

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
ФГБОУ ВО «БАШКИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

Утверждено:
на заседании кафедры
протокол от № 2 «17» 03. 2020г.
Зав. кафедрой Галипов Р.Ф. /Галипов Р.Ф.

Согласовано:
Председатель УМК химического факультета
Гарифуллина Г.Г. /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

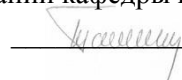
| | |
|--|---|
| Разработчик (составитель) Профессор, д.х.н. (должность, ученая степень, ученое звание) | <u>Вакулин И.В.</u> / Вакулин И.В. (подпись, Фамилия И.О.) |
|--|---|

Для приема 2020года

Уфа 2020


Составитель: Вакулин И.В.

Рабочая программа дисциплины утверждена на заседании кафедры протокол от № 2 «17» 03. 2020г.
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 проводить |

| | | | | |
|---|---|---|--|--|
| 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 ($C=O$, $C=N\dots$). 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 электрофилами
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, пи 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. | <p>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.</p> | 4 | - | 4 | 1 | [1-5] | 40-55 [1-5] | Индивидуальный , групповой опрос |
| 5 | <p>Нуклеофильное ароматическое замещение. Общие представления. Механизм отщепления присоединения. Методы генерирования и фиксации дегидробензола. Строение дегидробензола. Механизм присоединения</p> | 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 |

