

ФЕДЕРАЛЬНОЕ АГЕНТСТВО НАУЧНЫХ ОРГАНИЗАЦИЙ

**Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Новосибирский институт органической химии им. Н.Н. Ворожцова
Сибирского отделения
Российской академии наук (НИОХ СО РАН)**

УТВЕРЖДАЮ

Врио директора НИОХ СО РАН,
д.ф.-м.н., проф.

_____ Е.Г. Багрянская

« ____ » _____ 201__ г.

Теоретические основы органической химии

**Модульная программа лекционного курса, семинаров, самостоятельной
работы аспирантов**

Направление подготовки 04.06.01 «Химические науки»

Учебно-методический комплекс

Новосибирск 2014

Учебно-методический комплекс предназначен для аспирантов Новосибирского института органической химии им. Н.Н. Ворожцова Сибирского отделения Российской академии наук, направление подготовки 04.06.01 «Химические науки». В состав пособия включены программа курса лекций, структура курса и правила модульно-рейтинговой системы обучения (ИКИ – Индивидуальный кумулятивный индекс), приведены примеры заданий контрольных работ, коллоквиумов, вопросы и задачи, предлагаемые на диф. зачете и экзамене, темы докладов, а также задачи на применение методов квантовой химии.

Составитель:
проф., д.х.н. Г. И. Бородин

Содержание

Аннотация рабочей программы	4
1. Цели освоения дисциплины	5
2. Место дисциплины в структуре ООП	5
3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины	6
4. Структура и содержание дисциплины	7
Программа курса лекций	10
5. Образовательные технологии	14
6. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы аспирантов. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины.	14
Правила ИКИ	15
Темы докладов	15
Задания на применение методов квантовой химии	16
Примерные вопросы для коллоквиума	16
Примеры контрольных работ	17
Перечень теоретических вопросов к диф. зачету с примерами задач	18
7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины. Оценочные средства для текущего и итогового контроля успеваемости	23
Рекомендованная литература	23
8. Материально-техническое обеспечение дисциплины	23

Аннотация рабочей программы

Дисциплина «Теоретические основы органической химии» относится к вариативной части (профильные дисциплины) высшего профессионального образования (аспирантура) по направлению подготовки 04.06.01 «Химические науки» (Исследователь. Преподаватель-исследователь). Данная дисциплина реализуется в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Новосибирском институте органической химии им. Н.Н. Ворожцова Сибирского отделения Российской академии наук (НИОХ СО РАН).

Содержание дисциплины охватывает круг решения теоретических вопросов в области строения и реакционной способности органических соединений, установления механизмов органических реакций, влияние структуры и растворителя на реакционную способность, применение общих принципов органической химии, корреляционного анализа и квантово-химических расчетов для выявления связи «структура-свойство».

Дисциплина нацелена на формирование у выпускника, освоившего программу аспирантуры, универсальных компетенций УК-1, УК-2, УК-3, УК-4, УК-5, общепрофессиональных компетенций ОПК-1, ОПК-2, ОПК-3.

Преподавание дисциплины предусматривает следующие формы организации учебного процесса: лекции, семинары, доклады аспирантов, контрольные работы, коллоквиумы, проведение квантово-химических расчетов на ЭВМ, самостоятельная работа аспиранта. Программой дисциплины предусмотрены следующие виды контроля: текущий контроль успеваемости в форме контрольной работы, коллоквиума, оценки доклада аспиранта. Заключительный контроль: дифференциальный зачет и экзамен.

Текущий контроль. Прохождение аспирантами курса проходит с использованием системы ИКИ (индивидуального кумулятивного индекса). В течение весеннего семестра аспиранты проходят следующие контрольные точки: пишут 2 контрольные работы, сдают 2 коллоквиума, готовят и сдают 9 домашних заданий. Кроме того, преподаватель оценивает уровень подготовки аспиранта к каждому семинарскому занятию. В течение осеннего семестра аспиранты также проходят контрольные точки: пишут 2 контрольные работы, сдают 2 коллоквиума, готовят и сдают 9 домашних заданий и делают презентацию доклада по предварительно выбранной теме.

Все контрольные точки оцениваются баллами, и к концу каждого семестра аспирант набирает некоторую сумму баллов, которая при преодолении заранее определенного барьера может привести к получению им итоговой оценки «автоматом» (от «удовлетворительно» до «отлично»). Не прохождение обязательной контрольной точки аспирантом является причиной не допуска к диф. зачету или экзамену.

Итоговый контроль. Итоговую оценку за семестр аспирант может получить на диф. зачете или экзамене в конце семестра, где аспирант имеет возможность либо повысить оценку, полученную им «автоматом», либо получить любую положительную (или неудовлетворительную) оценку в случае отсутствия у него «оценки-автомата» по результатам системы ИКИ.

Общая трудоемкость дисциплины составляет 8 зачетных единиц, 288 академических часов. Программой дисциплины предусмотрены 78 часов лекционных и 54 часа семинарских занятий, а также 113 часов самостоятельной работы аспирантов, включая подготовку к контрольным работам, коллоквиумам, к презентации, решение домашних заданий, проведение квантово-химических расчетов, подготовка к диф. зачету и экзамену.

1. Цели освоения дисциплины

Курс ставит своей целью усвоение аспирантами теоретических основ органической химии и развивает базовые навыки в определении строения органических молекул, оценке их реакционной способности, интерпретации механизмов органических реакций на основе знаний о свойствах интермедиатов, переходных состояний, с использованием общих принципов органической химии, данных квантово-химических расчетов, корреляционных соотношений и других подходов.

В первой части, курс ТООХ знакомит аспирантов с общими представлениями квантовой химии, методологией применения квантово-химических расчетов для решения задач органической химии. Аспиранты изучают теорию гибридизации, метод возмущений молекулярных орбиталей, особенности строения соединений с гиперкоординированным углеродом, молекул с «инвертированной геометрией» и с неклассическими искажениями кратных связей. Представления о характере орбиталей в напряженных циклах интерпретируются на основе связи межорбитального и валентного углов. Значительное внимание уделяется изучению основных положений теории валентности, теории резонанса, применению принципов "максимального орбитального перекрывания", "изоэлектронности-изоэлектронности" при определении строения органических молекул, включая кислород-, азот- и галоген-центрированные структуры. Аспиранты применяют теорию отталкивания электронных пар, качественную теорию МО для оценки особенностей геометрии органических соединений, содержащих нейтральные или заряженные атомы азота, кислорода, галогенов и некоторых других элементов. Особое место занимает изучение подходов к определению степени ароматичности бензоидных и небензоидных систем, взаимном влиянии атомов в молекулах, механизмам влияния заместителей на реакционную способность органических соединений и количественным подходам в оценке этого влияния.

Во второй части курса аспиранты изучают методологию установления механизмов органических реакций, строение и свойства активных промежуточных частиц. Большое внимание уделяется современным представлениям о механизмах основных типов органических реакций. Аспирант готовит презентацию-доклад по одной из актуальных тем современной теоретической химии.

Семинарские занятия проводятся с использованием базисных понятий и принципов, данных аспирантам на лекциях.

Основной целью освоения дисциплины является усвоение аспирантами базовых положений и концепций теоретической органической химии, умение пользоваться ими и понимание аспирантами сложных химических превращений, механизмов органических реакций, осмысленное применение принципов физической органической химии и квантово-химических расчетов.

2. Место дисциплины в структуре ООП

Дисциплина «Теоретические основы органической химии» относится к вариативной части блока 1 структуры программы аспирантуры по направлению подготовки 04.06.01 «Химические науки» (Исследователь. Преподаватель-исследователь).

Дисциплина «Теоретические основы органической химии» опирается на следующие дисциплины:

- Физическая химия (основные законы, метод МО и строение молекул);
- Органическая химия (многообразие органических молекул, их дизайн, механизмы реакций);
- Физика (квантовая физика);
- Строение вещества (методы установления строения органических молекул);
- Химическая кинетика (подходы к установлению механизмов органических реакций);
- Физические методы установления строения органических соединений;

- Стереохимия органических соединений (стереохимические закономерности).
Результаты освоения дисциплины «Теоретические основы органической химии» используются в следующих дисциплинах:
- Научно-исследовательская практика;
- Итоговая государственная аттестация.

3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины «Теоретические основы органической химии».

Универсальные компетенции:

- способность к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерирование новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях (УК-1);
- 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 (УК-2);
- готовность участвовать в работе российских и международных исследовательских коллективов по решению научных и научно-образовательных задач (УК-3);
- готовность использовать современные методы и технологии научной коммуникации на государственном и иностранном языках (УК-4);
- способность планировать и решать задачи собственного профессионального и личностного развития (УК-5).

Общепрофессиональные компетенции:

- способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий (ОПК-1);
- готовность организовать работу исследовательского коллектива в области химии и смежных наук (ОПК-2);
- готовность к преподавательской деятельности по основным образовательным программам высшего образования (ОПК-3).

В результате освоения дисциплины обучающийся должен:

- знать основные понятия квантовой, физической органической химии;
- уметь применять общие принципы физической органической химии;
- уметь анализировать физико-химические и расчетные данные о строении органических молекул, их реакционной способности, устанавливать механизмы органических реакций;
- уметь предсказывать и объяснять наиболее вероятные направления химических превращений органических соединений, пользуясь представлениями о реакционной способности функциональных групп, строении органических соединений, общими теоретическими принципами и концепциями.

4. Структура и содержание дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 8 зачетных единиц, 288 академических часов. Программой дисциплины предусмотрены 78 часов лекционных и 54 часа семинарских занятий, а также 113 часов самостоятельной работы аспирантов.

Раздел дисциплины	Виды учебной работы и трудоемкость (в часах)							Контроль
	Лекции	Семин. занятия	Контр. работа	Коллоквиумы	Дом. задания	Сам. работа	Диф. зач., экзамен	
Волновое уравнение Шредингера. Неэмпирические и полуэмпирические расчеты, их сравнительная оценка. Метод валентных связей и качественная концепция резонанса.	2					2		
Природа связи в органических соединениях. Водородная связь. Теория молекулярных орбиталей.	4					4		
Теория возмущений молекулярных орбиталей (ВМО) в органической химии. Принципы метода ВМО.	2	2			1	2		Дом. задание
Теорема парности. Связывание нечетных альтернантных систем. Связывание четной и нечетной альтернантных систем.	2	2			1	2		Дом. задание
Теория гибридизации.	2	2			1	2		Дом. задание
Соединения с "инвертированной" геометрией.	2	2			1	2		Дом. задание
Принцип "изоэлектронности-изоструктурности". Стереохимические особенности N, O, Hal-центрированных органических соединений	2	2			1	2		Дом. задание
Теория отталкивания электронных пар валентных орбиталей. Качественная теория молекулярных орбиталей для предсказания геометрии молекул. Гош-эффект и др.	2	2	2	2	1	8		Коллоквиум, контр. работа
Ароматические соединения. Критерии ароматичности.	2	2			1	2		Дом. задание
Понятие ароматичности, неароматичности и антиароматичности по Дьюару и Бреслоу. Метод ВМО и ароматичность углеводов. Типы ароматических систем.	2	2			1	2		Дом. задание

Раздел дисциплины	Виды учебной работы и трудоемкость (в часах)							Контроль
	Лекции	Семин. занятия	Контр. работа	Коллоквиумы	Дом. задания	Сам. работа	Диф. зач., экзамен	
Полярность ковалентных связей. Дипольные моменты связей и молекул. Шкалы электроотрицательности.	2	2				2		
Индукционный механизм передачи влияния заместителей. Уравнение Тафта.	2	2			1	2		Дом. задание
Сопряженный механизм передачи влияния заместителей. Правило винил-логи. Уравнение Гаммета.	2	2			1	2		Дом. задание
Принцип полилинейности. Проблема множественности шкал констант заместителей.	4					4		
Концепция жестких и мягких кислот и оснований.	2	2			1	2		Дом. задание
Природа связи металл-лиганд в МОС	2	2				2		
МОС ПЭ с двух-, трех-, четырех-, пяти-, шести-, семи- и одноэлектронными лигандами.	4		2	2		8		Коллоквиум, контр. работа
Методы установления механизмов реакций.	2							
Правила Вудворда-Гоффмана для перicyклических реакций.	2	2			1	2		Домашнее задание
Основные типы активных промежуточных частиц. СН-, NH-, OH-кислотность. Свойства карбанионов. Илиды.	2	2			1	2		Домашнее задание
Основные типы карбокатионов, методы генерирования и относительная устойчивость.	2	2						
Перегруппировки карбокатионов, неклассические карбокатионы. Нитрениевые ионы.	2	2			1	2		Домашнее задание
Свободные радикалы, свойства и относительная устойчивость.	2	2			1	2		Домашнее задание
Ион-радикалы, строение и свойства.	2				1	2		Домашнее задание
Карбены. Метод матричной изоляции. Метод ХПЯ.	2	2						
Арины, строение и свойства.	2	2						
π-Комплексы. Донорно-акцепторная связь.	2					2		

Раздел дисциплины	Виды учебной работы и трудоемкость (в часах)							Контроль
	Лекции	Семин. занятия	Контр. работа	Коллоквиумы	Дом. задания	Сам. работа	Диф. зач., экзамен	
Соотношение кинетических и термодинамических параметров химических реакций. Уравнение Маркуса.	2		2	2		8		Коллоквиум, контр. работа
Механизм реакций электрофильного ароматического замещения (нитрование, алкилирование). Соотношение селективностей Брауна-Стока.	2*	2						
Механизм реакций электрофильного ароматического замещения (галогенирование, сульфирование).	2*	2			1	2		Домашнее задание
Современные представления о механизме нуклеофильного ароматического замещения.	2*	2			1	2		Домашнее задание
Механизмы замещения у насыщенного атома углерода.	2*	2						
Механизмы реакций присоединения по кратным связям	2*	2						
Спектр механизмов реакций отщепления.	2*	2			1	2		Домашнее задание
Молекулярные перегруппировки	4*	2	2	2		8		Коллоквиум, контр. работа
						8		Подготовка доклада
						4		Решение задач
						9	2	Диф. зачет
						18	6	Экзамен
Всего:	78	54	8	8	19	113	8	Всего 288

* Вводная часть осуществляется преподавателем в форме лекции, затем аспиранты представляют доклад и проводится дискуссия по проблеме.

В курсе излагаются фундаментальные положения теоретической органической химии, включая современные представления о строении и реакционной способности органических соединений, методологии установления механизмов органических реакций. Особое внимание уделено рассмотрению природы химической связи, связи свойств молекул с их орбитальной структурой, проблеме ароматичности, представлениям о взаимном влиянии атомов в молекулах, описанию эффектов заместителей в рамках корреляционного анализа. Рассмотрены основные принципы и концепции органической химии: принципы "активность-селективность", "наименьшего движения", "линейности свободных энергий", концепция жестких и мягких кислот и оснований и др.

Программа курса лекций

1.1 *Природа химической связи*

Волновое уравнение Шредингера. Адиабатическое приближение. Атомные орбитали. Функции плотности вероятности. Поверхности потенциальных энергий. Седловые точки и переходные состояния. Неэмпирические и полуэмпирические методы расчета. Базисные ряды атомных орбиталей. Метод DFT. Пост-Хартрифоковские методы. Метод валентных связей и качественная концепция резонанса. Канонические структуры и реальные структуры валентных изомеров. Правила построения резонансных структур.

Теория молекулярных орбиталей. Общая характеристика и классификация квантово-химических методов расчета молекул, методология их применения для решения задач органической химии. Метод деформации электронной плотности.

Теория возмущений молекулярных орбиталей (ВМО) в органической химии. Принципы метода ВМО. Альтернантные и неальтернантные системы. Одноцентровые возмущения. Внутримолекулярное и межмолекулярное связывание. Аддитивность возмущений. Теорема парности. Связывание нечетных альтернантных систем. Связывание четной и нечетной альтернантных систем.

Типы химических связей. Ковалентная связь, донорно-акцепторная и водородная связи. Теория Малликена. Динамические донорно-акцепторные комплексы. Типы водородных связей. Квантово-химическая трактовка водородной связи.

1.2. *Основные положения теории валентности*

Валентные состояния атомов. Теория гибридизации. Типы гибридных орбиталей. Связь межорбитального и валентного углов с характером орбиталей. Принцип максимального орбитального перекрывания и энергии связей. Межорбитальные и валентные углы в напряженных циклах, их связь с константами спин-спинового взаимодействия $J(^{13}\text{C}-\text{H})$. Использование констант $J(^{13}\text{C}-\text{H})$ для определения типа гибридизации атома углерода. Описание углерод-углеродных связей в циклопропане. Соединения с "инвертированной" геометрией. Возможность получения соединений с планарным четырехкоординированным атомом углерода. Зависимость параметров связи от типа гибридизации связываемых атомов. Химические связи с дефицитом электронов. Соединения с гиперкоординированным атомом углерода. Неклассические искажения кратных связей.

1.3. *Пространственное строение органических соединений*

Принцип "изоэлектронности-изоструктурности" и стереохимические особенности органических соединений, содержащих нейтральные или заряженные атомы азота, кислорода, галогенов и некоторых других элементов. Инверсия конфигурации для соединений трехвалентного атома азота и методы ее изучения. Оптическая изомерия азотсодержащих соединений. Геометрическая изомерия азотсодержащих соединений, имеющих sp^2 -гибридный атом азота. Характер связей в азокси-, нитро-, циан-, диазо-группах и др. Нитрозониевые комплексы. Кислородсодержащие соединения. Оксониевые соли. Протонирование простых эфиров, спиртов и карбонильных соединений. Галогенониевые соли. Стереохимические и динамические особенности соединений, содержащих элементы высших периодов.

Теория отталкивания электронных пар валентных орбиталей. Качественная теория молекулярных орбиталей для предсказания геометрической формы молекул. Правила смешивания орбиталей. Квантово-химическая трактовка гош-эффекта. Аномерный эффект. Расчеты конформационных энергий.

1.4. *Проблема ароматичности и свойства ароматических соединений*

Бензол и полициклические ароматические углеводороды. Развитие представлений о строении бензола. Валентные изомеры бензола и его производных. Оценка энергии делокализации в ароматических системах. Порядки и длины связей. Таутомерные формы производных полициклических ароматических углеводородов. Гетероциклические аромати-

ческие соединения. Критерии ароматичности. Правило Хюккеля. Анизотропия магнитной восприимчивости молекул и ее проявления в спектрах ЯМР. Альтернирование длин связей. Физические и химические критерии ароматичности, индексы для оценки степени ароматичности. Небензойные ароматические системы. Циклопропенильный катион и его аналоги. Дикатион циклобутадиена. Соли тропилия. Аннулены. Азулен. Дианионы пенталена и циклооктатетраена и полициклических углеводов. Циклононатетраенильный анион. Производные 15,16-дигидропирена.

Понятие ароматичности, неароматичности и антиароматичности по Дьюару и Бреслоу. Метод ВМО и ароматичность углеводов. Антиароматические системы: циклобутадиен, пентален, циклопропенильный анион, циклопентадиенильный катион, производные дикатиона бензола. Связь энергетических критериев ароматичности с критериями локализации связей. Изо- и гомодесмические реакции. Пространственная ароматичность. Гомо-, и спироароматические системы. Многообразие ароматических систем.

1.5. Представления о взаимном влиянии атомов в молекулах

Полярность ковалентных связей. Дипольные моменты связей и молекул. Шкалы электроотрицательности (Малликена, Полинга и др.). Зависимость электроотрицательности атома углерода от его валентного состояния и окружения. Поляризуемость ковалентных связей.

Индукционный механизм передачи влияния заместителей. Качественная оценка силы и направления индукционного влияния заместителей. Эффект поля, его описание по Кирквуду-Вестхаймеру. Количественная оценка индукционного влияния заместителей. Выбор индукционных констант заместителей по Тафту. Связь между строением заместителя и его индукционной константой. Уравнение Тафта. Оценка полярных эффектов по Робертсу и Мериленду. Другие шкалы индукционного влияния заместителей.

Сопряженный механизм передачи влияния заместителей. Правило винилологии и его объяснение. Качественная оценка силы и направления мезомерных эффектов $\pm M$ -заместителей. Передача электронных эффектов заместителей через бензольное кольцо. Влияние пространственных препятствий копланарности заместителя $\pm M$ -типа и ароматического кольца на эффективность электронного влияния заместителя. Количественная оценка электронного влияния заместителей по эффекту сопряжения. Уравнение Гаммета. Необходимость использования нескольких шкал констант заместителей. Проблема множественности шкал констант заместителей. Двухпараметровые корреляционные зависимости, учитывающие индуктивный и мезомерный эффекты. Принцип полилинейности. Термодинамический анализ уравнения Гаммета. Изозэнтальпийная, изозэнтропийная серии. Изокинетическое соотношение. Квантово-химическая трактовка уравнения Гаммета.

Эффекты сверхсопряжения и обратного сверхсопряжения.

Стерические эффекты. Количественный учет стерического влияния заместителей.

1.6. Кислотные и основные свойства органических соединений

Бренстедовская и льюисовская кислотность и основность органических соединений. Концепция жестких и мягких кислот и оснований. Подходы к оценке жесткости и мягкости кислот и оснований. Абсолютная жесткость и абсолютная электроотрицательность. Зарядовый и орбитальный контроль в химических реакциях.

1.7. Природа связи металл-лиганд в металлоорганических соединениях переходных элементов (МОС ПЭ)

Место химии МОС ПЭ в системе химических наук. Основные типы МОС ПЭ. Правило эффективного атомного номера. Две компоненты связи: донорно-акцепторная и дативная. Современные представления о природе связи металл-лиганд в МОС ПЭ. МОС ПЭ с двух-, трех-, четырех-, пяти-, шести-, семи- и одноэлектронными лигандами. Строение и свойства МОС ПЭ в свете представлений о природе связи металл-лиганд. Сравнение реакционной способности органических лигандов в комплексах и в виде "свободных" молекул.

Механизмы органических реакций

2.1 Общие представления о механизмах органических реакций

Классификация реакций по типам химических изменений и по характеру перестройки связей. Методология и основные методы установления механизмов реакций.

2.2. Согласованные реакции и роль орбитальной симметрии в реакциях согласованного типа

"Разрешенные" и "запрещенные" пути согласованных реакций. Реакции циклоприсоединения. Электроциклические и сигматропные процессы. Основные правила для перicyклических реакций.

2.3. Основные типы активных промежуточных частиц в ступенчатых реакциях

2.3.1. Карбанионы

Термодинамическая и кинетическая кислотность СН-кислот. Шкалы кислотности Мак-Ивена, Стрейтвизера, Мак-Ивена-Стрейтвизера-Эпаквист-Десси (МСЭД). Современные подходы к определению шкал кислотности. Сопоставление шкал кислотности СН-, NH-, OH-кислот для газовой фазы и растворов. Строение карбанионов и механизмы их стабилизации. Илиды.

2.3.2. Карбокатионы и частицы с электронодефицитными атомами азота и кислорода

Методы изучения карбокатионов. Основные типы карбокатионов (алкильные, бензильные, енильные, аренильные, ароматические, с гетероатомами у карбониевого центра, винильные и др.) и механизмы их стабилизации. Количественные характеристики относительной устойчивости карбокатионов в газовой фазе и в растворах. 1,2-Сдвиги мигрантов в карбокатионах; факторы, влияющие на активационный барьер 1,2-сдвига мигранта. Миграция заместителей к электронодефицитным атомам азота и кислорода. "Неклассические" карбокатионы: 2-норборнильный катион, бицикло[2.1.1]гексенильные катионы и др. Нитрениевые ионы: строение и реакционная способность.

2.3.3. Свободные радикалы

Основные типы углеводородных радикалов и их строение. Термодинамическая и кинетическая устойчивость радикалов. Методы изучения радикалов, использование явления ХПЯ для выявления радикальных стадий химических реакций. Роль неклассических взаимодействий в карбокатионах и радикалах.

2.3.4. Катион- и анион-радикалы

Методы их генерирования в растворах. Реакции с участием ион-радикалов. Основные методы получения информации о структуре и электронном строении ион-радикалов. Типы ион-радикалов. Строение и свойства катион- и анион-радикалов. Кислотность катион-радикалов. Динамика ион-радикалов.

2.3.5. Карбены

Способы генерирования и реакции с участием карбенов. Основные методы получения информации о структуре и электронном строении карбенов. Метилен, дигалокарбены, дифенилкарбен. Влияние заместителей на относительную устойчивость алкилкарбенов. Циклические карбены. Роль неклассических взаимодействий в карбенах. Электрофильность и нуклеофильность карбенов. Использование явления ХПЯ при изучении реакций с участием карбенов.

2.3.6. Арины и гетарины

Доказательства существования 1,2-дегидробензола в качестве промежуточного соединения. Электронное строение дегидробензолов и их относительная устойчивость. Другие арины и гетарины и способы их генерирования и свойства.

2.3.7. Комплексы

Слабые и сильные комплексы, их отличия от молекулярных и донорно-акцепторных комплексов. Основные методы получения информации о структуре и электронном строении комплексов. Строение и устойчивость комплексов.

2.4. Соотношение кинетических и термодинамических параметров химических реакций

Переходное состояние и его положение вдоль координаты реакции. Соотношение Бренстеда, принцип Белла-Эванса-Поляни-Семенова. Постулат Хэммонда. Термодинамически и кинетически контролируемые процессы. Концепция Маркуса-Мэрдока и подобные соотношения. Ограничения корреляционных соотношений, базирующихся на принципе ЛСЭ.

2.5. Реакции электрофильного замещения атома водорода в ароматических соединениях

2.5.1. Нитрование

Результаты кинетических исследований. Изучение процессов, приводящих к образованию катиона нитрония. Использование кинетического изотопного эффекта для выявления стадии, определяющей скорость реакции. Природа кинетического изотопного эффекта. Общая схема механизма реакции нитрования. Катион-радикальный механизм нитрования.

2.5.2. Сульфирование

Результаты изучения кинетики реакции при использовании различных сульфлирующих систем. Обратимость реакции сульфирования, зависимость состава продуктов реакции от условий ее проведения. Механизм реакции сульфирования. Кинетические изотопные эффекты при проведении реакции сульфирования. Особенности механизма реакции сульфирования в органических растворителях.

2.5.3. Алкилирование и ацилирование

Общая схема реакций, влияние условий реакции алкилирования на состав продуктов реакции. Результаты изучения кинетики реакций и кинетические изотопные эффекты.

2.5.4. Влияние заместителей на легкость и направление электрофильного замещения атома водорода в ароматических соединениях (в условиях кинетического контроля)

Правила ориентации. Относительные скорости замещения. Оценка реакционной способности полизамещенных бензолов на основе факторов парциальных скоростей замещения монозамещенных бензолов. Электрофильное ароматическое замещение и метод ВМО. Принцип "активность-селективность реагента". Соотношение селективностей Брауна-Стока и его связь с уравнением Гаммета.

Особенности реакций электрофильного замещения в условиях диффузионного контроля.

Роль стерических факторов при вхождении нового заместителя в *орто*-положение по отношению к имеющемуся заместителю. *ipso*-Атака электрофилом и необходимость ее учета при определении ориентационных эффектов заместителей.

Обобщенная схема катион-радикального механизма реакций электрофильного ароматического замещения.

2.6. Реакции нуклеофильного ароматического замещения

Нуклеофильное замещение атомов галоидов, нитро-группы и других групп в ароматических соединениях. Современное представление о механизмах нуклеофильного ароматического замещения. Кинетические данные. Комплексы Мензенгеймера. Количественное описание подобных реакций в рамках уравнения Гаммета. Замещение атомов галоидов, сопровождаемое перегруппировкой (реакции кинезамещения). Арины как промежуточные соединения подобных реакций. Варианты ион-радикального механизма нуклеофильного ароматического замещения.

2.7. Замещение в алифатическом ряду

Механизм нуклеофильного замещения у насыщенного атома углерода. Влияние строения реагирующих соединений и среды на механизм и скорость нуклеофильного замещения. Влияние вступающих и уходящих групп. Стереохимические аспекты механизма реакций. Каталитические и солевые эффекты. Участие соседних групп. Рассмотрение нук-

леофильного замещения с помощью метода ВМО. Нуклеофильное замещение у олефинового атома углерода.

Электрофильное замещение в алифатическом ряду. Гомолитическое замещение в алифатическом ряду.

2.8. Реакции присоединения

Электрофильное присоединение к олефиновым соединениям. Нуклеофильное присоединение к олефинам. Циклоприсоединение к олефинам. Рассмотрение реакций присоединения с позиций метода ВМО.

2.9. Реакции элиминирования

Основные механизмы элиминирования. Stereoхимические особенности E2-элиминирования и конфигурация образующихся алкенов. Конкуренция замещения и элиминирования, диаграммы О'Феррола.

2.10. Молекулярные перегруппировки

Принцип наименьших структурных изменений и молекулярные перегруппировки. Нуклеофильные перегруппировки в алифатическом ряду (пинаколиновая, ретропинаколиновая, ацилоиновая, бензильная, Демьянова, Вагнера-Мейервейна). Трансаннулярные перегруппировки. Перегруппировки Бекмана, Гофмана, Лосена, Курциуса и Шмидта, их общность и отличия. Электрофильные перегруппировки в алифатическом ряду (Стивенса, Виттига). Перегруппировки в ароматическом ряду (Кляйзена, Фриса, бензидиновая). Перегруппировки свободных радикалов.

5. Образовательные технологии

К образовательным технологиям относятся лекционно-семинарские системы обучения, подготовка презентаций в форме доклада по современным проблемам теоретической органической химии, работа с ЭВМ, проблемное изучение, индивидуальное обучение, дискуссии и самостоятельная работа.

Формы образовательных технологий. Отличительной особенностью курса является применение в нем модульно-рейтинговой системы, при реализации которой постоянно контролируется уровень знаний аспиранта. Наличие обязательных для итоговой аттестации аспиранта контрольных точек принуждает к активной работе аспиранта в течение всего семестра. Обратная связь обеспечивается тем, что лектор ведет семинарские занятия, и может оперативно скорректировать лекционный курс в зависимости от полученных на семинарском занятии знаний и при прохождении контрольных точек результатов в усвоении материала. Семинарские занятия происходят в форме дискуссии преподавателя со аспирантами, аспирантов со аспирантами (аналог «круглого стола», в котором преподавателю отводится роль ведущего), в ходе которых каждый из участников – аспиранты или преподаватель – имеет право задавать вопросы и участвовать в выработке альтернативных решений разбираемых проблем. Таким образом, на семинарских занятиях реализуется интерактивная форма обучения.

При подготовке докладов-презентаций аспирант учится использовать информационно-поисковые системы, проводить анализ научной литературы, а для решения квантово-химических задач – базовые программы по квантовой химии.

Важной формой обучения являются коллоквиумы и консультации, на которых аспирант может получить ответы на все интересующие его вопросы по предмету.

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

Виды самостоятельной работы: работа с учебно-методической литературой и поисковыми системами, проведение квантово-химических расчетов, индивидуальные задания по отдельным разделам дисциплины. Для проведения квантово-химических расчетов ис-

пользуются программы и ЭВМ лабораторий Новосибирского института органической химии.

Контроль осуществляется в виде коллоквиумов, контрольных работ. При прохождении курса «Теоретические основы органической химии» аспиранты работают по системе ИКИ (индивидуальный кумулятивный индекс). Эта система предусматривает прохождение контрольных точек (коллоквиумов, контрольных работ), набранные баллы суммируются. Аспирант может получить дополнительные баллы за проведение квантово-химических расчетов по заранее поставленным преподавателем задачам. Система составлена таким образом, что текущий контроль охватывает все разделы курса. Поэтому итоговая аттестация не предусматривает обязательного итогового диф. зачета – любую положительную итоговую оценку за семестр и за курс в целом можно получить «автоматом», набрав соответствующее количество баллов в семестре. Аспирант, не набравший достаточного количества баллов для получения «оценки-автомата» или желающий ее повысить, сдает диф. зачет, который проводится в конце семестра.

При подготовке к лекциям и семинарам аспиранты могут использовать рекомендованные преподавателем литературные источники и Интернет-ресурсы, а также любую доступную литературу.

Правила ИКИ

Все контрольные точки, кроме домашних заданий, являются **обязательными**. Их прохождение – **необходимое условие** для получения диф. зачета, экзамена оценки «автомата» и допуска к диф. зачету или экзамену.

Каждая обязательная контрольная точка проходится строго в установленный срок.

Аспирант имеет право на апелляцию по каждой контрольной работе или коллоквиуме. *По истечении срока апелляции по данной контрольной точке баллы за нее не могут быть изменены.*

Контрольные точки, не пройденные в срок по уважительной причине (при наличии подтверждающего документа), принимаются **в течение недели** после окончания действия документа без штрафа. Аспирант получает дополнительные баллы за проведение квантово-химических расчетов при решении теоретических задач, поставленных преподавателем.

Набранное количество баллов с учетом диф. зачета составляет **750**. Коллоквиум, контрольная работа оцениваются в **100** и **150** баллов соответственно. Для получения оценки без сдачи диф. зачета («автомат») на оценку отлично, хорошо и удовлетворительно аспиранту необходимо набрать до начала сессии не менее **425**, **350** или **250** баллов соответственно, а с учетом диф. зачета – **640**, **525** и **270**. Диф. зачет оценивается в **150**, **200** или **250** баллов в зависимости от оценки: «удовлетворительно», «хорошо» или «отлично» по пятибалльной шкале.

Итоговая оценка также складывается из суммы баллов. Максимальная сумма баллов составляет с учетом экзамена **1100**. Коллоквиум, контрольная работа и доклад оцениваются в **100**, **150** и **100** баллов соответственно. Для получения оценки без сдачи экзамена («автомат») на оценку отлично, хорошо и удовлетворительно аспиранту необходимо набрать до начала сессии не менее **500**, **420** или **300** баллов соответственно, а с учетом экзамена – **850**, **650** и **500**. Экзамен оценивается в **300**, **400** или **500** баллов в зависимости от оценки: «удовлетворительно», «хорошо» или «отлично» по пятибалльной шкале.

Темы докладов:

1. Современные представления о механизме реакций алкилирования, нитрования, галогенирования и сульфирования аренов.
2. Катион-радикальный механизм реакций электрофильного ароматического замещения. Соотношение селективностей Стока-Брауна.

3. Современные представления о механизме реакций нуклеофильного ароматического замещения.
4. Современные представления о механизме реакций нуклеофильного замещения у насыщенного атома углерода. Ионные пары в реакциях нуклеофильного замещения в алифатическом ряду. Каталитические и солевые эффекты. Анхимерное содействие.
5. Электрофильное присоединение к алкенам и метод молекулярных орбиталей.
6. Современные представления о механизме реакций отщепления. Спектр механизмов E1-E2-E1cB. Диаграммы Дженкса-О'Феррола.
7. Молекулярные перегруппировки в свете общих принципов органической химии.
8. Квантово-химическое описание радикальных перегруппировок.
9. Нуклеофильные перегруппировки в алифатическом ряду (пинаколиновая, ретропинаколиновая, ацилоиновая, бензильная, Демьянова, Вагнера-Мейервейна).
10. Перегруппировки Бекмана, Гофмана, Лосена, Курциуса и Шмидта, их общность и отличия. Электрофильные перегруппировки в алифатическом ряду (Стивенса, Виттига). Перегруппировки в ароматическом ряду (Кляйзена, Фриса, бензидиновая).
11. Количественное описание эффектов растворителя на химические реакции.
12. Проблема неклассических карбокатионов.

Доклады готовятся в виде презентации на основе поиска литературы по поисковым системам, имеющимся в Новосибирском институте органической химии (Sci-finder, Chem. Abstract и др.). Для выявления современных тенденций проводится анализ литературы за последние 10 лет. В презентации даются ссылки на используемую литературу.

Примеры заданий на применение методов квантовой-химии:

1. Используя методы DFT, оцените относительную устойчивость орто-, мета-, парадегидробензолов.
2. Используя метод PM3 и изодесмический подход, оцените влияние заместителей на относительную устойчивость открытых и мостиковых катионов $\text{XCH}_2\text{CH}_2^+$ ($\text{X} = \text{H}, \text{F}, \text{Cl}$).
3. Методами DFT определите относительную устойчивость изомерных ортодегидрофенантронов (орто-дегидронафталинов, орто-дегидропиренов и т. д.).
4. Используя метод PM3, оцените относительную устойчивость σ - и π -комплексов бензола с нитрозоний-катионом.
5. Используя методы DFT, найдите переходные состояния для 1,2-сдвига «экзо» и «эндо» метильной группы в 5,6,9,9,10-пентаметифенантрониевом ионе.
6. Используя метод DFT, оцените прочность водородной связи дифенилхлорметана с молекулами воды и этанола.

Перечень примерных контрольных вопросов для коллоквиума:

1. Используя уравнение типа Гамета, выведите соотношение селективностей Стока-Брауна.
2. Покажите связь межорбитального и межвалентного углов для соединений с фрагментом C-H (CH_2) с характером орбиталей.
3. На основе метода МО покажите влияние заместителей X для соединений типа CX_4 , способствующих образованию планарной конфигурации этих соединений.
4. Используя принцип «изоэлектронности-изоэлектронности», предскажите ароматический характер боразанафталина и боразafenантрена.
5. На основе теории отталкивания электронных пар предскажите конфигурацию молекул типа R_2O , R_3O^+ , R_3N .

- Покажите зависимость константы чувствительности в уравнении Гаммета от температуры.
- На основе концепции ЖМКО предскажите направление предпочтительного взаимодействия нуклеофилов (CN^- , SCN^- , RO^- и т.д.) с пиридиний-катионом.
- В чем заключается отличие термодинамической и кинетической шкал кислотности CH -кислот?
- Примените метод ХПЯ для доказательства участия метилена в синглетном или триплетном состояниях при его взаимодействии с хлороформом.
- Выведите соотношение Белла-Эванса-Поляни на основании уравнения Маркуса.

Примеры контрольных работ:

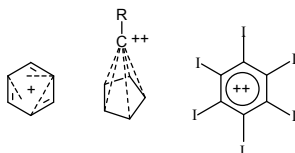
Вариант 1.

- Используя метод реконструкционного анализа МО, установите, какие из приведенных ниже структур должны быть устойчивыми:



$Y = \text{C}, \text{CH}^+, \text{SiH}^+, \text{N}^+, \text{NH}$

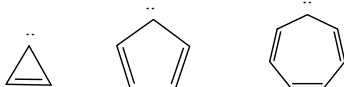
- Предскажите, как изменится величина константы чувствительности реакции в уравнении Гаммета для реакций монозамещенных бензола XPh с реагентами Cl_2 , ClOH , $\text{NO}_2^+\text{BF}_4^-$
- Укажите характер ароматичности катионов:



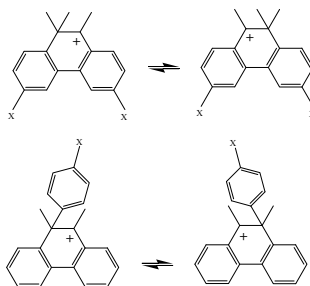
- Используя метод ВМО сопоставьте относительные скорости мононитрования для различных положений фенантрена.
- Используя метод ВМО оцените относительную устойчивость фенантрена и антрацена.

Вариант 2.

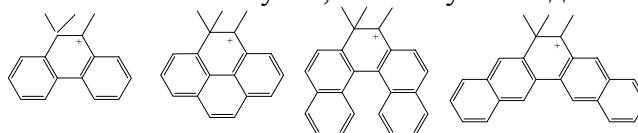
- Определите мультиплетность основного состояния следующих карбенов:



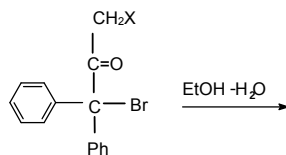
- Какой тип констант заместителей необходимо использовать для количественного описания скоростей следующих реакций. Предскажите знак константы чувствительности реакции.



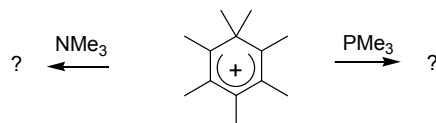
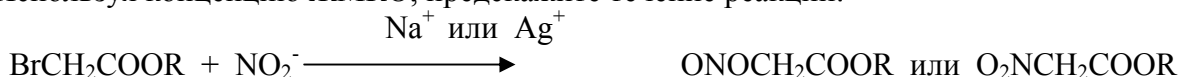
- Расположите ряд ионов в порядке убывания скорости 1,2-сдвига метильной группы к положению, отмеченному знаком +. Ответ обоснуйте, используя метод ВМО.



4. Сольволиз бромида в водно-этанольных смесях описывается уравнением Грюнвальда-Уинштейна ($\lg k/k_0 = mY$, где Y – ионизирующая сила растворителя). Как должна измениться константа чувствительности m при повышении донорного характера заместителя X ? Ответ обоснуйте.



5. Используя концепцию ЖМКО, предскажите течение реакции:



Перечень теоретических вопросов к экзамену и диф. зачету с примерами задач

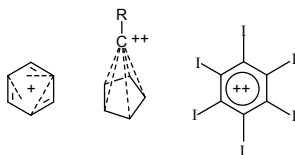
Билет №1

1. Выведите формулу для межмолекулярного связывания двух π -электронных систем.
2. Уравнение Тафта. Почему при определении σ^* -констант заместителей использованы 2 реакционные серии: кислотный и щелочной гидролиз сложных эфиров?
3. Используя метод реконструкционного анализа МО, установите, какие из приведенных структур должны быть устойчивыми:



$Y = \text{C}, \text{CH}^+, \text{SiH}^+, \text{N}^+, \text{NH}$

4. Предскажите, как изменится величина константы чувствительности реакции в уравнении Гаммета для реакций замещенных бензола $X\text{Ph}$ с реагентами Cl_2 , ClO , $\text{NO}_2^+\text{BF}_4^-$
5. Укажите характер ароматичности катионов:



Билет № 2

1. Теория гибридизации. Типы гибридных орбиталей. Связь межорбитального и валентного углов с характером орбиталей.
2. Термодинамическая и кинетическая кислотность CH -кислот.
3. Использование явления ХПЯ при изучении реакций с участием карбенов.
4. Используя диаграмму Уолша, предскажите геометрию молекул BeR_2 , Me_2O , $:\text{CH}_2$.
5. Для какого типа заместителей X различие в энергии плоской и не плоской структур 1,1-ди- X -циклопропана минимально?

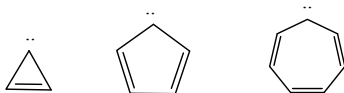
Билет №3

1. Соединения с "инвертированной" геометрией. Возможность получения соединений с планарным четырех-координированным атомом углерода.
2. Шкалы электроотрицательности (Малликена, Полинга и др.).
3. Правило эффективного атомного номера.
4. Определите мультиплетность основного состояния следующих карбенов: CH_2 , CF_2 , CPh_2

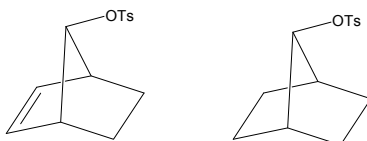
5. Для какого типа заместителей X различие в энергии плоской и не плоской структур 1,1-ди-X-циклопропана минимально?

Билет №4

1. Концепция жестких и мягких кислот и оснований. Подходы к оценке жесткости и мягкости кислот и оснований.
2. Правило эффективного атомного номера.
3. Термодинамическая и кинетическая устойчивость радикалов.
4. Определите мультиплетность основного состояния следующих карбенов:

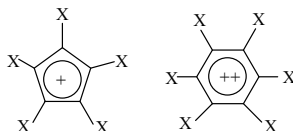


5. Для какого из приведенных ниже соединений будет легче осуществляться сольволиз в CF_3COOH :



Билет №5

1. Неклассические карбокатионы.
2. Термодинамическая и кинетическая кислотность СН-кислот.
3. Использование явления ХПЯ при изучении реакций с участием карбенов.
4. Определите мультиплетность основного состояния следующих карбокатионов:

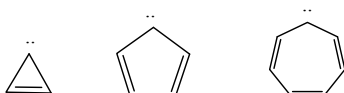


X = Cl, Ph

5. Для какого типа заместителей X различие в энергии плоской и не плоской структур 1,1-ди-X-циклопропана минимально?

Билет №6

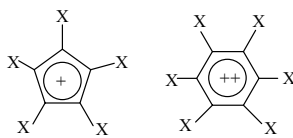
1. Механизмы нуклеофильного замещения у насыщенного атома углерода.
2. Принцип "активность-селективность реагента". Соотношение селективностей Брауна-Стока и его связь с уравнением Гаммета.
3. Термодинамическая и кинетическая кислотность СН-кислот. Шкалы кислотности Мак-Ивена, Стрейтвизера, Мак-Ивена-Стрейтвизера-Эпаквист-Десси (МСЭД).
4. Определите мультиплетность основного состояния следующих карбенов:



5. Для какого из приведенных ниже соединений будет легче осуществляться сольволиз в CF_3COOH : $\text{Me}_2\text{C}(\text{p-MeOC}_6\text{H}_4)\text{-CHOTs}$, $\text{Me}_2\text{C}(\text{C}_6\text{H}_5)\text{-CHOTs}$.

Билет №7

1. Механизм реакции сульфирования в органических растворителях и конц. H_2SO_4 .
2. Термодинамическая и кинетическая кислотность СН-кислот.
3. 1,2-Сдвиги мигрантов в карбокатионах; факторы, влияющие на активационный барьер 1,2-сдвига мигранта.
4. Определите мультиплетность основного состояния следующих карбокатионов:

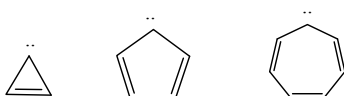


X = Cl, Ph

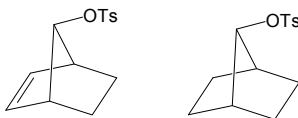
5. Для какого типа заместителей X различие в энергии плоской и не плоской структур 1,1-ди-X-циклопропана минимально?

Билет №8

1. Механизм реакции электрофильного нитрования аренов.
2. Принцип "активность-селективность реагента". Соотношение селективностей Брауна-Стокера и его связь с уравнением Гаммета.
3. Каталитические и солевые эффекты реакций нуклеофильного замещения у насыщенного атома углерода.
4. Определите мультиплетность основного состояния следующих карбенов:

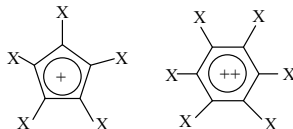


5. Для какого из приведенных ниже соединений будет легче осуществляться сольволиз в CF_3COOH :



Билет №9

1. Карбокатионы. Строение и свойства.
2. Термодинамическая и кинетическая кислотность СН-кислот.
3. Использование явления ХПЯ при изучении реакций с участием карбенов.
4. Определите мультиплетность основного состояния следующих карбокатионов:

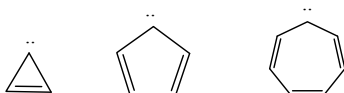


X = Cl, Ph

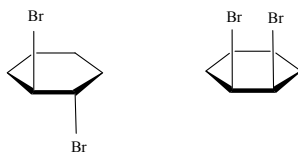
5. Для какого типа заместителей X различие в энергии плоской и не плоской структур 1,1-ди-X-циклопропана минимально?

Билет №10

1. Механизм реакции алкилирования и ацилирования.
2. Арины и гетарины.
3. Концепция Маркуса-Мэрдока.
4. Определите мультиплетность основного состояния следующих карбенов:



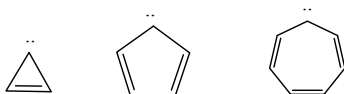
5. Для какого из приведенных ниже соединений будет легче осуществляться сольволиз в CF_3COOH :



Билет №11

1. Механизм реакции электрофильного нитрования аренов.

2. Принцип "активность-селективность реагента". Соотношение селективностей Брауна-Стокера и его связь с уравнением Гаммета.
3. Каталитические и солевые эффекты реакций нуклеофильного замещения у насыщенного атома углерода.
4. Определите мультиплетность основного состояния следующих карбенов:

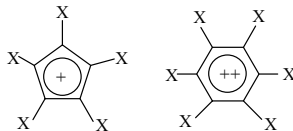


5. Для какого из приведенных ниже соединений будет легче осуществляться сольволиз в CF_3COOH :



Билет №12

1. Принцип сохранения орбитальной симметрии и сигматропные перегруппировки.
2. Факторы, определяющие стабильность карбанионов.
3. 1,2-Сдвиги мигрантов в карбокатионах; факторы, влияющие на активационный барьер 1,2-сдвига мигранта.
4. Определите мультиплетность основного состояния следующих карбокатионов:

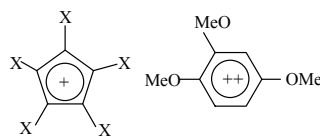


$\text{X} = \text{Cl}, \text{Ph}$

5. Для какого типа заместителей X различие в энергии плоской и не плоской структур 1,1-ди- X -циклопропана минимально?

Билет №13

1. Принцип сохранения орбитальной симметрии и реакции циклоприсоединения.
2. Факторы, определяющие стабильность анион-радикалов.
3. 1,2-Сдвиги мигрантов в карбокатионах; факторы, влияющие на активационный барьер 1,2-сдвига мигранта.
4. Определите мультиплетность основного состояния следующих карбокатионов:

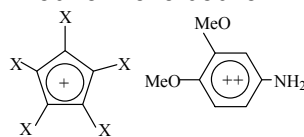


$\text{X} = \text{Cl}, \text{Ph}$

5. Для какого типа заместителей X различие в энергии плоской и не плоской структур 1,1-ди- X -циклопропана минимально?

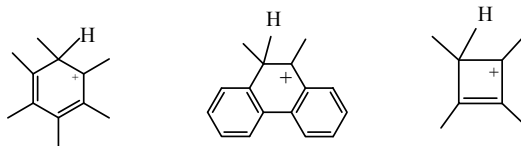
Билет №14

1. Принцип сохранения орбитальной симметрии и электроциклические реакции.
2. Факторы, определяющие стабильность катион-радикалов.
3. Термодинамическая и кинетическая устойчивость радикалов.
4. Определите мультиплетность основного состояния карбокатионов:



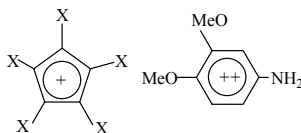
$\text{X} = \text{Cl}, \text{Ph}$

5. Расположите в порядке убывания скорости 1,2-сдвига атома водорода в следующих катионах:



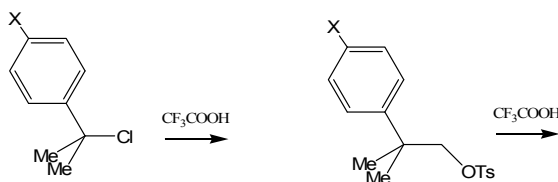
Билет №15

1. Основные механизмы реакций элиминирования, диаграмма О'феррола.
2. Факторы, определяющие стабильность и строение карбенов.
3. Постулат Хэммонда.
4. Определите мультиплетность основного состояния карбокатионов:



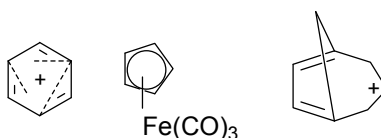
X = Cl, Ph

5. Какой тип констант заместителей необходимо использовать для количественного описания скоростей следующих реакций. Предскажите знак константы чувствительности реакции.

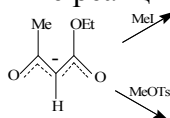


Билет №16

1. Катион-радикальный механизм реакций электрофильного ароматического замещения.
2. Строение и относительная устойчивость дегидробензолов.
3. Укажите характер ароматичности следующих структур:



4. Соотношение селективностей Брауна-Стока и его связь с уравнением Гаммета.
5. Используя концепцию ЖМКО, предскажите, какие продукты преимущественно образуются в приведенных ниже реакциях:



7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины.

Рекомендованная литература:

1. Бородин Г.И. Электронный курс «Теоретические основы органической химии», 2012 г. (<http://fen.nsu.ru/posob/organic>).
2. А.С. Днепровский, Т.И. Темникова. Теоретические основы органической химии. Л: Химия, 1991.
3. К. Ингольд. Теоретические основы органической химии. М.: Мир. 1977.
4. Г.И. Бородин. Уравнение Гаммета и его модификации. Новосибирск: НГУ, 1993.
5. Г.И. Бородин. Активные промежуточные частицы химических реакций. Новосибирск: НГУ, 1994.
6. О.А. Реутов, А.Л. Курц, К.П. Бутин. Органическая химия. М.: Изд. Бином, 2012, т. 1-4.
7. В.И. Минкин, Б.Я. Симкин, Р.М. Миняев. Квантовая химия органических соединений. Механизмы реакций. М.: Химия, 1986.
8. М. Дьюар. Теория молекулярных орбиталей в органической химии. М.: Мир, 1972.
9. Э. Илиел, С. Вайлен, М. Дойл Основы органической стереохимии. Изд.: Бином. 2007.
10. Реакционная способность и пути реакций. Под ред. Г. Клопмана. М.: Мир, 1977.
11. Advanced Organic Chemistry. FIFTH EDITION. Part A: Structure and Mechanisms. Part B: Reactions and Synthesis. 2007. Springer Science+Business Media, LLC.

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Ноутбук, медиа-проектор, экран. Программное обеспечение для демонстрации слайд-презентаций. Программы для проведения квантово-химических расчетов на ЭВМ в лабораториях НИОХ.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО, принятым в ФГБУН Новосибирском институте органической химии им. Н.Н. Ворожцова Сибирского отделения Российской академии наук (НИОХ СО РАН), с учётом рекомендаций ОПОП ВО по направлению подготовки 04.06.01 «Химические науки» (Исследователь. Преподаватель-исследователь).

Автор:

профессор, д.х.н. Бородин Геннадий Иванович

Программа одобрена на заседании Ученого совета "19" сентября 2014 г.