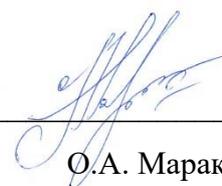


**МИНОБРНАУКИ РОССИИ**  
**Федеральное государственное бюджетное образовательное**  
**учреждение высшего образования**  
**«Ярославский государственный университет им. П.Г. Демидова»**

Институт фундаментальной и прикладной химии

УТВЕРЖДАЮ  
Декан факультета  
биологии и экологии



---

О.А. Маракаев  
«19» мая 2023 г.

**Рабочая программа дисциплины**

«Специальная дисциплина в соответствии с темой диссертации на соискание  
ученой степени кандидата наук по научной специальности  
1.4.3 Органическая химия»

программы подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре

Форма обучения очная

Программа одобрена на заседании института  
фундаментальной и прикладной химии  
протокол № 7 от «17» апреля 2023 года

Ярославль

### 1. Цели освоения дисциплины

Целью освоения дисциплины является

- знание основных законов и объектов современной органической химии;
- представление о современных синтетических методах и способов установления структуры;
- представления об основных механизмах органических реакций.

### 2. Место дисциплины в структуре программы аспирантуры

Данная дисциплина относится к разделу обязательные дисциплины (2.1.3) и направлена на подготовку к сдаче кандидатского экзамена по специальной дисциплине в соответствии с темой диссертации на соискание ученой степени кандидата наук по научной специальности 1.4.3 Органическая химия.

### 3. Планируемые результаты освоения дисциплины:

В результате освоения дисциплины аспирант должен:

Знать:

основные теоретические положения современной органической химии.

Уметь:

- осуществлять синтез заданных структур;
- анализировать структуры органических соединений;
- управлять органическим синтезом на основе знаний о механизмах реакций.

Владеть:

- методами синтеза и анализа органических структур.

### 4. Объем, структура и содержание дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 8 зачетных единиц, 288 акад. часов

Дисциплина изучается в течение четырех семестров.

№ п/п	Темы (разделы) дисциплины, их содержание	Семестр	Виды учебных занятий и их трудоемкость (в академических часах)					Формы текущего контроля успеваемости
			лекции	практические	лабораторные	консультации	самостоятельная работа	Форма промежуточной аттестации (по семестрам)
1.	Современные проблемы органической химии..	2	2			1	33	
2.	Основы современной теории строения органических структур.	2	2			1	33	
								Зачет
	Всего за семестр	2	4			2	66	
3	Механизмы органических реакций	3	2				34	

4	Интермедиаты и переходные состояния в органических реакциях	3	2				34	
								Зачет
	Всего за семестр	3	4				68	
5	Установление структуры органических соединений	4	2			1	34	
6	Методы контроля протекания органических реакций	4	2			1	34	
								Зачет
	Всего за семестр	4	4				68	
7	Реакционная способность органических соединений. Методы установления механизмов органических реакций	5	2			1	15	
8	Современные синтетические методы	5	2			1	15	
							36	Экзамен
	Всего за семестр	5	4			2	66	
	<b>Всего</b>		<b>16</b>			<b>4</b>	<b>268</b>	

### Содержание разделов дисциплины:

**Тема 1.** Современные проблемы органической химии. Физический фундамент химии. Объекты и структура органической химии сегодня. Новые химические структуры и материалы. Методы и тенденции развития органической химии.

**Тема 2.** Основы современной теории химического строения. Уравнение Шредингера для атомов и молекул. Электронные, колебательные и вращательные состояния молекул. Поверхность потенциальной энергии. Представление молекулярных орбиталей (МО) в виде линейной комбинации атомных орбиталей (ЛКАО). Связи в органических соединениях. Электронные эффекты заместителей. Межмолекулярное взаимодействие и его описание в квантовой химии. Прикладные программы квантово-химического моделирования.

**Тема 3.** Механизмы органических реакций. Формирование связей в органических структурах. Свободнорадикальные реакции, особенности их протекания. Ионные реакции, их закономерности. Факторы управления процессами.

**Тема 4.** Интермедиаты и переходные состояния в органических реакциях. Карбокатионы. Карбанионы. Карбанионы. Ион-радикалы. Карбены. Переходные состояния, их характеристики. Поиск структуры переходных состояний.

**Тема 5.** Установление структуры органических соединений. Общая схема исследования структуры органических объектов. Атомная эмиссионная спектроскопия. Электронная

спектроскопия. Методы колебательной спектроскопии. Спектроскопия ядерного магнитного резонанса. Метод электронного парамагнитного резонанса. Метод масс-спектрометрии.

**Тема 6.** Методы контроля протекания органических реакций. Хроматографические методы. Электрохимические методы. Спектральные методы. Обработка результатов анализа.

**Тема 7.** Теория реакционной способности органических соединений. Связь структура – свойства. Методология QSAR. Индексы реакционной способности: индексы свободной валентности, заряды на атомах, индексы Фукуи, энергии катионной, анионной и радикальной локализации. Кислоты и основания в органической химии. Методы установления механизмов органических реакций. Общая схема изучения механизмов органических реакций. Эксперимент и компьютерное моделирование при установлении механизмов.

**Тема 8.** Современные синтетические методы. Планирование синтеза. Информационная поддержка синтетических исследований. Синтетический анализ в планировании органического синтеза. Ретросинтетический анализ. Активация реакционных центров. Нетрадиционные способы активации. Защитные группы в синтезе. Ассиметрический синтез. Комбинаторный синтез.

## **5. Образовательные технологии, в том числе технологии электронного обучения и дистанционные образовательные технологии, используемые при осуществлении образовательного процесса по дисциплине**

В процессе обучения используются следующие образовательные технологии:

**Вводная лекция** – дает первое целостное представление о дисциплине и ориентирует студента в системе изучения данной дисциплины. Дается краткий обзор курса, история развития науки и практики, достижения в этой сфере, имена известных ученых, излагаются перспективные направления исследований. На этой лекции высказываются методические и организационные особенности работы в рамках данной дисциплины, а также дается анализ рекомендуемой литературы.

**Академическая лекция с элементами лекции-беседы** – последовательное изложение материала, осуществляемое преимущественно в виде монолога преподавателя. Элементы лекции-беседы обеспечивают контакт преподавателя с аудиторией, что позволяет привлекать внимание аспирантов к наиболее важным темам дисциплины, активно вовлекать их в учебный процесс, контролировать темп изложения учебного материала в зависимости от уровня его восприятия.

**Проблемная лекция** – изложение материала, предполагающее постановку проблемных и дискуссионных вопросов, освещение различных научных подходов, связанные с различными моделями интерпретации изучаемого материала. Проблемная лекция начинается с вопросов, с постановки проблемы, которую в ходе изложения материала необходимо решить. В лекции сочетаются проблемные и информационные начала. При этом процесс познания аспирантом в сотрудничестве и диалоге с преподавателем приближается к поисковой, исследовательской деятельности.

**Консультации** – вид учебных занятий, являющийся одной из форм контроля самостоятельной работы аспирантов. На консультациях по просьбе аспирантов рассматриваются наиболее сложные разделы дисциплины, преподаватель отвечает на вопросы аспирантов, которые возникают у них в процессе самостоятельной работы.

В процессе обучения используются следующие технологии электронного обучения и дистанционные образовательные технологии:

**Электронный учебный курс «Органическая химия» в LMS Электронный университет Moodle ЯрГУ**, в котором:

- представлены задания для самостоятельной работы аспирантов по темам дисциплины;
- представлен список литературы, рекомендуемой для освоения дисциплины;
- представлена информация о форме и времени проведения консультаций по дисциплине в случае их проведения в дистанционном формате в режиме онлайн.

## **6. Перечень основной и дополнительной литературы, ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» (при необходимости), рекомендуемых для освоения дисциплины**

### **а) основная литература**

1. Реутов О. А. Органическая химия: учебник для вузов: в 4 ч / О. А. Реутов, А. Л. Курц, К. П. Бутин; М-во образования РФ. Ч. 1. - 3-е изд. - Б.м.: Б.и., 2009. 567 с.  
[http://www.lib.uniya.ac.ru/opac/bk\\_cat\\_card.php?rec\\_id=642957&cat\\_cd=YARSU](http://www.lib.uniya.ac.ru/opac/bk_cat_card.php?rec_id=642957&cat_cd=YARSU)
2. Реутов О. А. Органическая химия: учебник для вузов: в 4 ч / О. А. Реутов, А. Л. Курц, К. П. Бутин; М-во образования РФ. Ч. 2. - 3-е изд. испр. - Б.м.: Б.и., 2009. 623 с.  
[http://www.lib.uniya.ac.ru/opac/bk\\_cat\\_card.php?rec\\_id=643328&cat\\_cd=YARSU](http://www.lib.uniya.ac.ru/opac/bk_cat_card.php?rec_id=643328&cat_cd=YARSU)
3. Реутов О. А. Органическая химия: учебник для вузов: в 4 ч / О. А. Реутов, А. Л. Курц, К. П. Бутин; М-во образования РФ. Ч. 3. - 3-е изд. испр. - Б.м.: Б.и., 2009. 544 с.  
[http://www.lib.uniya.ac.ru/opac/bk\\_cat\\_card.php?rec\\_id=643357&cat\\_cd=YARSU](http://www.lib.uniya.ac.ru/opac/bk_cat_card.php?rec_id=643357&cat_cd=YARSU)
4. Реутов О. А. Органическая химия: учебник для вузов: в 4 ч / О. А. Реутов, А. Л. Курц, К. П. Бутин; М-во образования РФ. Ч. 4. - 3-е изд. испр. - Б.м.: Б.и., 2009. 723 с.  
[http://www.lib.uniya.ac.ru/opac/bk\\_cat\\_card.php?rec\\_id=643384&cat\\_cd=YARSU](http://www.lib.uniya.ac.ru/opac/bk_cat_card.php?rec_id=643384&cat_cd=YARSU)
5. Титце Л., Айхер Т. Препаративная органическая химия: Реакции и синтезы в практикуме органической химии и научно-исследовательской лаборатории. Пер. с нем. – М.: Мир. 1999. 704 с.  
[http://lib.uniya.ac.ru/opac/bk\\_cat\\_card.php?rec\\_id=283122&cat\\_cd=YARSU](http://lib.uniya.ac.ru/opac/bk_cat_card.php?rec_id=283122&cat_cd=YARSU)

### **б) дополнительная литература**

#### **б) дополнительная литература**

1. Свойства органических соединений. Справочник / под ред. А.А. Потехина. - Л.: Химия, 1984.
2. Задачи по органической химии с решениями: учебное пособие / Курц А.Л. и др. - 2-е изд., испр. - М.: БИНОМ, Лаборатория знаний, 2006. 264 с.  
[http://www.lib.uniya.ac.ru/opac/bk\\_cat\\_card.php?rec\\_id=356407&cat\\_cd=YARSU](http://www.lib.uniya.ac.ru/opac/bk_cat_card.php?rec_id=356407&cat_cd=YARSU)

### **в) ресурсы сети «Интернет» (при необходимости)**

1. Электронная библиотека учебных материалов ЯрГУ ([http://www.lib.uniya.ac.ru/opac/bk\\_cat\\_find.php](http://www.lib.uniya.ac.ru/opac/bk_cat_find.php)).
2. Химический факультет МГУ (<http://www.chem.msu.ru/>).

## **7. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине**

Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине включает в свой состав следующие помещения:

- учебные аудитории для проведения лекций;
- учебные аудитории для проведения групповых и индивидуальных консультаций;
- учебные аудитории для проведения промежуточной аттестации;

- помещения для самостоятельной работы.

Помещения для самостоятельной работы оснащены компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду ЯрГУ.

Автор:

Профессор института  
фундаментальной и прикладной химии, д.х.н.  
*(должность, ученая степень)*

  
*(подпись)*

В.Ю. Орлов  
*(Фамилия И.О.)*

**Приложение №1 к рабочей программе дисциплины**  
«Специальная дисциплина в соответствии с темой диссертации  
на соискание ученой степени кандидата наук»  
по научной специальности 1.4.3 Органическая химия

**Оценочные материалы**  
**для проведения текущей и/или промежуточной аттестации**  
**аспирантов по дисциплине**

**1. Контрольные задания и (или) иные материалы,**  
**используемые в процессе текущего контроля успеваемости**

**Задания для самостоятельной работы:**

1. Ознакомление с основной и дополнительной литературой по тематике лекций.
2. Ознакомление с периодической литературой по тематике лекций и подготовка обзоров современного состояния проблемы.

**2. Список вопросов и (или) заданий для проведения промежуточной аттестации**

**1.1 Список вопросов и (или) заданий для проведения промежуточной аттестации**

**Список вопросов к зачету (2 семестр):**

1. Иерархия общих проблем химии.
2. Химический синтез.
3. Управление химическими процессами.
4. Химическая структура и функция.
5. Классические подходы к выявлению количественных соотношений структура – активность. Общее понятие о дескрипторах молекулярной структуры.
6. Компьютерные технологии в химии.
7. Основы компьютерного молекулярного моделирования и QSAR.
8. Связь биологических свойств и структуры органических соединений.
9. Основные понятия медицинской химии. Биологические мишени действия физиологически активных веществ и принципы создания структур лигандов этих мишеней.
10. Принципы зеленой химии. Новые подходы к использованию природных ресурсов. Критерии «зеленого» процесса. Оценка химических реакций и процессов с точки зрения зеленой химии.
11. Химическая аналитика и диагностика.
12. Химические основы жизни. Биомолекулы: структура и свойства. Биосинтез.
13. Объекты нанохимии. Свойства наноразмерных объектов. Методы синтеза наноразмерных частиц. Нанореакторы.
14. Понятие супрамолекулярной химии.
15. Общие принципы создания полимерных композиционных материалов. Классификация полимерных композиционных материалов и полимерных нанокомпозитов.
16. Уравнение Шредингера для атомов и молекул. Электронные, колебательные и вращательные состояния молекул. Представление молекулярных орбиталей (МО) в виде линейной комбинации атомных орбиталей (ЛКАО).

17.Электронные эффекты заместителей. Влияние электронных эффектов заместителей на стабильность и реакционную способность органических соединений и промежуточных частиц. Резонансные структуры, правила их построения.

#### Список вопросов к зачету (3 семестр):

1. Какие существуют подходы к классификации реакций?
2. Проиллюстрируйте любыми примерами следующие термины: электрофил, нуклеофил, карбен, радикал, анион-радикал, карбокатион, карбанион.
3. Укажите тип реакции –  $S_N2$ , приведите конкретный пример, разберите по стадиям.
4. К какому типу реакций относится полимеризация?
5. Дайте определение понятиям: гомолитические (радикальные реакции) и гетеролитические (ионные реакции). Какими особенностями связи обусловлен ее распад по гомолитическому или гетеролитическому механизму?
6. Изобразите схемой и кратко изложите современные представления о механизме реакции нитрования бензола. В каком валентном состоянии (тип гибридизации) находится атом углерода в интермедиатах?
7. Рассмотрите механизм бромирования 2,2,5,5-тетраметилгексана. Укажите медленную стадию. Приведите ряд изменения реакционной способности галогенов в реакции с 2,2,5,5-тетраэтилгексаном. Дайте объяснения.
8. Как классифицируются органические реакции по характеру реагирующих частиц? Приведите примеры: а) нуклеофильного реагента и нуклеофильной реакции, б) электрофильного реагента и электрофильной реакции.

#### Список вопросов к зачету (4 семестр):

1. Физико-химические методы анализа. ИК-, УФ- спектроскопия.
2. Хроматографический анализ.
3. ЯМР анализ.
4. Хромато-масс спектрометрия.
6. Химические методы анализа.
7. Метод титриметрического анализа.
8. Микроскопия в химии.

#### Список вопросов к экзамену.

Кандидатский экзамен по специальной дисциплине проводится устно по экзаменационным билетам.

Каждый экзаменационный билет содержит три вопроса.

На подготовку к ответу дается от 60 до 120 минут.

1. Уравнение Шредингера для атомов и молекул. Электронные, колебательные и вращательные состояния молекул. Представление молекулярных орбиталей (МО) в виде линейной комбинации атомных орбиталей (ЛКАО).
2. Электронные эффекты заместителей. Влияние электронных эффектов заместителей на стабильность и реакционную способность органических соединений и промежуточных частиц. Резонансные структуры, правила их построения.
3. Кислоты и основания (И.Бренстед, Г.Льюис). Сопряженные кислоты и сопряженные основания. Кислотно-основные равновесия. Константа кислотности  $pK_a$ , константа основности  $pK_b$ . Влияние заместителей в молекуле на кислотность и основность органических соединений. Теория жестких и мягких кислот и оснований (ЖМКО).
4. Радикальные реакции алканов. Хлорирование метана. Механизм

5. Электрофильное присоединение к алкенам. Присоединение хлора и брома к алкенам. Механизм, стереохимия, влияние заместителей на стереохимию присоединения.
6. Механизмы органических реакций. Формирование связей в органических структурах. Реакции нуклеофильного замещения у насыщенного атома углерода в алкилгалогенидах как метод создания связи углерод — углерод, углерод — азот, углерод — кислород, углерод — сера, углерод — фосфор (получение алкилгалогенидов, спиртов, тиолов, простых эфиров, нитросоединений, аминов, нитрилов, сложных эфиров и др.)
7. Механизмы органических реакций.. Реакции элиминирования.  $\alpha$ - и  $\beta$ -Элиминирование. Классификация механизмов  $\beta$ - элиминирования: E1, E2 и E1cb. Направление элиминирования.
8. . Механизм реакций электрофильного замещения в ароматическом ряду. Представление о  $\pi$ - и  $\sigma$ -комплексах. Аренииевые ионы в реакциях электрофильного замещения. Электронодонорные и электроноакцепторные заместители. Согласованная и несогласованная ориентация двух или нескольких заместителей в ароматическом кольце.
9. Общие представления о механизме нуклеофильного замещения. Механизм отщепления-присоединения. Механизм присоединения-отщепления  $S_NAr$ . Анионные  $\sigma$ -комплексы Мейзенгеймера и их строение.  $S_N1$ -Механизм ароматического нуклеофильного замещения в реакциях гидролиза катиона арендиазония. Механизм  $S_{RN}1$  в ароматическом ряду и область его применения. Иницирование ион-радикальной цепи..
10. Основные типы интермедиатов. Особенности структуры и поведения радикальных частиц.
11. Основные типы интермедиатов. Особенности структуры и поведения ионных частиц.
12. Основные типы интермедиатов. Особенности структуры и поведения ион-радикальных частиц.
13. Установление структуры органических соединений. Общая схема исследования структуры органических объектов.
14. Теория реакционной способности органических соединений. Связь структура – свойства. Методология QSAR.
15. . Индексы реакционной способности: индексы свободной валентности, заряды на атомах, индексы Фукуи, энергии катионной, анионной и радикальной локализации.
16. Современные синтетические методы. Планирование синтеза. Информационная поддержка синтетических исследований.
17. Синтетический анализ в планировании органического синтеза. Ретросинтетический анализ.
18. Активация реакционных центров. Нетрадиционные способы активации.
19. Защитные группы в синтезе.
20. Ассиметрический синтез.
21. Комбинаторный синтез.

## 2.1 Описание процедуры выставления оценки

По итогам зачета выставляется одна из оценок: «зачтено», «незачтено».

Правила выставления оценки на зачете:

Устный ответ студента на зачете оценивается по 2-х балльной системе.

Отметка «зачтено» ставится, если:

- знания отличаются глубиной и содержательностью, дается полный исчерпывающий ответ, как на основные вопросы к зачету, так и на дополнительные;

- аспирант свободно владеет научной терминологией;
- ответ аспиранта структурирован, содержит анализ существующих теорий, научных школ, направлений и их авторов;
- ответ аспиранта логично и доказательно раскрывает проблему, предложенную для решения;
- ответ аспиранта характеризуется глубиной, полнотой и не содержит фактических ошибок;
- ответ аспиранта иллюстрируется примерами, в том числе из собственной научно-исследовательской деятельности;
- аспирант демонстрирует умение аргументировано вести диалог и научную дискуссию;
- аспирант демонстрирует навыки поиска и обработки научной информации и экспериментальных данных.

Отметка «незачтено» ставится, если:

- ответ аспиранта обнаружил незнание или непонимание сущностной части дисциплины;
- содержание вопросов не раскрыто, допускаются существенные фактические ошибки, которые аспирант не может исправить самостоятельно;
- на большую часть дополнительных вопросов по содержанию зачета аспирант затрудняется дать ответ или не дает верных ответов;
- аспирант не демонстрирует навыки поиска и обработки научной информации и экспериментальных данных.

По итогам экзамена выставляется одна из оценок: «отлично», «хорошо», «удовлетворительно» или «неудовлетворительно».

**Оценка «Отлично»** выставляется аспиранту, который демонстрирует глубокое и полное владение содержанием материала и понятийным аппаратом дисциплины; осуществляет межпредметные связи; умеет связывать теорию с практикой. Аспирант дает развернутые, полные и четкие ответы на вопросы экзаменационного билета и дополнительные вопросы, соблюдает логическую последовательность при изложении материала. Грамотно использует научную терминологию.

**Оценка «Хорошо»** выставляется аспиранту, ответ которого на экзамене в целом соответствует указанным выше критериям, но отличается меньшей обстоятельностью, глубиной, обоснованностью и полнотой. В ответе имеют место отдельные неточности (несущественные ошибки), которые исправляются аспирантом после дополнительных и (или) уточняющих вопросов экзаменатора.

**Оценка «Удовлетворительно»** выставляется аспиранту, который дает недостаточно полные и последовательные ответы на вопросы экзаменационного билета и дополнительные вопросы, но при этом демонстрирует умение выделить существенные и несущественные признаки и установить причинно-следственные связи. При ответах аспирант допускает ошибки в определении и раскрытии отдельных понятий, формулировке положений, которые аспирант затрудняется исправить самостоятельно. При аргументации ответа аспирант не обосновывает свои суждения. На часть дополнительных вопросов студент затрудняется дать ответ или дает неверные ответы.

**Оценка «Неудовлетворительно»** выставляется аспиранту, который демонстрирует разрозненные, бессистемные знания; беспорядочно и неуверенно излагает материал; не умеет выделять главное и второстепенное, не умеет соединять теоретические положения с практикой, не устанавливает межпредметные связи; допускает грубые ошибки при определении сущности раскрываемых понятий, явлений, вследствие непонимания их существенных и несущественных признаков и связей; дает неполные ответы, логика и последовательность изложения которых имеют существенные и принципиальные нарушения, в ответах отсутствуют выводы. Дополнительные и уточняющие вопросы экзаменатора не приводят к коррекции ответов аспиранта.

**Оценка «Неудовлетворительно»** выставляется также аспиранту, который взял экзаменационный билет, но отвечать отказался.