

RTU studiju kurss "Elektronu nobīdes un saišu reorganizācijas mehānismi organiskos savienojumos"

32000 Dabaszinātņu un tehnoloģiju fakultāte

Vispārējā informācija

Kods	DA3129
Nosaukums	Elektronu nobīdes un saišu reorganizācijas mehānismi organiskos savienojumos
Studiju kursa statuss programmā	Obligātais/Ierobežotās izvēles
Atbildīgais mācītbspēks	Māra Jure - Doktors, Profesors
Mācītbspēks	Inese Mierīņa - Doktors, Vadošais pētnieks
Apjoms daļās un kredītpunktos	1 daļa, 5.0 kredītpunkti
Studiju kursa īstenošanas valodas	LV, EN
Anotācija	Studiju kurss rada padziļinātu izpratni par elektronu blīvuma pārdalījumu organiskajos savienojumos, to reaģētspēju, reakciju norises cēloņiem un mehānismiem, mehānismu attēlošanu. Studējošais iegūst zināšanas par klasisko elektronu teoriju, kvantu organiskās ķīmijas pamatpriekšstatiem konjugēto sistēmu raksturošanā, reaģētspējas termodynamiskajiem un kinētiskajiem faktoriem, aciditāti un bāziskumu, cieto un mīksto skābju un bāzu principiem, nukleofīliem un elektrofilēm, bāziskuma un nukleofilītātes sakarībām, apgūst jonu un radikāļu reakciju pamatmehānismus: nukleofīlo un elektrofilo aizvietošanos, eliminēšanos un pievienošanos.
Mērķis un uzdevumi, izteikti kompetencēs un prasmēs	Studiju kursa mērķis ir izveidot izpratni par organisko savienojumu saišu reaģētspēju, par reakciju mehānismiem, sniegt kompetenci reaģētspējas prognozēšanā un izkopt mehānismu rakstības prasmi, sagatavot studentu organiskās sintēzes metožu apguvei. Studiju kursa uzdevumi ir sniegt pamatzināšanas par elektronu efektiem organisko savienojumu saitēs un savienojumu reaģētspēju, attīstīt prasmi lietot lieltās bultiņas elektronu plūsmas parādīšanai, sniegt zināšanas par molekulāro orbitāļu izvietojumu pamata ķīmiskajās reakcijās, izkopt prasmi atpazīt un pielietot reakciju pamatmehānismus organiskajā ķīmijā.
Patstāvīgais darbs, tā organizācija un uzdevumi	Patstāvīgas mācību literatūras un ORTUSā ievietoto materiālu studijas, videolekciju noklausīšanās, praktisku uzdevumu risināšana, mājas darbu izpilde, gatavošanās kontroldarbiem un diskusijām praktiskajās nodarbībās.
Literatūra	Obligātā/Obligatory: 1) Scudder, P.H. Electron Flow in Organic Chemistry: A Decision-Based Guide to Organic Mechanisms, 2nd Edition, 2013. 2) Weeks, D.P. Pushing Electrons, 2013. 3) Daniel E. Levy. Arrow-Pushing in Organic Chemistry. An Easy Approach to Understanding Reaction Mechanisms. Wiley; 2nd edition, 2017. ISBN-10: 111899132X. 4) Savin, Kenneth A. Writing Reaction Mechanisms in Organic Chemistry, 3rd ed. Academic Press, 2014. 5) David R. Klein. Organic Chemistry as a Second Language. Wiley; 5th edition (August 6, 2019), 400 p. Papildu/Additional: 1) Ace Organic Chemistry Mechanisms with E.A.S.E.: A step-wise method for solving organic chemistry mechanism and synthesis problems. CreateSpace Independent Publishing Platform. 2013. ISBN-10:1484909658. 2) Rhett C. Smith. Organic Chemistry 1. Reactions and Practice Problems. Proton Guru, 2019. ISBN-10: 1733232583. https://www.proton.guru/part-i-lessons . 3) Roman Valiulin. Organic Chemistry: 100 Must-Know Mechanisms: in Organic Chemistry. De Gruyter, 2020.
Nepieciešamās priekšzināšanas	Organiskās ķīmijas pamatzināšanas bakalaura līmenī.

Studiju kursa saturs

Saturs	Pilna un nepilna laika klātienēs studijas		Nepilna laika neklātienēs studijas	
	Kontakt stundas	Patstāv. darbs	Kontakt stundas	Patstāv. darbs
Lūisa struktūras. Elektronegativitāte. Elektrostatiskā potenciāla kartes. Saišu veidi. Dipoli. Dipola moments. Daļlādiņi. Formālie lādiņi. Saišu disociācijas enerģija.	2	2	0	0
Indukcijas un mezomērais (rezonanses) efekti.	2	2	0	0
Atomu uzbūve. Atomu rādiusi. Elektronu konfigurācija. Atomārās orbitāles, to hibridizācija. Valences saišu teorija. Sigma un pi saišu veidošanās. Kvantu skaitļi. Jonizācijas enerģija.	2	2	0	0
VSEPR teorija. Molekulu ģeometrija. Stereoizomēri.	3	3	0	0
Konjugācija. Mezomērās formas un rezonanses hibrīdi. Delokalizācijas enerģija. Hiperkonjugācija. Tautomērija.	3	3	0	0
Molekulāro orbitāļu teorija. Lineāru un ciklisku poliēnu MO.	3	3	0	0
Aromātiskums. Hikeļa likums. Benzols un citi anulēni, heterocikli.	3	3	0	0
Aciditāte un rezonanse. Bāziskums. Aizejošās grupas. Bāziskums un nukleofilītāte. HSAB.	2	2	0	0
Elektronu avoti un uztvērēji - nukleofīli un elektrofilī. Reakciju mehānismi un to rakstība. Bultiņas.	3	3	0	0

Nukleofilās aizvietošanās mehānismi. Šķīdinātāju izvēle.	3	3	0	0
Eliminēšanās un pievienošanās reakcijas.	2	2	0	0
I un II veida orientanti. SE2 reakcija.	2	2	0	0
Radikāļu reakcijas.	2	2	0	0
Praktiskie darbi, t.sk. mājas darbu analīze un kontroldarbi.	16	16	0	0
Konsultācijas.	8	8	0	0
Eksāmens.	4	4	0	0
Kopā:	60	60	0	0

Sasniedzamie studiju rezultāti un to vērtēšana

Sasniedzamie studiju rezultāti	Rezultātu vērtēšanas metodes
Izprot atomu, jonu un organisko savienojumu molekulu uzbūvi, pārzin VSEPR teoriju, orientējas AXE apzīmējumos	Pārbaudes veidi: mājasdarbi, kontroldarbi, eksāmens. Kritēriji: students spēj salīdzināt atomu un jonu izmērus vadoties pēc to elektronu konfigurācijas, spēj uzzīmēt savienojumu Lūisa formulas, aprēķināt formālos lādiņus, spēj noteikt atomu hibridizāciju un prognozēt saišu leņķus molekulā.
Izprot saišu veidošanās pamatprincipus un molekulāro orbitāļu teorijas pamatus	Pārbaudes veidi: mājasdarbi, kontroldarbi, eksāmens. Kritēriji: students spēj identificēt elektronu avotus un uztvērējus, nukleofilus un elektrofilus, spēj uzzīmēt alkēnu pī-MO un ciklisko savienojumu pī-MOED, parādot elektronu izkārtojumu orbitālēs.
Pārzina elektronu efektus saitēs, izprot elektronu delokalizāciju un tās iespaidu uz savienojumu stabilitāti un reaģētspēju	Pārbaudes veidi: mājasdarbi, kontroldarbi, eksāmens. Kritēriji: students spēj noteikt elektronu efektus saitēs un elektronu blīvuma pārdalījumu molekulā, atrast elektrofilos un nukleofilos centrus, uzzīmēt savienojumu mezomērās formas un rezonanses hibrīdu.
Pārzina galvenās skābju/bāzu un elektrofilu/nukleofilu reakcijas organiskajā ķīmijā.	Pārbaudes veidi: mājasdarbi, kontroldarbi, eksāmens. Kritēriji: students spēj pielietot substrātu un reaģentu pKa vērtības, lai panāktu vēlamā produkta veidošanos reakcijā, izprot katalizatora lomu reakcijas norisē un spēj to parādīt rakstot mehānismu.
Orientējas stereoķīmijas pamatjautājumos, izprot organisko savienojumu molekulu formu un tās ietekmi uz reakciju mehānismu un produktu, spēj prognozēt reakciju regioselektivitāti un stereoselektivitāti.	Pārbaudes veidi: mājasdarbi, kontroldarbi, eksāmens. Kritēriji: students spēj uzzīmēt nelielu molekulu 3 D attēlus izmantojot dažādus projekciju veidus, spēj uzrakstīt sterooselektīvu vai stereospecifisku reakciju produktu struktūru, atrisina uzdevumus, kas saistīti ar reakciju regioselektivitāti.
Pārzina reakciju pamatmehānismus, spēj tos izprast un attēlot, izprot starpproduktu un produktu relatīvo stabilitāti, pārzina kinētiskās un termodinamiskās kontroles apstākļus, reakciju statiskos un dinamiskos faktoros, spēj prognozēt doto reakciju produktus.	Pārbaudes veidi: mājasdarbi, kontroldarbi, eksāmens. Kritēriji: students spēj noteikt un parādīt elektronu plūsmu reakcijās, spēj identificēt biežāk sastopamos reakciju mehānismus, spēj prognozēt apstākļu ietekmi uz reakcijas gala produktu.

Studiju rezultātu vērtēšanas kritēriji

Kritērijs	% no kopējā vērtējuma
Mājasdarbi un kontroldarbi	50
Eksāmens	50
Kopā:	100

Studiju kursa plānojums

Daļa	KP	Stundas			Pārbaudījumi		
		Lekcijas	Prakt d.	Laborat	Ieskaite	Eksām.	Darbs
1.	5.0	40.0	20.0	0.0		*	