод усложнения углеродного скелета. Направленная альдольная конденсация разноименных альдегидов с использованием литиевых и кремниевых эфиров енолов. Конденсация альдегидов и кетонов с малоновым эфиром и другими соединениями с активной метиленовой группой (Кневенагель). Аминометирирование альдегидов и кетонов (Манних). Бензоиновая конденсация. Конденсация с нитроалканами (Анри). Восстановление альдегидов и кетонов до спиртов, реагенты восстановления. Дезоксигенирование альдегидов и кетонов: реакции Клемменсена и Кижнера—Вольфа. Окисление альдегидов, реагенты окисления. Окисление кетонов надкислотами по Байеру—Виллигеру.

6.3. α,β -непредельные альдегиды и кетоны. Методы получения: конденсации, окисление аллиловых спиртов. Реакция 1,2- и 1,4-присоединения литийорганических соединений, триалкилборанов, диалкил- и диарилкупратов, цианистого водорода, галогеноводородов. Эпоксидирование α,β -непредельных кетонов. Сопряженное присоединение енолятов и енаминов к α,β -непредельным альдегидам и кетонам (Михаэль). Доноры и акцепторы Михаэля. Катализаторы реакции, ее обратимость. Ретро-реакция. Реакции анелирования. Вариант Робинсона. Использование α -хлоркетонов и производных оснований Манниха. α -силилированные винилкетоны (Сторк) и енамины в реакциях анелирования.

7. Карбоновые кислоты и их производные

7.1. Методы синтеза кислот: окисление первичных спиртов и альдегидов, алкенов, алкинов, алкилбензолов, гидролиз нитрилов и других производных карбоновых кислот, синтез на основе металлорганических соединений, синтезы на основе малонового эфира.

7.2. Реакции карбоновых кислот: галогенирование по Гелю-Фольгардту-Зелинскому,

пиролитическая кетонизация, электролиз по Кольбе, декарбоксилирование по Хунсдиккеру.

7.3. Методы получения производных карбоновых кислот: галогенангидридов, ангидридов, сложных эфиров, нитрилов, амидов. Кетены, их получение и свойства.

7.4. Реакции производных карбоновых кислот: взаимодействие с нуклеофильными реагентами (вода, спирты, аммиак, амины, ме-таллорганические соединения). Восстановление галогенангидридов до альдегидов по Розенмунду и комплексными гидридами металлов.

Взаимодействие галогенангидридов с диазометаном (реакция Арндта-Эйстера).

Восстановление сложных эфиров до спиртов и альдегидов, нитрилов – до аминов и альдегидов комплексными гидридами металлов. Малоновая кислота: синтезы с малоновым эфиром, реакция Михаэля, конденсации с альдегидами (Кневенагель). Сложноэфирная и ацилоиновая конденсации. Особенности эфиров двухосновных кислот (образование карбоциклов) в этих реакциях. Сложные эфиры -галогенокислот в реакциях Реформатского. Ацетоуксусный эфир и его использование в синтезе.

7.5. Методы синтеза непредельных карбоновых кислот: дегидратация гидроксикислот, реакции Кневенагеля, Виттига, Перкина (синтез коричных кислот). Реакции присоединения по двойной связи. Бromo- и иодо-лактонизация, -непредельных карбоновых кислот.

8. Синтетическое использование реакций электрофильного замещения в ароматическом ряду

Классификация реакций ароматического электрофильного замещения. Влияние заместителей в бензольном кольце на скорость и направление электрофильного замещения. Согласованная и несогласованная ориентация.

8.1. Нитрование. Нитрующие агенты. Механизм реакции нитрования. Нитрование бензола и его замещенных. Нитрование бифенила, нафталина, ароматических аминов и фенола. Получение полинитросоединений. Ипсо-атака и ипсо-замещение в реакциях нитрования. Восстановление нитро-группы в различных условиях.

8.2. Галогенирование. Галогенирующие агенты. Механизм галогенирования аренов и их производных.

8.3. Сульфирование. Сульфлирующие агенты. Кинетический и термодинамический контроль реакции (сульфирование фенола и нафталина). Превращение сульфогруппы.

8.4. Алкилирование аренов по Фриделю-Крафтсу. Алкилирующие агенты. Механизм реакции. Полиалкилирование. Побочные процессы: изомеризация алкилирующего агента и конечных продуктов. Синтез диарил- и триарилметанов.

8.5. Ацилирование аренов. Ацилирующие агенты. Механизм реакции. Региоселективность ацилирования. Особенности ацилирования фенолов, перегруппировка Фриса. Формилирование по Гаттерману-Коху, Гаттерману и Вильсмейеру. Область применения этих реакций.

9. Нитросоединения и амины

9.1. Нитроалканы. Синтез из алкилгалогенидов. Кислотность и таутомерия нитроалканов.

Конденсация с карбонильными соединениями (Анри). Восстановление в амины. Превращение вторичных нитроалканов в кетоны (Мак-Марри).

9.2. Методы получения аминов: алкилирование аммиака и аминов по Гофману, фталимида калия (Габриэль), восстановление азот-содержащих производных карбонильных соединений и карбоновых кислот, нитросоединений, алкилазидов. Перегруппировки Гофмана и Курциуса. Синтез аминов с третичным алкильным радикалом (Риттер), взаимодействие альдегидов и кетонов с фоми-атом аммония (Лейкарт).

9.3. Реакции аминов. Алкилирование и ацилирование. Термическое разложение гидроксидов тетраалкиламмония по Гофману. Окисление третичных аминов до N-оксидов, их термолиз (Коуп). Получение нитронов из N,N-диалкилгидроксиаминов. Реакции [3+2]-циклоприсоединения нитронов (образование пятичленных азотистых гетероциклов).

10. Методы синтеза и реакции ароматических гетероциклических соединений

10.1. Пятичленные гетероциклы с одним гетероатомом. Фуран, пиррол, тиофен. Синтез из 1,4-дикарбонильных соединений (Пааль—Кнорр). Синтез пирролов по Кнорру и по Ганчу. Синтез 3,4-дизамещенных тиофенов по Хинсбергу. Реакции электрофильного замещения в пятичленных

ароматических гетероциклах: нитрование, сульфирование, галогенирование, формилирование, ацилирование. Индолл. Синтез производных индола из фенилгидразина и кетонов (Фишер). Синтез индола и его производных из 2-аминамидоэтанолов (Маделунг). Реакции электрофильного замещения в пиррольном кольце индола: нитрование, формилирование, галогенирование.

10.2. Шестичленные ароматические гетероциклы с одним гетероатомом. Пиридин и хинолин. Синтез производных пиридина по Ганчу. Синтез частично гидрированных производных пиридина путем [4+2]-циклоприсоединения (гетеро-реакция Дильса—Альдера). Синтез хинолина и замещенных хинолинов из анилинов по Скраупу и Дебнеру—Миллеру. Реакции пиридина и хинолина с алкилгалогенидами. Окисление и восстановление пиридина и хинолина. Реакции электрофильного замещения в пиридине и хинолине: нитрование, сульфирование, галогенирование. N-окиси пиридина и хинолина и их использование в реакции нитрования. Нуклеофильное замещение атомов водорода в пиридине и хинолине в реакциях с амидом натрия (Чичибабин) и фениллитием. 2- и 4-метилпиридины и хинолины как метиленовые компоненты в конденсациях с альдегидами.

7.3. Таблица соответствия компетенций, критериев оценки их освоения

Индекс компетенции	Расшифровка компетенции	Показатель формирования компетенции для данной дисциплины	Оценочное средство
УК-1	способность к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях	УМЕТЬ: анализировать альтернативные варианты решения исследовательских и практических задач и оценивать потенциальные выигрыши/проигрыши реализации этих вариантов У1 (УК-1)	Устный опрос, индивидуальное собеседование, экзамен (темы 1-8).
УК-2	способность проектировать и осуществлять комплексные исследования, в том числе междисциплинарные, на основе целостного системного научного мировоззрения с использованием знаний в области истории и философии науки	ЗНАТЬ: методы научно-исследовательской деятельности З1 (УК-2)	Устный опрос, индивидуальное собеседование, экзамен (темы 1-8).

ОПК-1	способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий	УМЕТЬ: выбирать и применять профессиональной деятельности экспериментальные и расчетно-теоретические методы исследования У1 (ОПК-1)	Устный опрос, контрольные письменные работы, экзамен (темы 1-8).
ОПК-3	готовность к преподавательской деятельности по основным образовательным программам высшего образования	ЗНАТЬ: требования к квалификационным работам бакалавров, специалистов, магистров 32 (ОПК-3)	Устный опрос, экзамен (темы 1-8).
ПК-1	умением применять основные законы химии при обсуждении полученных результатов, в том числе с привлечением информационных баз данных	31(ПК-1) ЗНАТЬ: современное состояние науки в области аналитической химии	Устный опрос, индивидуальное собеседование, экзамен (темы 1-8).
ПК-2	Способностью анализировать полученные результаты, делать необходимые выводы и формулировать предложения	В1 (ПК-2) ВЛАДЕТЬ: навыками получения, первичной обработки и анализа научных данных, современными методами математической и статистической обработки химических данных	Устный опрос, индивидуальное собеседование, экзамен (темы 1-8).
ПК-3	владением методами планирования, регистрации и обработки результатов химического эксперимента, основными синтетическими и аналитическими методами получения и исследования химических веществ и реакций	В1 (ПК-3) ВЛАДЕТЬ: методами планирования, подготовки, проведения НИР, анализа полученных данных, формулировки выводов и рекомендаций в области органической химии	Устный опрос, индивидуальное собеседование, экзамен (темы 1-8).
ПК-4	Владением современными компьютерными технологиями, применяемыми при	31 (ПК-4) ЗНАТЬ: современные информационные технологии, информационное обеспечение	Устный опрос, индивидуальное собеседование, экзамен (темы

	обработке результатов научных экспериментов и сборе, обработке, хранении и передаче информации при проведении самостоятельных научных исследований	интернет- конференций, требования к содержанию и правила оформления рукописей к публикации в рецензируемых научных изданиях	1-8).
ПК-5	Формированием опыта профессионального участия в научных дискуссиях, умением представлять полученные в исследованиях результаты в виде отчетов и научных публикаций	В1 (ПК-5) ВЛАДЕТЬ: навыками составления и подачи конкурсных заявок, в том числе международных, на выполнение НИР по аналитической химии, представления результатов НИР в виде печатных материалов и устных сообщений	Устный опрос, индивидуальное собеседование, экзамен (темы 1-8).
ПК-6	Способностью организовать и проводить исследования в рамках химических и смежных специальностей	З1 (ПК-6) ЗНАТЬ: современные методики и подходы теоретического и экспериментального решения комплексных химических задач с привлечением современного парка инновационного оборудования в рамках НИР	Устный опрос, индивидуальное собеседование, экзамен (темы 1-8).

Методические материалы для проведения процедур оценивания результатов обучения

Кандидатский экзамен проводится по билетам, каждый из которых включает теоретические вопросы и практическое контрольное задание (ПКЗ). Уровень знаний соискателя ученой степени оценивается на «отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно». Протокол приема кандидатского экзамена подписывается членами комиссии с указанием их ученой степени, ученого звания, занимаемой должности и специальности согласно номенклатуре специальностей научных работников.

Критерии оценки экзамена и шкала оценивания

Критерии оценки экзамена

Оценка «отлично»

знает требования к формированию и реализации ООП в системе высшего образования; имеет представления о требованиях к квалификационным работам бакалавров, специалистов, магистров; владеет методикой применения современных образовательных технологий в учебном процессе с учетом специфики направления подготовки; проектирует образовательный процесс в рамках учебного плана. Отвечает на все пять вопросов билета, демонстрирует глубокое и прочное усвоение теоретического материала раздела, полные, последовательные, грамотные и логически излагаемые ответы на поставленные вопросы

Оценка «хорошо»

имеет представления о требованиях к формированию и реализации учебного плана в системе высшего образования; имеет сформированные, но содержащие отдельные пробелы

<p>Оценка «удовлетворительно»</p>	<p>представления о требованиях к квалификационным работам бакалавров, специалистов, магистров; производит отбор и использует современные образовательные технологии с учетом специфики направленности (профиля) подготовки; проектирует образовательный процесс в рамках модуля. Отвечает на четыре вопроса, демонстрирует усвоение основного материала раздела, при ответе допускаются неточности и недостаточно правильные формулировки, не искажающие существа вопроса.</p>
<p>Оценка «неудовлетворительно»</p>	<p>имеет сформированные представления о требованиях, предъявляемых к обеспечению учебной дисциплины и преподавателю, ее реализующему в системе ВО; имеет неполные представления о требованиях к квалификационным работам бакалавров, специалистов, магистров; проводит отбор методов преподавания и использует их с учетом специфики преподаваемой дисциплины; проектирует образовательный процесс в рамках дисциплины. Отвечает на три вопроса, демонстрирует неполное усвоение материала, при ответе допускаются существенные неточности и неправильные формулировки, искажающие существо вопроса, испытывает трудности с изложением своих мыслей по излагаемому вопросу.</p>
<p>Оценка «неудовлетворительно»</p>	<p>имеет фрагментарные представления об основных требованиях, предъявляемых к преподавателям в системе высшего образования; имеет фрагментарные представления о требованиях к квалификационным работам бакалавров, специалистов, магистров; затруднения с разработкой плана и структуры квалификационной работы; проектируемый образовательный процесс не приобретает целостности. При ответе на вопросы демонстрирует полное неусвоение материала, испытывает трудности при формулировании ответа на вопрос.</p>

Критерии формирования (шкала оценок) для проведения промежуточной и итоговой аттестации

Компетенции	Планируемые результаты обучения	Критерий оценивания результатов обучения			
		2	3	4	5
УК-1	В2 ВЛАДЕТЬ: навыками критического анализа и оценки современных научных достижений и результатов деятельности по решению исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях	Отсутствие навыков критического анализа и оценки современных научных достижений и результатов деятельности по решению исследовательских и практических задач, в том числе	Недостаточно сформированные навыки критического анализа и оценки современных научных достижений и результатов деятельности по решению исследовательских и практических задач, в том числе	Сформированные, но содержащие пробелы навыки критического анализа и оценки современных научных достижений и результатов деятельности по решению исследовательских и практических задач, в том числе	Сформированные навыки критического анализа и оценки современных научных достижений и результатов деятельности по решению исследовательских и практических задач, в том числе

		числе в междисциплинарных областях	задач, в том числе в междисциплинарных областях	практических задач, в том числе в междисциплинарных областях	междисциплинарных областях
УК-2	31 Знать методы научно-исследовательской деятельности	Фрагментарные представления о методах научно-исследовательской	Недостаточно сформированные представления о методах научно-исследовательской	Сформированные, но содержащие отдельные пробелы представления о методах	Сформированные систематические представления о методах научно-исследовательской деятельности
ОПК-1	В1 ВЛАДЕТЬ: навыками поиска (в том числе с использованием информационных систем и баз данных) и критического анализа информации по тематике проводимых исследований	Отсутствие навыков поиска и критического анализа информации по тематике проводимых исследований	Недостаточно сформированные навыки поиска и критического анализа информации по тематике проводимых исследований	Сформированные, но содержащие отдельные пробелы навыки поиска и критического анализа информации по тематике проводимых исследований	Сформированные навыки поиска и критического анализа информации по тематике проводимых исследований
ОПК-3	32 ЗНАТЬ: требования к квалификационным работам бакалавров, специалистов, магистров	Фрагментарные представления о требованиях к квалификационным работам бакалавров, специалистов, магистров	Неполные представления о требованиях к квалификационным работам бакалавров, специалистов, магистров	Сформированные, но содержащие отдельные пробелы представления о требованиях к квалификационным работам бакалавров, специалистов, магистров	Сформированные систематические представления о требованиях к квалификационным работам бакалавров, специалистов, магистров.

ПК-1	ЗНАТЬ: современное состояние науки в области аналитической химии	Фрагментарные представления о современном состоянии науки в области аналитической химии	Неполные представления о современном состоянии науки в области аналитической химии	Сформированные, но содержащие отдельные пробелы представления о современном состоянии науки в области аналитической химии	Сформированные систематические представления о современном состоянии науки в области аналитической химии
ПК-2	ВЛАДЕТЬ: навыками получения, первичной обработки и анализа научных данных, современными методами математической и статистической обработки химических данных	Отсутствие навыков получения, первичной обработки и анализа научных данных, не владеет современным и методами математической и статистической обработки химических данных	Недостаточно сформированные навыки получения, первичной обработки и анализа научных данных, не в полной мере владеет современными методами математической и статистической обработки химических данных	Сформированные, но содержащие отдельные пробелы навыки получения, первичной обработки и анализа научных данных, владеет современными методами математической и статистической обработки химических данных	Сформированные навыки получения, первичной обработки и анализа научных данных, свободно владеет современными методами математической и статистической обработки химических данных
ПК-3	ВЛАДЕТЬ: методами планирования, подготовки, проведения НИР, анализа полученных данных, формулировки выводов и рекомендаций в области органической химии	Не владеет методами планирования, подготовки, проведения НИР, анализа полученных данных, формулировки выводов и рекомендаций в области органической химии	В недостаточной мере владеет методами планирования, подготовки, проведения НИР, анализа полученных данных, формулировки выводов и рекомендаций в области аналитической химии	Осознанно, но с небольшими затруднениями владеет методами планирования, подготовки, проведения НИР, анализа полученных данных, формулировки выводов и рекомендаций в области органической химии	Полностью и осознанно владеет методами планирования, подготовки, проведения НИР, анализа полученных данных, формулировки выводов и рекомендаций в области органической химии

ПК-4	ЗНАТЬ: современные информационные технологии, информационное обеспечение интернет-конференций, требования к содержанию и правила оформления рукописей к публикации в рецензируемых научных изданиях	Фрагментарные представления о современных информационных технологиях, информационном обеспечении интернет-конференций, требованиях к содержанию и правилам оформления рукописей в рецензируемых научных изданиях	Неполные представления о современных информационных технологиях, информационном обеспечении интернет-конференций, требованиях к содержанию и правилам оформления рукописей в рецензируемых научных изданиях	Сформированные, но содержащие отдельные пробелы представления о современных информационных технологиях, информационном обеспечении интернет-конференций, требованиях к содержанию и правилам оформления рукописей в рецензируемых научных изданиях	Сформированные систематические представления о современных информационных технологиях, информационном обеспечении интернет-конференций, требованиях к содержанию и правилам оформления рукописей в рецензируемых научных изданиях
ПК-5	ВЛАДЕТЬ: навыками составления и подачи конкурсных заявок, в том числе международных, на выполнение НИР по аналитической химии, представления результатов НИР в виде печатных материалов и устных сообщений	Отсутствие навыков составления и подачи конкурсных заявок, в том числе международных, на выполнение НИР по аналитической химии, представления результатов НИР в виде печатных материалов и устных сообщений	Недостаточно сформированные навыки составления и подачи конкурсных заявок, в том числе международных, на выполнение НИР по аналитической химии, представления результатов НИР в виде печатных материалов и устных сообщений	Сформированные, но содержащие отдельные пробелы навыки составления и подачи конкурсных заявок, в том числе международных, на выполнение НИР по аналитической химии, представления результатов НИР в виде печатных материалов и устных сообщений	Сформированные навыки составления и подачи конкурсных заявок, в том числе международных, на выполнение НИР по аналитической химии, представления результатов НИР в виде печатных материалов и устных сообщений

ПК-6	ЗНАТЬ: современные методики и подходы теоретического и экспериментального решения комплексных химических задач с привлечением современного парка инновационного оборудования в рамках НИР	Фрагментарные представления о современных методиках и подходах теоретического и экспериментального решения комплексных химических задач в рамках НИР	Неполные представления о современных методиках и подходах теоретического и экспериментального решения комплексных химических задач в рамках НИР	Сформированные, но содержащие отдельные пробелы представления о современных методиках и подходах теоретического и экспериментального решения комплексных химических задач в рамках НИР	Сформированные систематические представления о современных методиках и подходах теоретического и экспериментального решения комплексных химических задач в рамках НИР
------	--	--	---	--	---

8. МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ДЛЯ ОБУЧАЮЩИХСЯ ПРИ ОСВОЕНИИ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Успешное освоение дисциплины предполагает активное, творческое участие аспиранта путем планомерной, повседневной работы.

Общие методические указания по организации самостоятельной работы аспирантов.

Самостоятельное изучение курса "Органическая химия" следует начать с ознакомления с программой и требованиями к результатам изучения курса. Изучать курс рекомендуется по темам в соответствии с программой (расположение материала в программе курса не всегда совпадает с расположением его в том или ином учебнике, но соответствует тематике лекционных занятий) постепенно, в течение семестра, не оставляя на период подготовки к зачету. Не следует переходить к изучению последующей темы, пока материал предыдущей не усвоен. Степень освоения материала темы можно контролировать так: перед изучением темы прочесть требования к результатам ее изучения, обратив внимание на ключевые слова в требованиях к знаниям, после изучения темы проверить себя по тексту требований («это я знаю», «это я помню»).

Работа с книгой. Изучать материал, относящийся к данной теме, следует по одному или нескольким из рекомендованных учебников (список рекомендуемой литературы приведен после плана изучения курса). Если возникают трудности при работе с основными учебниками, можно изучить соответствующую тему по конспектам лекционного курса, но затем следует обязательно вернуться к данной теме в учебнике. Для поиска необходимых сведений в учебнике можно использовать предметный указатель в конце учебника.

Большинство тем курса "Органическая химия" носят теоретический характер и достаточно трудны для восприятия, поэтому тексты учебников с изложением таких тем могут вызвать определенные затруднения при их изучении. Такие тексты лучше изучать так: при первом чтении надо стараться получить общее представление об излагаемых вопросах, а также отмечать трудные и непонятные места; при повторном изучении темы необходимо усвоить все теоретические положения. Необходимо вникать в сущность того или иного изучаемого вопроса, а не пытаться лишь запомнить отдельные факты и явления.

Более глубокому и прочному усвоению материала способствует изучение любого вопроса на уровне сущности, а не на уровне отдельных явлений. Изучаемый материал следует заносить в рабочую тетрадь в виде конспекта, включающего краткое последовательное изложение наиболее важной информации: новые термины, даты, имена ученых и их достижения и т.д. Во всех случаях, когда материал поддается систематизации, полезно составлять схемы и таблицы, «свертывая» информацию в удобную, компактную форму. Составление конспектов, особенно в форме таблиц, схем, опорных сигналов, способствует эффективному запоминанию изученного материала, поскольку здесь привлекается логическое запоминание и используются зрительный и двигательный типы памяти.

Методические указания по выполнению контрольных по дисциплине. К выполнению контрольных работ рекомендуется приступать только после усвоения всего учебного материала дисциплины. Задания на контрольные работы разрабатываются в нескольких вариантах. Порядок выбора варианта задания приводится в методических указаниях по изучению данной дисциплины.

Рекомендации по освоению контрольных работ:

- контрольную работу следует выполнять полностью, т.е. решить все задачи и ответить на все вопросы задания; непонятный вопрос или задачу не следует пропускать; в этом случае необходимо обратиться за помощью к преподавателю;
- ответы в контрольных работах излагать ясно, точно и полно, таким образом, чтобы преподавателю был ясен весь ход рассуждений;
- решения задачи работы необходимо представлять вместе со всеми промежуточными преобразованиями и ссылками на используемые справочные материалы;
- не допускаются перечёркивания, вставки, произвольное сокращение слов и каких-либо обозначений, не применяемых в литературе по изучаемой дисциплине;
- неудовлетворительное оформление контрольной работы может быть причиной её незачёта; небрежность письма и грамматические ошибки недопустимы;
- на каждой странице работы необходимо оставлять поля на каждой странице работы
необходимо оставлять поля 4-5 см. для замечаний рецензента и одну – две страницы в конце работы для заключительной рецензии.

9. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

9.1 Основная литература:

1. Реутов, О.А. Органическая химия [Текст]: В 4 ч.: Ч.: 1: Учебное пособие для вузов / О.А.Реутов, А.Л.Курц, К.П.Бутин - М.: Бином, 2013.- 567 с.
2. Реутов, О.А. Органическая химия [Текст]: В 4 ч.: Ч.: 2: Учебное пособие для вузов / О.А.Реутов, А.Л.Курц, К.П.Бутин - М.: Бином, 2013.- 623 с.
3. . Реутов, О.А. Органическая химия [Текст]: В 4 ч.: Ч.: 3: Учебное пособие для вузов / О.А.Реутов, А.Л.Курц, К.П.Бутин - М.: Бином, 2013. - 544 с.
4. Реутов, О.А. Органическая химия [Текст]: В 4 ч.: Ч.: 4: Учебное пособие для вузов / О.А.Реутов, А.Л.Курц, К.П.Бутин - М.: Бином, 2013. - 458 с.
5. Щербина А. Э. Органическая химия. Основной курс: Учебник [Электронный ресурс]. / А.Э. Щербина, Л.Г. Матусевич; Под ред. А.Э. Щербины. - М.: НИЦ ИНФРА-М; Мн.: Нов. знание, 2013. - 808 с. - (Высшее образование: Бакалавриат). Режим доступа: <http://znanium.com/bookread.php/book=415732>.
6. Шабаров Ю. С. Органическая химия. [Электронный ресурс]. - 5-е изд., стер. - Санкт-Петербург: Лань, 2011. - 848 с.
Режим доступа: http://e.lanbook.com/books/element.php.pl1_cid=25&pl1_id=4037.

9.2 Дополнительная литература:

1. Основы органической стереохимии / Э. Илиел, С. Вайлен, М. Дойл; пер. с англ. З.А. Бредихиной; под ред. А.А. Бредихина. - Москва : БИНОМ. Лаб. знаний, 2007 .- 703 с.
2. Синтетические рецепторы на основе порфиринов и их конъюгатов с каликс[4]аренами / О.И. Койфман, Н.Ж. Мамардашвили, И.С. Антипин; Рос. акад. наук, Ин-т хим. растворов. — Москва : Наука, 2006 .— 245 с.
3. Тоуб М. Механизмы неорганических реакций /М. Тоуб, Дж. Берджесс; пер. с англ. -Эл. изд. - М.: БИНОМ.Лаборатория знаний, 2012. - 678 с.: ил.
http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=8697

9.3 Рекомендуемая литература:

1. Травень, В.Ф. Органическая химия. [Текст]: в 2 т./ В.Ф.Травень – М.: Издательско-книготорговый центр Академкнига, 2008. – 2 т. - ISBN 978-5-94628-318-2, 978-5-94628-320-5
2. Шабаров, Ю.С. Органическая химия. [Текст] / Ю.С.Шабаров – М.: Химия, 2001. – 848 с. - ISBN 5-7245-1180-0
3. Нейланд, О.Я. Органическая химия [Текст]: Учеб. для хим. спец. вузов. / О.Я.Нейланд – М.: Высшая школа, 1990. - 751 с.
4. Робертс, Дж. Основы органической химии. Кн. 1,2. [Текст] / Дж.Робертс, М.Касерио – М.: Мир, 1978. - 2 т.
5. Смит, В.А. Основы современного органического синтеза [Текст]: уч. пособие для вузов / В.А.Смит, А.Д.Дильман - М.: Бином. Лаборатория знаний, 2009. – 750 с. - ISBN: 978-5-94774-941-0.
6. Бергер, В. Органикум [Текст]: в 2 т. / В.Бергер, Х.Беккер, Р.Беккерт, К.Гевальд, Ф.Генц – М.: Мир, 2008. - 2 т. - 5-03-003805-1, 5-03-003807-8.
7. Практические работы по органическому синтезу [Текст] – Казань: КГУ, 2002.
Курц, А.Л. Задачи по органической химии с решениями [Текст] /А.Л.Курц - М.: Бином. Лаборатория знаний, 2006. - 264с. - ISBN 5-94774-399-х.

9.4 Интернет-ресурсы:

<http://www.chemguide.co.uk/mechmenu.html>
<http://www.chem.ox.ac.uk/vrchemistry/iom/>
<http://crab.rutgers.edu/~alroche/MechanismInOrgChem.html>
<http://www.chemhelper.com/mechanisms.html>

10. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Освоение дисциплины "Органическая химия" предполагает использование следующего материально-технического обеспечения:

- Мультимедийная аудитория, вместимостью более 15 человек, которая 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.

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе "ZNANIUM.COM", доступ к которой предоставлен аспирантам. ЭБС "ZNANIUM.COM" содержит произведения крупнейших российских учёных, руководителей государственных органов, преподавателей ведущих вузов страны, высококвалифицированных специалистов в различных сферах бизнеса. Фонд библиотеки сформирован с учетом всех изменений образовательных стандартов и включает учебники, учебные пособия, монографии, авторефераты, диссертации, энциклопедии, словари и справочники, законодательно-нормативные документы, специальные периодические издания и издания, выпускаемые издательствами вузов. В настоящее время ЭБС ZNANIUM.COM соответствует всем требованиям федеральных государственных образовательных стандартов высшего образования (ФГОС) нового поколения.

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе Издательства "Лань", доступ к которой предоставлен аспирантам. ЭБС Издательства "Лань" включает в себя электронные версии книг издательства "Лань" и других ведущих издательств учебной литературы, а также электронные версии периодических изданий по естественным, техническим и гуманитарным наукам. ЭБС Издательства "Лань" обеспечивает доступ к научной, учебной литературе и научным периодическим изданиям по максимальному количеству профильных направлений с соблюдением всех авторских и смежных прав.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО аспирантуры. Приказ Минобрнауки России от 30.07.2014 897 (Зарегистрировано в Минюсте России 28.08.2014 № 33694)

Автор(ы): д.х.н., чл.-корр. РАН

И.С.Антипин

Рецензенты: д.х.н., профессор

Г.А.Чмутова

Программа одобрена на заседании Учебно-методической комиссии Химического института КФУ от 29 августа 2014 года, протокол № 10.