


МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Томский государственный педагогический университет»
(ТГПУ)

УТВЕРЖДАЮ

Декан биолого-химического факультета


подпись

Минич А.С., д.б.н., профессор

«16» мая 2016 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

АКТУАЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ ОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ

Направление подготовки (специальность): 44.04.01 Педагогическое образование
код наименование

Направленность (профиль): Химическое образование

Форма обучения: очная

1. Место учебной дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО по направлению подготовки 44.04.01 «Педагогическое образование» и учебных планов, утвержденных Ученым советом ТГПУ, по направленности (профилю) Химическое образование.

Дисциплина «Актуальные вопросы неорганической химии» относится к обязательным дисциплинам вариативной части образовательной программы (ОП).

Дисциплину «Актуальные вопросы органической химии» изучают на 1 курсе магистратуры. Для освоения дисциплины студенты используют знания, умения и навыки, сформированные в процессе освоения дисциплин бакалавриата: органическая, физическая и коллоидная, прикладная химия, химическая технология. Знания, полученные при освоении дисциплины «Актуальные вопросы органической химии» могут быть использованы при изучении дисциплин: физико-химические методы анализа, биогенные и abiогенные элементы, элективные курсы по химии в профильной школе, обучение химии в профильной школе.

2. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения ОП

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование и развитие общепрофессиональной компетенции: готовности использовать знание современных проблем науки и образования при решении профессиональных задач (ОПК-2).

В результате изучения дисциплины обучающийся должен:

знать основные направления и проблемы развития современной органической химии;

владеть современными методами получения органических веществ и материалов на их основе, областями их применения, методами исследования в области органической химии, способами ориентации в профессиональных источниках информации.

уметь доказательно обсуждать теоретические и практические проблемы органической химии, анализировать результаты научных исследований, опубликованные в научной литературе, демонстрировать перспективы использования полученных знаний и навыков в будущей профессиональной деятельности.

3. Содержание учебной дисциплины (модуля)

3.1. Методы исследования механизма органических реакций. Основные типы реакций органических соединений: перегруппировки, рекомбинация и диссоциация, бимолекулярное замещение, перенос электрона. Деление реакций на нуклеофильные, электрофильные и гомолитические. Общая классификация механизмов. Понятие о переходном состоянии. Стадии изучения механизма реакций: материальный баланс, кинетика, стереохимические корреляции, изотопные и структурные метки, влияние заместителей, растворителя, катализаторов, поиск нестабильных интермедиатов. Термодинамические параметры реакций. Величина энтропии активации для реакций разных типов. Понятие о кинетическом и термодинамическом контроле реакций. Уравнение Гаммета. Константы заместителей и константы реакций, их знак и абсолютная величина. Константы σ^+ , σ^- , σ^* , σ . Стерические эффекты. Уравнение Тафта. Соотношение линейности свободных энергий в исследовании переходного состояния.

3.2. Орбитальные взаимодействия в согласованных и многостадийных органических реакциях. Характерные особенности: высокая стерео- и региоселективность, изменение селективности при переходе от термической к фотохимической активации. Молекулярно-орбитальная теория перициклических реакций. Разрешённые и запрещённые реакции; относительность такого разграничения. Объяснение разрешённых и запрещённых путей реакций методами возмущения МО, корреляционных диаграмм и ароматического и антиароматического переходного состояния. Сохранение орбитальной симметрии. Правила Вудворда-Хоффмана.

3.3. Основные закономерности различных типов органических реакций с точки зрения орбитальных взаимодействий. Построение молекулярных орбиталей бензола и монозамещенных бензолов. Ориентация и реакционная способность производных бензола в реакциях электрофильного замещения с точки зрения орбитальной теории. Орбитальный и зарядовый контроль. Факторы парциальных скоростей. Селективность и её связь со структурой переходного состояния. Энергия и симметрия граничных орбиталей дизамещенных бензолов. Орбитальные коэффициенты и ориентация нуклеофильного замещения в $S_N2(Ar)$, другие механизмы ароматического нуклеофильного замещения.

3.4. Донорно-акцепторные взаимодействия в органической химии. Донорно-акцепторные взаимодействия как элементарный акт многих органических и природных процессов. Кислоты Льюиса. Жёсткие и мягкие кислоты и основания. Орбитальный и зарядовый контроль. Применение принципа ЖМКО к органическим реакциям. Кислоты Брёнстеда. Связь между протонной и льюисовской основностью, уравнение Эдвардса. Разбавленные растворы. Сила кислот и оснований. Эффекты сольватации. Кислотный и основной катализ. Специфический и общий кислотный и основной катализ. Уравнение Брёнстеда. Кислотные функции и скорости реакций. Суперкислые среды. Превращения органических молекул в суперкислых средах.

3.5. Использование квантово-химических параметров для анализа механизма органических реакций. Расчет энергий МО: циклобутadiен, бензол, этилен, циклические полиены, молекулы с гетероатомами, полициклоароматические соединения. Электронные плотности, заряды, порядки связей, поляризуемости. Теплоты атомизации полиенов. Энергетические критерии ароматичности. Энергия резонанса. Расчет физических свойств сопряженных соединений. Индексы реакционной способности. Электрофильное и нуклеофильное замещение. Реакции радикального замещения. Реакции присоединения.

3.6. Радикалы в органических реакциях. Электронная структура радикалов. Устойчивые радикалы: бензильный, аллильный. Реакции радикального присоединения и замещения. Карбены: электронная структура, электрофильные, радикальные и нуклеофильные свойства карбенов. Перегруппировки в радикальных реакциях.

4. Трудоемкость дисциплины (модуля) по видам учебных занятий, самостоятельной работы обучающихся и формам контроля

4.1. Очная форма обучения

Объем в зачётных единицах 6

4.1.1. Виды учебных занятий, самостоятельная работа обучающихся, формы контроля (в академических часах)

Вид учебной работы	Всего часов	Распределение по семестрам (в академических часах)
		1 семестр
Лекции	-	-
Лабораторные работы	-	-
Практические занятия (Семинары)	57	57
Самостоятельная работа	132	132
Курсовая работа	-	-
Другие виды занятий: контроль	27	27
Формы текущего контроля		коллоквиумы, индивидуальные отчеты
Формы промежуточной аттестации		экзамен
Итого часов	216	216

4.1.2. Содержание учебной дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам)

№ п/п	Наименование темы (раздела) дисциплины	Всего часов	Аудиторные занятия (в часах)			Самостоятельная работа (в часах)
			Лекции	Практические занятия (семинары)	Лабораторные работы	
1	Методы исследования механизма органических реакций.	35		10		25
2	Орбитальные взаимодействия в согласованных и многостадийных органических реакциях.	35		10		25
3	Основные закономерности различных типов органических реакций с точки зрения орбитальных взаимодействий.	35		10		25
4	Донорно-акцепторные взаимодействия в органической химии.	35		10		25
5	Использование квантово-химических параметров для анализа механизма органических реакций	35		10		25
6	Радикалы в органических реакциях	14		7		7
	Экзамен		27			
		216		57		132

4.1.3. Лабораторный практикум: не предусмотрен

5. Перечень учебно-методического обеспечения по дисциплине (модулю)

5.1. Основная учебная литература

1. Реутов, О. А. Органическая химия / Реутов О. А., Курц А. Л., Бутин К. П. - М.: Изд-во МГУ, т. 1-4, 1999. -545 с.
2. Соловьев, М. Е. Компьютерная химия / М. Е. Соловьев, М. М. Соловьев. –М.: Соломон-Пресс, 2005. - 536 с. Неволин, В. К. Квантовая физика и нанотехнологии / В. Неволин : пер. на англ. С. Озерина.- М.: Техносфера, 2011.- 126 с.
3. Морозов, А.А. Физические методы исследования в органической химии. Спектроскопия радиооптического диапазона и масс-спектрометрия: учебное пособие / сост. А.А. Морозов. - Издательство Омского государственного университета им. Ф.М. Достоевского, 2009 г.

5.2. Дополнительная литература

1. Российский Химический Журнал.- 2006.- Том 50.- № 6. (Проблемы водородной энергетики).
2. Магдесиева, Т. В. Применение орбитального подхода в органической химии, Методическое пособие для студентов и аспирантов/ Магдесиева Т. В. М.: МГУ, 2008. -100 с.

3. Магдесиева, Т. В. Сборник задач по курсу лекций «Применение орбитального подхода в органической химии», Методическое пособие для студентов и аспирантов. / Магдесиева, Т. В., Сазонов, П. К.М.: МГУ, 2008. -75 с.
4. Полещук, О. Х. Компьютерное моделирование химических реакций : учебное пособие / О. Х. Полещук. - Томск: ТГПУ, 2007. - 176 с.
5. Полещук, О. Х. Компьютерное моделирование химических реакций: учебное пособие/ О. Х. Полещук, Д. М. Кижнер - Томск: ТГПУ, 2007. - 159 с.
6. Минкин, В. И. Теория строения молекул / В. И. Минкин, Б. Я. Симкин, Р. М. Миняев. - Ростов/Дон.: Феникс, 1997. -560 с.
7. Pearson, R. G. Chemical Hardness / R. G. Pearson. -Wiley-VCH, 1997. -198 p.
8. Koch W. A Chemist's Guide to Density Functional Theory / W. Koch, M. C. Holthausen. -Wiley-VCH, 2000. -250 p.

5.3. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети Интернет, необходимых для освоения дисциплины (модуля)

1. **Архив журнала Science**, The American Association for the Advancement of Science (AAAS) - Американская ассоциация по развитию науки - некоммерческая организация, сообщество ученых, созданное в целях поддержки науки, НП «НЭИКОН». Лицензионной договор № 316-РН-2011 от 01.09.2011 г. на период с 01.01.2012 – бессрочно. **Сумма договора:** бесплатно. **Количество ключей (пользователей):** со всех компьютеров вуза.
2. **Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU**. При поддержке РФФИ. Лицензионное соглашение №916 от 12.01.2004 г. на период с12.01.2004 – бессрочно. **Сумма договора:** бесплатно. **Количество ключей (пользователей):** со всех компьютеров ТГПУ.
3. **Архив научных журналов 2011 Cambridge Journals Digital**. Издательство Cambridge University Press, НП «НЭИКОН». Лицензионной договор № 316-РН-2011 от 01.09.2011 г. на период с 30.03.12 - бессрочно. **Сумма договора:** бесплатно. **Количество ключей (пользователей):** со всех компьютеров вуза. <http://journals.cambridge.org/action/stream?pageId=3216&level=2>
4. **Архивы 169 журналов издательства Oxford University Press**. Издательство Oxford University Press, НП «НЭИКОН». Лицензионной договор № 316-РН-2011 от 01.09.2011 г. на период с 14.03.12 - бессрочно. **Сумма договора:** бесплатно. **Количество ключей (пользователей):** со всех компьютеров вуза. <http://www.oxfordjournals.org/>
5. **Цифровой архив электронных журналов издательства Taylor&Francis**. Издательство Taylor&Francis Group, НП «НЭИКОН». Договор №316-РН-211 от 01.09.2011 г. на период с 06.05.2013 – бессрочно. **Сумма договора:** бесплатно. **Количество ключей (пользователей):** со всех компьютеров ТГПУ. <http://arch.neicon.ru/xmlui/>
6. **УИС Россия (Университетская информационная система РОССИЯ)**. Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова (Научно-исследовательский вычислительный центр, Экономический факультет), Автономная некоммерческая организация Центр информационных исследований (АНО ЦИИ). Письмо-заявка № 21/300 от 01.03.2010 г. на период с 01.03.2010 – бессрочно. **Сумма договора:** бесплатно. **Количество ключей (пользователей):** с компьютеров библиотеки ТГПУ и при индивидуальной регистрации по запросу. <http://uisrussia.msu.ru/is4/main.jsp>
7. **БД «Марс» - сводная база данных аналитической росписи статей из периодических издания (архив 2001-2006)**. Ассоциация региональных библиотечных консорциумов (АРБИКОН). Договор № С/161-1/3 от 12.10.2009 г. на период с 12.10.2009 – бессрочно. **Сумма договора:** бесплатно. **Количество**

ключей (пользователей): со всех компьютеров вуза.
http://arbicon.ru/services/mars_analitic.html

8. **Архив журнала Nature.** Научное издательство Nature Publishing Group, НП «НЭИКОН». Лицензионный договор № 316-РН-2011 от 01.09.2011 г. на период с 27.09.12 - бессрочно. Сумма договора: оплата оказанных услуг производится из средств Минобрнауки. **Количество ключей (пользователей):** со всех компьютеров ТГПУ. <http://www.nature.com/nature/index.html>
9. **Архив 16 научных журналов издательства Wiley.** Издательство Wiley, издательство Taylor&Francis Group, НП «НЭИКОН». Лицензионный договор № 317.55.11.4002 от 01.09.2011 г. на период с 06.05.13 – бессрочно. <http://onlinelibrary.wiley.com/>
10. **Архив научных журналов SAGE Journals Online.** Издательство SAGE Publications, НП «НЭИКОН». Договор № 316-РН-2011 от 01.09.2011 г. на период с 05.02.2012 – бессрочно. <http://online.sagepub.com/>
11. **Архив научных журналов издательства IOP Publishing.** Издательство IOP Publishing Института физики Великобритании, НП «НЭИКОН». Договор № 316-РН-2011 от 01.09.2011 г. на период с 13.04.2012 – бессрочно. <http://iopscience.iop.org/>
12. **Архив электронных журналов Electronic Back Volume Sciences Collection издательства Annual Reviews.** Издательство Annual Reviews, НП «НЭИКОН». Договор № 316-РН-2011 от 01.09.2011 г. на период с 06.05.2013 – бессрочно. <http://www.annualreviews.org/>
13. <http://libserv.tspu.edu.ru> – Электронная библиотека ТГПУ.
14. <http://www.chem.msu.su/rus/jvho/welcome.html> - Российский химический журнал

5.4. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)

Операционная система Linux (или Windows) с программным обеспечением Open Office (или Microsoft Office). Расчетные квантово-химические программы: Gaussian, Chem Office, Hyper Chem, GaussView, доступ в Интернет, базы данных.

6. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)

Практические занятия проводятся в аудиториях, оснащенных комплектом мультимедийного оборудования с программным обеспечением, позволяющим использовать презентации, видеофильмы, расчетные компьютерные программы.

Наименование аудитории	Оснащенность аудитории
1. Лекционная ауд. №15 уч. корп. №7, ул. Герцена, 47. 2. Лаборатория органического синтеза и органической химии, ауд. №13 уч. корп. №7, ул. Герцена, 47.	1. Мультимедийное оборудование. 2. Вытяжные шкафы, химические столы и специализированные шкафы, лабораторная посуда, спектрофотометр и спектрометр, рефрактометр, прибор для определения температуры плавления кристаллических веществ, вискозиметры, весы, сушильный шкаф.
Компьютерный класс, ауд. №2 уч. корп. №7, ул. Герцена, 47.	Мультимедийное оборудование, компьютеры с выходом в интернет, комплект лицензионных программ, в том числе ChemOffice, HyperChem, Gaussian.

7. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)

Курс «Актуальные вопросы органической химии» включает практические занятия. Перед началом семестра студент должен ознакомиться с разделами изучаемой дисциплины и их содержанием, получить перечень вопросов, выносимых на самостоятельную работу и экзамен. Студент должен быть знаком с требованиями к уровню освоения дисциплины, формами контроля.

7.1 План самостоятельной работы

Общее количество часов, выносимых на самостоятельную работу, – 132 часов

№	Раздел дисциплины	Перечень вопросов	Кол-во часов	Форма контроля
1 семестр				
1	Методы исследования механизма органических реакций.	Квантово-химические методы расчета. Спектроскопия ЯМР и ИК.	25	индивидуальный отчет, экзамен
2	Орбитальные взаимодействия в согласованных и многостадийных органических реакциях.	Что такое орбитальный и зарядовый контроль?	25	индивидуальный отчет, экзамен
3	Основные закономерности различных типов органических реакций с точки зрения орбитальных взаимодействий.	Новые пути синтеза. Основные компоненты осуществления химических реакций. Применение принципа ЖМКО к органическим реакциям.	25	индивидуальный отчет, экзамен
4	Донорно-акцепторные взаимодействия в органической химии.	Донорно-акцепторные взаимодействия как элементарный акт многих органических и природных процессов. Суперкислые среды. Превращения органических молекул в суперкислых средах. Что такое жёсткие и мягкие кислоты и основания?	25	индивидуальный отчет, экзамен
5	Использование квантово-химических параметров для анализа механизма органических реакций	Индексы реакционной способности. Энергетические критерии ароматичности. Энергия резонанса.	25	индивидуальный отчет, экзамен
6	Радикалы в органических реакциях	Реакции радикального присоединения и замещения. Карбены: электронная структура, электрофильные, радикальные и нуклеофильные свойства карбенов. Перегруппировки в радикальных реакциях.	7	индивидуальный отчет, экзамен

8. Фонд оценочных средств для проведения текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине (модулю)

Представлен в виде отдельного документа (приложение к рабочей программе учебной дисциплины (модуля)).

Рабочая программа учебной дисциплины (модуля) составлена в соответствии с учебным планом, федеральным государственным образовательным стандартом высшего образования по направлению подготовки 44.04.01 Педагогическое образование, направленность (профиль) Химическое образование.

Рабочую программу учебной дисциплины (модуля) составил(ли):

Полещук О.Х., докт. хим. наук, профессор, профессор кафедры химии и методики обучения химии ТГПУ _____

Рабочая программа учебной дисциплины (модуля) утверждена на заседании кафедры химии и методики обучения химии

Протокол № 10 от 26 мая 2016 года.

Заведующий кафедрой химии и методики обучения химии

канд. техн. наук _____ А.Е. Иваницкий

Рабочая программа учебной дисциплины (модуля) одобрена учебно-методической комиссией биолого-химического факультета

Протокол № 5 от «26» мая 2016 года

Председатель учебно-методической комиссии

биолого-химического факультета,

канд. хим. наук, доцент _____ Е.П. Князева

