

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
ФГБОУ ВО «БАШКИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

Утверждено:
на заседании кафедры
протокол от № 15 «19» 06. 2019г.
Зав. кафедрой Галипов Р.Ф.

Согласовано:
Председатель УМК химического факультета
Гарифуллина Г.Г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

ДИСЦИПЛИНА Квантово-химическое изучение механизмов химических реакций

Дисциплины по выбору Б1.В.ДВ.05.01

программа бакалавриата

Направление подготовки (специальность)
04.03.01 «Химия»

Направленность (профиль) подготовки
Органическая и биоорганическая химия


Квалификация
Бакалавр

Разработчик (составитель) Профессор, д.х.н. (должность, ученая степень, ученое звание)	<u>Вакулин И.В.</u> / Вакулин И.В. (подпись, Фамилия И.О.)
--	--

Для приема 2019года


Уфа 2019

Составитель: Вакулин И.В.

Рабочая программа дисциплины утверждена на заседании кафедры протокол от № 6 «09» 06. 2018г.
Заведующий кафедрой  / Талипов Р.Ф.

Дополнения и изменения, внесенные в рабочую программу дисциплины (обновлены перечень основной и дополнительной литературы и лицензионное программное обеспечение, необходимое для освоения дисциплины), приняты на заседании кафедры органической и биоорганической химии, протокол № 8 от 01.04.2019 г.

Заведующий кафедрой

 / Талипов Р.Ф.

Список документов и материалов

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы	
2. Место дисциплины в структуре образовательной программы	
3. Содержание рабочей программы (объем дисциплины, типы и виды учебных занятий, учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся)	
4. Фонд оценочных средств по дисциплине	
4.1. Перечень компетенций с указанием этапов их формирования в процессе освоения образовательной программы. Описание показателей и критериев оценивания компетенций на различных этапах их формирования, описание шкал оценивания	
4.2. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций	
4.3. Рейтинг-план дисциплины	
5. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины	
5.1. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины	
5.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» и программного обеспечения, необходимых для освоения дисциплины	
6. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине	

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы

В результате освоения образовательной программы обучающийся должен овладеть следующими результатами обучения по дисциплине:

Категория (группа) компетенций (при наличии ОПК)	Формируемая компетенция (с указанием кода)	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Результаты обучения по дисциплине
	ПК-1. Способностью выполнять стандартные операции по предлагаемым методикам	ПК-1.1. Знать основные методы синтеза и анализа химических веществ, принципа работы стандартных лабораторных приборов	Знать: основные методы синтеза и анализа химических веществ, принципа работы стандартных лабораторных приборов
		ПК-1.2. Уметь выполнять основные операции выполняемые при синтезе и анализе химических соединений	Уметь: выполнять основные операции выполняемые при синтезе и анализе химических соединений
		ПК-1.3. Владеть навыками выполнения стандартных операций по предлагаемым методикам	Владеть: навыками выполнения стандартных операций по предлагаемым методикам
	ПК-2. Владением базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований	ПК-2.1. Знать стандартные методы применения современной аппаратуры при проведении научных исследований, идентификации и исследования свойств веществ и материалов, правила обработки и оформления результатов работы, нормы ТБ	Знать: стандартные методы применения современной аппаратуры при проведении научных исследований, идентификации и исследования свойств веществ и материалов, правила обработки и оформления результатов работы, нормы ТБ
		ПК-2.2. Уметь проводить химические эксперименты с использованием современной аппаратуры	Уметь: проводить химические эксперименты с использованием современной аппаратуры
		ПК-2.3. Владеть базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований	Владеть: базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина «Квантово-химическое изучение механизмов химических реакций» относится к вариативной части.

Дисциплина изучается на 4 курсе в 7,8 семестрах.

Целями освоения дисциплины (модуля)

Квантово-химическое изучение механизмов химических реакций являются, в соответствии с общими целями ООП ВПО, познание студентами физических и теоретических основ спектральных методов (ИК-,

КР- УФ- ЯМР-и масс–спектроскопий) и использование этих методов для установления строения и структуры полученных биоорганических соединений, изучения кинетики и механизма реакций, а также познание современных методов расчета теоретических спектров с использованием современных технологий и сравнение их с полученными спектрами.

При освоении данной дисциплины требуются самые высокие знания, умения и готовности, приобретённые в результате освоения всех предшествующих дисциплин, особенно таких, как органическая химия, стереохимия, физическая химия, математика, информатика, физика, общая химия, неорганическая химия, аналитическая химия, философия, иностранный язык, русский язык и культура речи.

3. Содержание рабочей программы (объем дисциплины, типы и виды учебных занятий, учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся)

Содержание рабочей программы представлено в Приложении № 1.

4. Фонд оценочных средств по дисциплине

4.1. Перечень компетенций с указанием этапов их формирования в процессе освоения образовательной программы. Описание показателей и критериев оценивания компетенций на различных этапах их формирования, описание шкал оценивания

Код и формулировка компетенции **ПК-1** Способностью выполнять стандартные операции по предлагаемым методикам

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Результаты обучения по дисциплине	Критерии оценивания результатов обучения	
		Не зачтено	Зачтено
ПК-1.1. Знать основные методы синтеза и анализа химических веществ, принципа работы стандартных лабораторных приборов	Знать: основные методы синтеза и анализа химических веществ, принципа работы стандартных лабораторных приборов	Фрагментарные представления о методах работы в лаборатории	Сформированные систематические знания о методах синтеза и анализа химических веществ, принципа работы стандартных лабораторных приборов
ПК-1.2. Уметь выполнять основные операции, выполняемые при синтезе и анализе химических соединений	Уметь: выполнять основные операции, выполняемые при синтезе и анализе химических соединений	Фрагментарное умение выполнять стандартные операции по предлагаемым методикам	Успешное и систематическое умение выполнять стандартные лабораторные операции
ПК-1.3. Владеть навыками выполнения стандартных операций по предлагаемым методикам	Владеть: навыками выполнения стандартных операций по предлагаемым методикам	Фрагментарное владение навыками работы на стандартном оборудовании	Успешное и систематическое владение навыками выполнения стандартных операций по предлагаемым методикам

Код и формулировка компетенции **ПК-2.** Владением базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Результаты обучения по дисциплине	Критерии оценивания результатов обучения	
		Не зачтено	Зачтено
ПК-2.1. Знать стандартные методы применения современной	Знать: стандартные методы применения современной	Затрудняется в выборе метода применения современной аппаратуры при проведении научных исследований, идентификации и	Знает стандартные методы применения современной аппаратуры при проведении научных исследований, идентификации и исследования

аппаратуры при проведении научных исследований, идентификации и исследования свойств веществ и материалов, правила обработки и оформления результатов работы, нормы ТБ	аппаратуры при проведении научных исследований, идентификации и исследования свойств веществ и материалов, правила обработки и оформления результатов работы, нормы ТБ	исследования свойств указанного вещества, не знает требований к оформлению результатов эксперимента и норм ТБ, но допускает ошибки	свойств различных групп веществ и материалов; правила техники безопасности при работе с ними, основные требования к оформлению результатов эксперимента
ПК-2.2. Уметь проводить химические эксперименты с использованием современной аппаратуры	Уметь: проводить химические эксперименты с использованием современной аппаратуры	Умеет проводить некоторые химические эксперименты с использованием современной аппаратуры, но допускает ошибки	Умеет выполнять демонстративные опыты по химии с использованием современной аппаратуры; проводить комплексный анализ и исследование свойств полученных веществ и материалов. Умеет оформлять результаты эксперимента в соответствии с заявленными требованиями
ПК-2.3. Владеть базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований	Владеть: базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований	Владеет некоторыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований, но допускает ошибки	Владеет базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований, идентификации и изучения свойств веществ и материалов, правильного протоколирования опытов

Код и формулировка компетенции **ПК-1** Способностью выполнять стандартные операции по предлагаемым методикам

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Результаты обучения по дисциплине	Критерии оценивания результатов обучения			
		2 («Неудовлетворительно»)	3 («Удовлетворительно»)	4 («Хорошо»)	5 («Отлично»)

И					
ПК-1.1. Знать основные методы синтеза и анализа химических веществ, принципа работы стандартных лабораторных приборов	Знать: основные методы синтеза и анализа химических веществ, принципа работы стандартных лабораторных приборов	Фрагментарные представления о методах работы в лаборатории	Неполные представления о основных приемах и методах работы в лаборатории	Сформированные, но содержащие отдельные пробелы представления о методах синтеза и анализа химических веществ, принципа работы стандартных лабораторных приборов	Сформированные систематические знания о методах синтеза и анализа химических веществ, принципа работы стандартных лабораторных приборов
ПК-1.2. Уметь выполнять основные операции, выполняемые при синтезе и анализе химических соединений	Уметь: выполнять основные операции, выполняемые при синтезе и анализе химических соединений	Фрагментарное умение выполнять стандартные операции по предлагаемым методикам	В целом успешное, но не систематическое умение выполнять стандартные операции по предлагаемым методикам	В целом успешное умение выполнять стандартные операции по предлагаемым методикам, но отдельные операции вызывают затруднения	Успешное и систематическое умение выполнять стандартные лабораторные операции
ПК-1.3. Владеет	Владеть: навыкам	Фрагментарное владение	Владение навыками	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы владение	Успешное и

ь навыка ми выпол нения станда ртных операц ий по предла гаемы м методи кам	и выполне ния стандарт ных операц ий по предлага емым методик ам	навыками работы на стандартном оборудовании	работы на стандартн ом оборудова нии	навыками выполнения стандартных операций по предлагаемым методикам	системат ическое владение навыкам и выполне ния стандарт ных операц ий по предлага емым методик ам
--	--	--	--	--	--

Код и формулировка компетенции **ПК-2.** Владением базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Результаты обучения по дисциплине	Критерии оценивания результатов обучения		
		2 («Неудовлетворительно»)	3 («Удовлетворительно»)	4 («Хорошо»)
ПК-2.1. Знать стандартные методы применения современной аппаратуры при проведении научных исследований, идентификации и исследования свойств веществ и материалов, правила обработки и оформления результатов работы, нормы ТБ	Знать: стандартные методы применения современной аппаратуры при проведении научных исследований, идентификации и исследования свойств веществ и материалов, правила обработки и оформления результатов работы, нормы ТБ	Затрудняется в выборе метода применения современной аппаратуры при проведении научных исследований, идентификации и исследования свойств указанного вещества, не знает требований к оформлению результатов эксперимента и норм ТБ, но допускает ошибки	Имеет общее представление о методах применения современной аппаратуры при изучении свойств отдельных классов веществ, правилах безопасного обращения с ними и способах представления результатов эксперимента	Знает стандартные методы применения современной аппаратуры при проведении научных исследований, исследования свойств различных групп веществ и материалов; правила ТБ при работе с ними; основные требования к оформлению результатов эксперимента, допускает отдельные неточности
ПК-2.2. Уметь	Уметь:	Умеет проводить	Умеет проводить	Умеет провод

проводить химические эксперименты с использованием современной аппаратуры	проводить химические эксперименты с использованием современной аппаратуры	некоторые химические эксперименты с использованием современной аппаратуры, но допускает ошибки	химические эксперименты с использованием современной аппаратуры, но допускает отдельные ошибки	химические эксперименты с использованием современной аппаратуры; осуществляет идентификацию, исследование свойств полученных веществ и материалов. Умеет оформлять результаты эксперимента небольшим количеством замечаний
ПК-2.3. Владеть базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований	Владеть: базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований	Владеет некоторыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований, но допускает ошибки	Владеет базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований	Владеет базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований, идентификации, изучения свойств отдельных классов веществ (материалов), правильного протоколирования опытов

Критериями оценивания являются баллы, которые выставляются преподавателем за виды деятельности (оценочные средства) по итогам изучения модулей (разделов дисциплины), перечисленных в рейтинг-плане дисциплины (текущий контроль – максимум 40 баллов; рубежный контроль – максимум 30 баллов, поощрительные баллы – максимум 10).

Шкалы оценивания:

от 45 до 59 баллов – «удовлетворительно»;

от 60 до 79 баллов – «хорошо»;

от 80 баллов – «отлично».

4.2. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Результаты обучения по дисциплине	Оценочные средства
ПК-1.1. Знать основные методы синтеза и анализа химических веществ, принципа работы стандартных лабораторных приборов	Знать: основные методы синтеза и анализа химических веществ, принципа работы стандартных лабораторных приборов	Коллоквиум, тест
ПК-1.2. Уметь выполнять основные операции выполняемые при синтезе и анализе химических соединений	Уметь: выполнять основные операции выполняемые при синтезе и анализе химических соединений	Коллоквиум, тест
ПК-1.3. Владеть навыками выполнения стандартных операций по предлагаемым методикам	Владеть: навыками выполнения стандартных операций по предлагаемым методикам	Коллоквиум, тест
ПК-2.1. Знать стандартные методы применения современной аппаратуры при проведении научных исследований, идентификации и исследования свойств веществ и материалов, правила обработки и оформления результатов работы, нормы ТБ	Знать: стандартные методы применения современной аппаратуры при проведении научных исследований, идентификации и исследования свойств веществ и материалов, правила обработки и оформления результатов работы, нормы ТБ	Коллоквиум, тест
ПК-2.2. Уметь проводить химические эксперименты с использованием современной аппаратуры	Уметь: проводить химические эксперименты с использованием современной аппаратуры	Коллоквиум, тест
ПК-2.3. Владеть базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований	Владеть: базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований	Коллоквиум, тест
ПК-2.1. Знать стандартные методы применения современной аппаратуры при проведении научных исследований, идентификации и исследования свойств веществ и материалов, правила обработки и оформления результатов работы, нормы ТБ	Знать: стандартные методы применения современной аппаратуры при проведении научных исследований, идентификации и исследования свойств веществ и материалов, правила обработки и оформления результатов работы, нормы ТБ	Коллоквиум, тест
ПК-2.2. Уметь проводить химические эксперименты с использованием современной аппаратуры	Уметь: проводить химические эксперименты с использованием современной аппаратуры	Коллоквиум, тест
ПК-2.3. Владеть базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований	Владеть: базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований	Коллоквиум, тест

4.3. Рейтинг-план дисциплины

Рейтинг–план дисциплины представлен в приложении 2.

Перевод оценки из 100-балльной в пятибалльную производится следующим образом:

- отлично – от 80 до 110 баллов (включая 10 поощрительных баллов);
- хорошо – от 60 до 79 баллов;
- удовлетворительно – от 45 до 59 баллов;
- неудовлетворительно – менее 45 баллов.

Вопросы для коллоквиумов по дисциплине Квантово-химическое изучение механизмов химических реакций

Коллоквиум № 1

Введение в курс «Квантово-химическое изучение механизмов химических реакций»

Основные понятия и определения. Связь структура – реакционная способность. Факторы влияющие на реакционную способность орг. соединений. Электронные и стерические эффекты заместителей (индуктивный, мезомерный, конъюгация, влияние через пространство), влияние растворителя. Классификация реагентов с точки зрения электронного строения- нуклефилы, электрофилы, радикалы. Связь нуклеофильности и основности.

Теория ЖМКО

Понятие о механизме химической реакции - классификация механизмов реакций, основные количественные параметры, элементарная стадия, принцип микрообратимости, скорость лимитирующая стадия. Понятие о термодинамическом и кинетическом видах контроля.

Методы исследования механизма реакции. Изотопный эффект, анализ относительной реакционной способности, встречный синтез, анализ и установление строения интермедиатов, определение скорости и порядка реакции.

Квантово химическое моделирование. Расчет тепловых эффектов, прочности связей, относительной устойчивости интермедиатов. Поиск переходных состояний и лимитирующих стадий.

Понятие об интермедиатах. Электронодефицитные частицы- карбениевые ионы, diazonиевые ионы, карбены, нитрены, илиды. Факторы определяющие их устойчивость. Методы генерирования, основные направления стабилизации – перегруппировки, элиминирование катиона, взаимодействие с нуклеофилом.

Карбанионы как C-H кислоты. Строение и стабильность карбанионов. Амбидентные карбанионы. Таутомерные превращения. Методы генерирования, основные направления стабилизации – перегруппировки, взаимодействие с электронофилами

Радикалы, строение и стабильность, факторы определяющие их устойчивость. Методы генерирования, основные направления стабилизации радикалов -перегруппировки, β -распад, взаимодействие субстратом.

Коллоквиум № 2

Реакции нуклеофильного замещения у насыщенного атома углерода. Классификация механизмов реакций нуклеофильного замещения. Основные характеристики S_N1 , S_N2 реакций. Энергетический профиль реакций. Кинетика, стереохимические аспекты. Влияние природы радикала, уходящей группы, субстрата, природы нуклеофильного агента, растворителя на скорость S_N2 и S_N1 реакций.

Нуклеофильное ароматическое замещение. Общие представления. Механизм отщепления присоединения. Методы генерирования и фиксации дегидробензола. Строение дегидробензола. Механизм присоединения отщепления S_NAr . Активирующее влияние электроноакцепторных заместителей. Анионные комплексы Мейзенгеймера и их строение.

S_N1Ar . Механизм ароматического нуклеофильного замещения в реакциях гидролиза катиона арендиазония.

Реакции электрофильного замещения в ароматическом ряду S_EAr . Механизме реакций, кинетический изотопный эффект, π - и σ - комплексы. Структура переходного состояния. Влияние природы заместителя на региоселективность и скорость реакции электрофильного замещения (I и M эффекты). Согласованная и несогласованная ориентация заместителей в ароматическом кольце. Особенности реакций нитрования, галогенирования, сульфирования (обратимость – ipso замещение), алкилирования, ацилирования. Реакция с солями диазония.

Коллоквиум № 3

Реакции элиминирования. Классификация механизмов элиминирования: E1, E2 и E1cb. Направление элиминирования. Правила Зайцева и Гофмана. Влияние на направление отщепления природы основания и уходящей группы. Конкуренция процессов E2 и S_N2 , E1 и S_N1 . Факторы влияющие на эту конкуренцию. Стереохимия элиминирования: *син* и *анти* элиминирование. Влияние конформационного положения функциональных групп в циклоалканах на реакционную способность на примере реакций замещения, отщепления. Электрофильное присоединение (Ad_E) Общее представление о механизме реакций, π и сигма комплексы, ониевые ионы. Региоселективность с точки зрения орбитального строения, Стереохимические аспекты - *син* и *анти* присоединение. Реакции Ad_E и E_N как взаимосвязанные процессы.

Нуклеофильное присоединение (Ad_N) к полярным кратным связям ($C=O$, $C=N...$). Общее представление о механизме реакций. Строение и реакционная способность. Спирты, вода, амины, цианиды, меркаптаны, гидриданион и карбанионы в качестве нуклеофилов. Основной и кислотный катализ. Особенности присоединения к системам $C=C-C=O$.

Вопросы для зачета

Основные понятия и определения. Связь структура – реакционная способность. Факторы влияющие на реакционную способность орг. соединений. Электронные и стерические эффекты заместителей (индуктивный, мезомерный, конъюгация, влияние через пространство), влияние растворителя. Классификация реагентов с точки зрения электронного строения- нуклефилы, электрофилы, радикалы. Связь нуклеофильности и основности. Теория ЖМКО

Понятие о механизме химической реакции - классификация механизмов реакций, основные количественные параметры, элементарная стадия, принцип микрообратимости, скорость лимитирующая стадия. Понятие о термодинамическом и кинетическом видах контроля. Методы исследования механизма реакции. Изотопный эффект, анализ относительной реакционной способности, встречный синтез, анализ и установление строения интермедиатов, определение скорости и порядка реакции.

Квантово химическое моделирование. Расчет тепловых эффектов, прочности связей, относительной устойчивости интермедиатов. Поиск переходных состояний и лимитирующих стадий.

Понятие об интермедиатах. Электронодефицитные частицы- карбениевые ионы, диазониевые ионы, карбены, нитрены, илиды. Факторы определяющие их устойчивость. Методы генерирования, основные направления стабилизации – перегруппировки, элиминирование катиона, взаимодействие с нуклеофилом.

Карбанионы как C-H кислоты. Строение и стабильность карбанионов. Амбидентные карбанионы. Таутомерные превращения. Методы генерирования, основные направления стабилизации – перегруппировки, взаимодействие с электронофилами
Радикалы, строение и стабильность, факторы определяющие их устойчивость. Методы генерирования, основные направления стабилизации радикалов -перегруппировки, β -распад, взаимодействие субстратом.

Реакции нуклеофильного замещения у насыщенного атома углерода. Классификация механизмов реакций нуклеофильного замещения. Основные характеристики S_N1 , S_N2 реакций. Энергетический профиль реакций. Кинетика, стереохимические аспекты. Влияние природы радикала, уходящей группы, субстрата, природы нуклеофильного агента, растворителя на скорость S_N2 и S_N1 реакций.

Нуклеофильное ароматическое замещение. Общие представления. Механизм отщепления присоединения. Методы генерирования и фиксации дегидробензола. Строение дегидробензола. Механизм присоединения отщепления S_NAr . Активирующее влияние электроноакцепторных заместителей.

Анионные комплексы Мейзенгеймера и их строение. S_N1Ar . Механизм ароматического нуклеофильного замещения в реакциях гидролиза катиона арендиазония.

Реакции элиминирования. Классификация механизмов элиминирования: E1, E2 и E1cb. Направление элиминирования. Правила Зайцева и Гофмана. Влияние на направление отщепления природы основания и уходящей группы. Конкуренция процессов E2 и S_N2 , E1 и S_N1 . Факторы влияющие на эту конкуренцию. Стереохимия элиминирования: *син* и *анти* элиминирование. Влияние конформационного положения функциональных групп в циклоалканах на реакционную способность на примере реакций замещения, отщепления. Электрофильное присоединение (Ad_E) Общее представление о механизме реакций, π и сигма комплексы, ониевые ионы. Региоселективность с точки зрения орбитального строения, Стереохимические аспекты - *син* и *анти* присоединение. Реакции Ad_E и E_N как взаимосвязанные процессы.

Нуклеофильное присоединение (Ad_N) к полярным кратным связям (C=O, C=N...). Общее представление о механизме реакций. Строение и реакционная способность. Спирты, вода, амины, цианиды, меркаптаны, гидриданион и карбанионы в качестве нуклеофилов. Основной и кислотный катализ. Особенности присоединения к системам C=C-C=O.

5. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

5.1. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины

Основная литература:

1. Марч Дж. Органическая химия. изд. 6. NY: Wiley-Science, 2008
2. Сайкс П. Механизмы реакций в органической химии. изд 4. М.: Химия, 2005.
3. Сандберг Р. Углубленный курс органической химии. изд. 12 М.: Химия, 2007.
4. Йенсен Ф. Введение в вычислительную химию. изд. 2 NY: Wiley-Science, 2005

Дополнительная литература:

5. О.А. Реутов, А.Л. Курц, К.П. Бутин Органическая химия. В 4 т. М: Изд-во МГУ 2008.

5.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» и программного обеспечения, необходимых для освоения дисциплины

- Libre Office (Calc, Writer, Impress, Base и т.д.)

- Skype
- Вебинар
- Портал электронного обучения БГУ e.bsu.ru
- Система дифференцированного интернет-обучения Hecadem
- Moodle.bsu.ru
- Личный кабинет преподаватели или студента БГУ <http://my.bsu.ru/>
- Федеральное интернет – тестирование: проекты «Интернет-тренажеры в сфере профессионального образования» и «Федеральный интернет-экзамен в сфере профессионального образования».
 - автоматизированная система управления - база данных «Университет»
 - электронные библиотечные системы: Руконт, издательство «Лань», Консультант студента

6. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине

Наименование специализированных аудиторий, кабинетов, лабораторий	Вид занятий	Наименование оборудования, программного обеспечения
1	2	3
<p>Химфак корпус, по адресу: 450076, Республика Башкортостан, г. Уфа, Кировский р-н, ул. Заки Валиди, д. 32, литер В, (учебные аудитории для проведения занятий лекционного типа, для групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации):</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Ауд. 405, 2. Ауд. 310, 3. Ауд. 311, 4. Ауд. 305 5. ауд. 001, 6. ауд. 002 7. ауд. 006 8. ауд. 007 9. ауд. 008 	Лекции	<ol style="list-style-type: none"> 1. Мультимедиа-проектор BenQ MX660 (инв. № 410134000000111) (405 ауд.); 2. Мультимедиа-проектор Mitsubishi EW230ST 2.8 кг (инв. № 410134000000106) (311 ауд.), 3. Мультимедиа-проектор Mitsubishi EW230ST 2.8 кг (инв. № 410134000000107) (310 ауд.), 4. Проектор Mitsubishi XD 490U DLP True XGA 1024*768 3000 ANSI (000001101044092) (305 ауд.), 5. Экран настенный Classic Norma 244*183 (инв. № 410134000000138) (405 ауд.), 6. Экран настенный Classic на штативе 244*183 с возм.настенного (инв. № 410134000000154) (311 ауд.)
<p>Химфак корпус, по адресу: 450076, Республика Башкортостан, г. Уфа, Кировский р-н, ул. Заки Валиди, д. 32, литер В, Аудитории для проведения лабораторных занятий:</p> <p>Лаборатория №201 Лаборатория №213 Лаборатория №215 Лаборатория №228</p>	Лабораторные работы	<ol style="list-style-type: none"> 1. Набор химической посуды 2. Весы Ohaus SPU-402 электронные(000002101043292) 3. Генератор чистого водорода (210134000003761) 4. Дистиллятор ДЭ-4 электрический (000002101042653) 5. Комплекс «Хроматэк-кристалл» аппаратнопрограммный для мед.исследований(000002101041625) 6. Спектрофотометр(1101041148) 7. Мешалка верхнеприводная RW 11basic 0-2000 об.(21010473370 8. Перемешивающее устройство ПЭ-6500(1101042957) 9. Шкаф лабораторный СПТ-200(1101041229) 10. Рефрактометр(1101043869) 11. УльтратермостатNBE(1101040126) 12. Насос вакуумный KNF (410134000009290) 13. Колбонагреватель(2101047336) 14. Насос вакуумный мембранный НВМ-12(2101047411) 15. Шкаф сушильный КС-65(1101041322)

		16. Магнитная мешалка ПЗ-6110(2101042352) 17. Плитка ОКА-4 электрическая-10 шт 18. Хроматограф «Хром-5» (1101040838) 19. Ротационный испаритель (410134000000002)
--	--	--

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
ФГБОУ ВО «БАШКИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

СОДЕРЖАНИЕ РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ

дисциплины Квантово-химическое изучение механизмов химических реакций
на 7,8 семестр
очная
форма обучения

Вид работы	Объем дисциплины
Общая трудоемкость дисциплины (ЗЕТ / часов)	2/72
Учебных часов на контактную работу с преподавателем:	64,7
лекций	32
практических/ семинарских	-
лабораторных	32
других (групповая, индивидуальная консультация и иные виды учебной деятельности, предусматривающие работу обучающихся с преподавателем)(ФКР)	0,7
Учебных часов на самостоятельную работу обучающихся (СР)	7.3
Учебных часов на подготовку к экзамену/зачету/дифференцированному зачету (Контроль)	-

Форма(ы) контроля:
Зачет 8 семестр

№ п/п	Тема и содержание	Форма изучения материалов: лекции, практические занятия, семинарские занятия, лабораторные работы, самостоятельная работа и трудоемкость (в часах)				Основная и дополнительная литература, рекомендуемая студентам (номера из списка)	Задания по самостоятельной работе студентов	Форма текущего контроля успеваемости (коллоквиумы, контрольные работы, компьютерные тесты и т.п.)
		ЛК	ПР/С ЕМ	ЛР	СРС			
1	2	3	4	5	6	7	8	9
1.	<p>Основные понятия и определения. Связь структура – реакционная способность. Факторы влияющие на реакционную способность орг.соединений. Электронные и стерические эффекты заместителей (индуктивный, мезомерный, конъюгация, влияние через пространство), влияние растворителя. Классификация реагентов с точки зрения электронного строения- нуклефилы, электрофилы, радикалы. Связь нуклеофильности и основности. Теория ЖМКО</p> <p>Понятие о механизме химической реакции - классификация механизмов реакций, основные количественные параметры, элементарная стадия, принцип микрообратимости, скорость лимитирующая стадия. Понятие о термодинамическом и кинетическом видах контроля.</p>	4	-	2	1.3	[1-5]	1-10 [1-5]	Индивидуальный опрос
2.	<p>Методы исследования механизма реакции. Изотопный эффект, анализ относительной реакционной способности, встречный синтез, анализ и установление строения интермедиатов, определение скорости и порядка реакции. Квантово химическое моделирование. Расчет тепловых эффектов, прочности связей, относительной устойчивости</p>	4	-	4	1	[1-5]	11-20 [1-5]	Индивидуальный , групповой опрос

	интермедиатов. Поиск переходных состояний и лимитирующих стадий.							
3.	<p>Понятие об интермедиатах. Электронодефицитные частицы-карбениевые ионы, diaзонивые ионы, карбены, нитрены, илиды. Факторы определяющие их устойчивость. Методы генерирования, основные направления стабилизации – перегруппировки, элиминирование катиона, взаимодействие с нуклеофилом.</p> <p>Карбанионы как C-H кислоты. Строение и стабильность карбанионов. Амбидентные карбанионы. Таутомерные превращения. Методы генерирования, основные направления стабилизации – перегруппировки, взаимодействие с электронофилами</p> <p>Радикалы, строение и стабильность, факторы определяющие их устойчивость. Методы генерирования, основные направления стабилизации радикалов -перегруппировки, β-распад, взаимодействие субстратом.</p>	4	-	4	1	[1-5]	21-35 [1-5]	Коллоквиум № 1
4.	Реакции нуклеофильного замещения у насыщенного атома углерода. Классификация механизмов реакций нуклеофильного замещения. Основные характеристики S_N1 , S_N2 реакций. Энергетический профиль реакций. Кинетика, стереохимические аспекты. Влияние природы радикала, уходящей группы, субстрата, природы нуклеофильного агента, растворителя на скорость S_N2 и S_N1 реакций.	4	-	4	1	[1-5]	40-55 [1-5]	Индивидуальный , групповой опрос
5	Нуклеофильное ароматическое замещение. Общие представления. Механизм отщепления присоединения. Методы генерирования и фиксации дегидробензола. Строение дегидробензола. Механизм присоединения	4	-	4	1	[1-5]	56-60 [1-5]	Индивидуальный , групповой опрос

	отщепления S_NAr . Активирующее влияние электроноакцепторных заместителей. Анионные комплексы Мейзенгеймера и их строение. S_N1Ar . Механизм ароматического нуклеофильного замещения в реакциях гидролиза катиона арендиазония.							
6	Реакции элиминирования. Классификация механизмов элиминирования: $E1$, $E2$ и $E1cb$. Направление элиминирования. Правила Зайцева и Гофмана. Влияние на направление отщепления природы основания и уходящей группы. Конкуренция процессов $E2$ и S_N2 , $E1$ и S_N1 . Факторы влияющие на эту конкуренцию. Стереохимия элиминирования: <i>син</i> и <i>анти</i> элиминирование. Влияние конформационного положения функциональных групп в циклоалканах на реакционную способность на примере реакций замещения, отщепления.	4	-	4	1	[1-5]	61-70 [1-5]	Коллоквиум № 2
7	Электрофильное присоединение (Ad_E) Общее представление о механизме реакций, пи и сигма комплексы, ониеые ионы. Региоселективность с точки зрения орбитального строения, Стереохимические аспекты - <i>син</i> и <i>анти</i> присоединение. Реакции Ad_E и E_N как взаимосвязанные процессы.	4		4	-	[1-5]	61-70 [1-5]	Индивидуальный , групповой опрос
8	Нуклеофильное присоединение (Ad_N) к полярным кратным связям ($C=O$, $C=N...$). Общее представление о механизме реакций. Строение и реакционная способность. Спирты, вода, амины, цианиды, меркаптаны, гидриданион и карбанионы в качестве нуклеофилов. Основной и кислотный катализ. Особенности присоединения к системам $C=C-C=O$.	1		1	1	[1-5]	56-60	Коллоквиум № 3
Всего часов:		32		32	7.3			

РЕЙТИНГ-ПЛАН ДИСЦИПЛИНЫ

Квантово-химическое изучение механизмов химических реакций

Направление 04.03.01 «Химия»

курс 4, семестр 7,8

Виды учебной деятельности студентов	Балл за конкретное задание	Число заданий за семестр	Баллы	
			минимальный	максимальный
Модуль 1				
Текущий контроль				
1. Индивидуальный опрос	5	2	0	10
2. Групповой опрос	5	2	0	10
Рубежный контроль				
Коллоквиум	10	1	0	10
Модуль 2				
Текущий контроль				
1. Индивидуальный опрос	5	2	0	10
2. Групповой опрос	5	2	0	10
Рубежный контроль				
Коллоквиум	10	1	0	10
Тест	10	1	0	10
Поощрительные баллы				
1. Студенческая олимпиада	5	1	0	5
2. Публикация статей	5	1	0	5
Посещаемость (баллы вычитаются из общей суммы набранных баллов)				
1. Посещение лекционных занятий			0	-6
2. Посещение практических (семинарских, лабораторных занятий)			0	-10
Итоговый контроль				
Экзамен	30	1	0	30

