

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ  
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
Ярославский государственный университет им. П.Г. Демидова  
Факультет биологии и экологии

УТВЕРЖДАЮ

Проректор по развитию образования  
\_\_\_\_\_ Е.В.Сапир

" \_\_\_\_ " \_\_\_\_\_ 2012 г.

**Рабочая программа дисциплины  
послевузовского профессионального образования  
(аспирантура)  
Физическая органическая химия**

**по специальности научных работников**

**02.00.04 – Физическая химия**

Ярославль 2012

## 1. Цели освоения дисциплины

Целями освоения дисциплины «Физическая органическая химия» в соответствии с общими целями основной профессиональной образовательной программы послевузовского профессионального образования (аспирантура) (далее - образовательная программа послевузовского профессионального образования) являются формирование у студентов представлений о применимости теорий, концепций и методов физической химии для описания структуры органических соединений и анализа их реакционной способности.

## 2. Место дисциплины в структуре ООП послевузовского профессионального образования (аспирантура)

Данная дисциплина относится к разделу обязательные дисциплины (подраздел дисциплины по выбору аспиранта) образовательной составляющей образовательной программы послевузовского профессионального образования по специальности научных работников 02.00.04 Физическая химия.

Для изучения данной дисциплины необходимы «входные» знания, умения, полученные в процессе обучения по программам специалитета или бакалавриата – магистратуры:

- знание основ физической химии, органической химии, квантовой химии;
- владение современными физико-химическими методами исследования.

Дисциплина является предшествующей для выполнения диссертационной работы.

## 3. Требования к результатам освоения содержания дисциплины

В результате освоения дисциплины «Физическая органическая химия» обучающийся должен:

### **Знать:**

- теоретические основы органической и физической химии;
- основные методы теоретического анализа структуры органических соединений;
- основные закономерности связи между строением органических соединений и их реакционной способностью.

### **Уметь:**

- производить теоретические расчеты структуры и свойств органических соединений;
- применять физико-химические подходы к исследованию органических реакций;
- устанавливать закономерности связи между строением органических соединений и их реакционной способностью на основании данных эксперимента.

### **Владеть:**

– современными операционными системами и методами обработки с их помощью экспериментальных результатов и данных квантово-химических расчетов.

#### 4. Структура и содержание дисциплины «Физическая органическая химия»

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 зачетных единицы, 72 часа.

№ п/п	Раздел Дисциплины	Курс	Неделя	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу обучающихся, и трудоемкость (в часах) Форма обуч.: очная/заочная					Формы текущего контроля успеваемости (по неделям) Форма промежуточной аттестации
				Лекций	Лабораторных	Практических	Сам. работа	Контроль сам. работы	
1.	Основы классической теории химического строения.	1	1-4	2			17		Устный опрос
2.	Теоретические методы исследования строения органических соединений.	1	5-8				17		Устный опрос
3.	Методы исследования механизма химических реакций и структуры реагирующих частиц.	1	9-12	2			17		Устный опрос
4.	Связь структуры с реакционной способностью органических соединений.	1	13-15				17		Контрольная работа
<b>Итого</b>				<b>4</b>			<b>68</b>		<b>Зачет</b>

#### 5. Образовательные технологии

Чтение лекций с применением мультимедийного оборудования, самостоятельная работа с научной литературой с использованием доступа к электронным библиотекам и базам данных научных статей ведущих мировых издательств, самостоятельная работа на ПК с использованием оригинального программного обеспечения, лекции и мастер-классы ведущих ученых.

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

В качестве средств текущего контроля используется устный опрос, а также проведение контрольной работы. Промежуточная аттестация (зачет) дает возможность выявить уровень профессиональной подготовки аспиранта по данной дисциплине.

##### Пример варианта контрольной работы

1. Осуществить расчет структуры молекулы указанного соединения (4-хлор-6-цианохиолин) полуэмпирическим (AM1) и неэмпирическим (HF 6-31G\*) методами. Изобразить схематично вид граничных молекулярных орбиталей. Определить

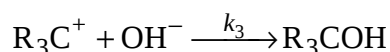
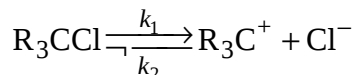
направление электрофильной и нуклеофильной атак в случае зарядово контролируемой и орбитально контролируемой реакций. Определить величины потенциала ионизации и энергии сродства к электрону.

2. Функция Гаммета для пара-заместителей X и константа скорости реакции  $\text{RO}_2^\bullet$  с каждым из стерически затрудненных фенолов соответственно равны:

X	H	$\text{NO}_2$	$\text{Me}_3\text{C}$	Me	$\text{Me}_3\text{CO}$	MeO
$k \cdot 10^{-4}$ , л/(моль·с)	1, 1	0,16	3,3	3,7	12,0	23,0
$\sigma$	0	0,77 8	- 0,197	- 0,170	-0,32	0,268

Выполняется ли линейная корреляция Гаммета для этой серии реакций?

3. Щелочной гидролиз третичных алкилгалогенидов протекает по механизму:



Выведите кинетическое уравнение для скорости процесса гидролиза. При каком соотношении констант скоростей отдельных стадий процесс будет иметь общий а) первый, б) второй порядок?

### Вопросы к зачету

1. Химическая связь и строение молекул.
2. Электронная природа химической связи.
3. Стереохимия и конформационный анализ в органических соединениях.
4. Уравнение Шредингера для атомов и молекул.
5. Электронные, колебательные и вращательные состояния молекул.
6. Поверхность потенциальной энергии органических соединений. Внутренние вращения и конформационные переходы.
7. Полуэмпирические методы расчета строения и свойств органических молекул.
8. Неэмпирические методы расчета строения и свойств органических молекул.
9. Качественная теория реакционной способности органических соединений.
10. Химические методы исследования механизма органических реакций и структуры реагирующих частиц.
11. Физические и физико-химические методы исследования механизма органических реакций и структуры реагирующих частиц.
12. Компьютерное моделирование механизма органических реакций.
13. Квантово-химический анализ направления и скорости органических реакций.
14. Инструментальные методы установления структуры органических веществ.
15. Экспериментальные методы исследования кинетики органических реакций.
16. Общие концепции связи структуры с реакционной способностью органических соединений.
17. Классификация органических реакций по типу образования и разрыва связей.
18. Термодинамика и кинетика — инструменты исследования механизма химических реакций.
19. Основные постулаты химической термодинамики.
20. Кинетика химических реакций.
21. Элементарные газофазные реакции.
22. Химические реакции в жидкой фазе.
23. Корреляционные уравнения в химической кинетике.
24. Основные типы гомогенного и гетерогенного катализа.

### 7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

*а) основная литература:*

1. Реутов О. А., Курц А. Л., Бутин К. П. Органическая химия : учебник для вузов. В 4 ч. – М.: БИНОМ, Лаборатория знаний, 2009. – 726 с.
2. Ипполитов Е.Г., Артемов А.В., Батраков В.В. Физическая химия: учебник для вузов. – М.: Академия, 2005. – 448 с.

*б) дополнительная литература:*

1. Гаммет Л. Основы физической органической химии. – М.: Мир, 1972. – 536 с.
2. Пальм В.А. Введение в теоретическую органическую химию. – М.: Высш. школа, 1974. – 446 с.
3. Пальм В.А. Основы количественной теории органических реакций. – Л.: Химия, 1967. – 356 с.
4. Сайкс П. Механизмы реакций в органической химии. – М.: Химия, 1973. – 320 с.
5. Барановский В. И. Квантовая механика и квантовая химия. – М.: Академия, 2008. – 384 с.

*в) программное обеспечение и Интернет-ресурсы:*

1. NIST Chemistry WebBook. — <http://webbook.nist.gov/chemistry/>
2. NIST Computational Chemistry Comparison and Benchmark DataBase. — <http://cccbdb.nist.gov/>

**8. Материально-техническое обеспечение дисциплины**

Мультимедийный проектор, набор электронных презентаций.

Программа составлена в соответствии с федеральными государственными требованиями к структуре основной профессиональной образовательной программы послевузовского профессионального образования (аспирантура) (приказ Минобрнауки от 16.03.2011 г. № 1365) с учетом рекомендаций, изложенных в письме Минобрнауки от 22.06.2011 г. № ИБ – 733/12.

Программа одобрена на заседании кафедры общей и физической химии  
19.10.2012 (протокол № 2)

Заведующий кафедрой

Плисс Е.М., доктор хим. наук, профессор

Автор

Плисс Е.М., доктор хим. наук, профессор