

МИНОБРНАУКИ РОССИИ  
ФГБОУ ВО «БАШКИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»  
ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

Утверждено:  
на заседании кафедры  
протокол от № 6 «09» 06. 2018г.  
Зав. кафедрой \_\_\_\_\_ /Галипов Р.Ф.

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

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)**

ДИСЦИПЛИНА Квантово-химическое изучение механизмов химических реакций


Базовая часть 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)	 / Вакулин И.В. (подпись, Фамилия И.О.)
--	--

Для приема 2018 года

Уфа 2018

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:

Результаты обучения		Формируемая компетенция (с указанием кода)	Примечание
Знания	Знать: теоретические основы базовых химических дисциплин	ОПК-1 способностью использовать полученные знания теоретических основ фундаментальных разделов химии при решении профессиональных задач	
	Знать стандартные методы получения, идентификации и исследования свойств веществ и материалов, правила обработки и оформления результатов работы, нормы ТБ	ОПК-2 владением навыками химического эксперимента, основными синтетическими и аналитическими методами получения и исследования химических веществ и реакций	
	Знать основные методы синтеза и анализа химических веществ, принципа работы стандартных лабораторных приборов.	ПК- 1 способностью выполнять стандартные операции по предлагаемым методикам	
	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 владением базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований	
Умения	Уметь решать типовые учебные задачи по основным (базовым) химическим дисциплинам Уметь выполнять стандартные действия (классификация веществ, составление схем процессов, систематизация данных и т.п.) с учетом основных понятий и общих закономерностей, формулируемых в рамках базовых химических дисциплин	ОПК-1 способностью использовать полученные знания теоретических основ фундаментальных разделов химии при решении профессиональных задач	
	Уметь проводить простые химические опыты по предлагаемым методикам	ОПК-2 владением навыками химического эксперимента, основными синтетическими и аналитическими методами получения и исследования химических веществ и реакций	
	Уметь выполнять основные операции выполняемые при синтезе и анализе химических соединений	ПК- 1 способностью выполнять стандартные операции по предлагаемым методикам	
	Уметь проводить химические эксперименты с использованием современной аппаратуры	ПК- 2 владением базовыми навыками использования	

		современной аппаратуры при проведении научных исследований	
Владения (навыки / опыт деятельности)	Владеть навыками работы с учебной литературой по основным химическим дисциплинам	ОПК-1 способностью использовать полученные знания теоретических основ фундаментальных разделов химии при решении профессиональных задач	
	Владеть базовыми навыками проведения химического эксперимента и оформления его результатов	ОПК-2 владением навыками химического эксперимента, основными синтетическими и аналитическими методами получения и исследования химических веществ и реакций	
	Владеть навыками выполнения стандартных операций по предлагаемым методикам	ПК- 1 способностью выполнять стандартные операции по предлагаемым методикам	
	Владеть базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований	ПК- 2 владением 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

ОПК-1 способностью использовать полученные знания теоретических основ фундаментальных разделов химии при решении профессиональных задач

Этап (уровень) освоения компетенции	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций)	2 («Не удовлетворительно»)	3 («Удовлетворительно»)	4 («Хорошо»)	5 («Отлично»)
Первый этап (уровень)	Знать: теоретические основы базовых химических дисциплин	Не знает теоретические основы базовых химических дисциплин	Имеет фрагментарные знания о теоретических основах базовых химических дисциплин	В целом знает теоретические основы базовых химических дисциплин	Демонстрирует целостные знания о теоретических основах базовых химических дисциплин
Второй этап (уровень)	Уметь решать типовые учебные задачи по основным (базовым) химическим дисциплинам Уметь выполнять стандартные действия (классификация веществ, составление схем процессов, систематизация данных и т.п.) с учетом основных понятий и общих закономерностей, формулируемых в рамках базовых химических дисциплин	Не умеет решать типовые учебные задачи по основным (базовым) химическим дисциплинам и выполнять стандартные действия (классификация веществ, составление схем процессов, систематизация данных и т.п.) с учетом основных понятий и общих закономерностей	Умеет решать типовые учебные задачи по основным (базовым) химическим дисциплинам и выполнять стандартные действия (классификация веществ, составление схем процессов, систематизация данных и т.п.) с учетом основных понятий и общих закономерностей	Умеет решать типовые учебные задачи по основным (базовым) химическим дисциплинам и выполнять стандартные действия (классификация веществ, составление схем процессов, систематизация данных и т.п.) с учетом основных понятий и общих закономерностей	Умеет решать типовые учебные задачи по основным (базовым) химическим дисциплинам и выполнять стандартные действия (классификация веществ, составление схем процессов, систематизация данных и т.п.) с учетом основных понятий и общих закономерностей

		стей, формулируемых в рамках базовых химических дисциплин	стей, формулируемых в рамках базовых химических дисциплин, но допускает значительные ошибки	понятий и общих закономерностей, формулируемых в рамках базовых химических дисциплин, но допускает незначительные ошибки	понятий и общих закономерностей, формулируемых в рамках базовых химических дисциплин
Третий этап (уровень)	Владеть навыками работы с учебной литературой по основным химическим дисциплинам	Не владеет навыками работы с учебной литературой по основным химическим дисциплинам	Недостаточно владеет навыками работы с учебной литературой по основным химическим дисциплинам	Владеет отдельными навыками работы с учебной литературой по основным химическим дисциплинам	Владеет достаточно полными навыками работы с учебной литературой по основным химическим дисциплинам

ОПК-2 владением навыками химического эксперимента, основными синтетическими и аналитическими методами получения и исследования химических веществ и реакций

Этап (уровень) освоения компетенции и	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций)	2 («Не удовлетворительно»)	3 («Удовлетворительно»)	4 («Хорошо»)	5 («Отлично»)
Первый этап (уровень)	Знать стандартные методы получения, идентификации и исследования свойств веществ и материалов, правила обработки и оформления результатов работы, нормы ТБ	Не знает стандартные методы получения, идентификации и исследования свойств веществ и материалов, правила обработки и	Имеет фрагментарные знания о стандартных методах получения, идентификации и исследования свойств веществ и материалов	В целом знает стандартные методы получения, идентификации и исследования свойств веществ и материалов, правила обработки и	Демонстрирует целостные знания о стандартных методах получения, идентификации и исследования свойств веществ и материалов, правил

		оформления результатов работы, нормы ТБ	, правил обработки и оформления результатов работы, нормах ТБ	оформления результатов работы, нормы ТБ	обработки и оформления результатов работы, нормах ТБ
Второй этап (уровень)	Уметь проводить простые химические опыты по предлагаемым методикам	Не умеет проводить простые химические опыты по предлагаемым методикам	Умеет проводить простые химические опыты по предлагаемым методикам но допускает значительные ошибки	Умеет проводить простые химические опыты по предлагаемым методикам но допускает незначительные ошибки	Умеет проводить простые химические опыты по предлагаемым методикам
Третий этап (уровень)	Владеть базовыми навыками проведения химического эксперимента и оформления его результатов	Не владеет базовыми навыками проведения химического эксперимента и оформления его результатов	Недостаточно владеет базовыми навыками проведения химического эксперимента и оформления его результатов	Владеет отдельными навыками базовыми навыками проведения химического эксперимента и оформления его результатов	Владеет достаточно полными базовыми навыками проведения химического эксперимента и оформления его результатов

ПК- 1 способностью выполнять стандартные операции по предлагаемым методикам

Этап (уровень) освоения компетенции	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций)	2 («Не удовлетворительно»)	3 («Удовлетворительно»)	4 («Хорошо»)	5 («Отлично»)
Первый этап (уровень)	Знать основные методы синтеза и анализа химических веществ, принципа работы стандартных лабораторных приборов.	Не знает основные методы синтеза и анализа химических веществ, принципа работы стандартных лабораторных	Имеет фрагментарные знания об основных методах синтеза и анализа химических веществ, принципа работы	В целом знает основные методы синтеза и анализа химических веществ, принципа работы стандартных лабораторных	Демонстрирует целостные знания об основных методах синтеза и анализа химических веществ, принципа работы стандартных



		ых приборов.	стандартных лабораторных приборов..	х приборов.	лабораторных приборов.
Второй этап (уровень)	Уметь выполнять основные операции выполняемые при синтезе и анализе химических соединений	Не умеет выполнять основные операции выполняемые при синтезе и анализе химических соединений математики и естественно научных дисциплин	Умеет выполнять основные операции выполняемые при синтезе и анализе химических соединений но допускает значительные ошибки	Умеет выполнять основные операции выполняемые при синтезе и анализе химических соединений но допускает незначительные ошибки	Умеет выполнять основные операции выполняемые при синтезе и анализе химических соединений
Третий этап (уровень)	Владеть навыками выполнения стандартных операций по предлагаемым методикам	Не владеет навыками выполнения стандартных операций по предлагаемым методикам	Недостаточно владеет навыками выполнения стандартных операций по предлагаемым методикам	Владеет отдельными навыками выполнения стандартных операций по предлагаемым методикам	Владеет достаточно полными навыками выполнения стандартных операций по предлагаемым методикам

ПК- 2 владением базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований

Этап (уровень) освоения компетенции	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций)	2 («Не удовлетворительно»)	3 («Удовлетворительно»)	4 («Хорошо»)	5 («Отлично»)
Первый этап (уровень)	Знать стандартные методы применения современной аппаратуры при проведении научных исследований, идентификации и исследования свойств веществ и материалов, правила обработки и	Не знает стандартные методы применения современной аппаратуры при проведении	Имеет фрагментарные знания о стандартных методах применения современной аппаратуры при проведении	В целом знает стандартные методы применения современной аппаратуры при проведении научных	Демонстрирует целостные знания о стандартных методах применения современной аппаратуры при проведении

	оформления результатов работы, нормы ТБ	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, нормах ТБ	исследования, идентификации и исследования свойств веществ и материалов, правила обработки и оформления результатов работы, нормы ТБ	научных исследований, идентификации и исследования свойств веществ и материалов, правила обработки и оформления результатов работы, нормах ТБ.
Второй этап (уровень)	Уметь проводить химические эксперименты с использованием современной аппаратуры	Не умеет проводить химические эксперименты с использованием современной аппаратуры	Умеет проводить химические эксперименты с использованием современной аппаратуры но допускает значительные ошибки	Умеет проводить химические эксперименты с использованием современной аппаратуры но допускает незначительные ошибки	Умеет проводить химические эксперименты с использованием современной аппаратуры
Третий этап (уровень)	Владеть базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований	Не владеет базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований	Недостаточно владеет базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований	Владеет отдельными базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований	Владеет достаточно полными базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований

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**

Этапы освоения	Результаты обучения <sup>1</sup>	Компетенция	Оценочные средства
Знания	Знать: теоретические основы базовых химических дисциплин	ОПК-1 способностью использовать полученные знания теоретических основ фундаментальных разделов химии при решении профессиональных задач	Индивидуальный, групповой опрос коллоквиум, тест
	Знать стандартные методы получения, идентификации и исследования свойств веществ и материалов, правила обработки и оформления результатов работы, нормы ТБ	ОПК-2 владением навыками химического эксперимента, основными синтетическими и аналитическими методами получения и исследования химических веществ и реакций	Индивидуальный, групповой опрос коллоквиум, тест
	Знать основные методы синтеза и анализа химических веществ, принципа работы стандартных лабораторных приборов.	ПК- 1 способностью выполнять стандартные операции по предлагаемым методикам	Индивидуальный, групповой опрос коллоквиум, тест
	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 владением базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований	Индивидуальный, групповой опрос коллоквиум, тест
Умения	Уметь решать типовые	ОПК-1 способностью использовать	Индивидуальный,

<sup>1</sup> Должны соответствовать картам компетенций.

	учебные задачи по основным (базовым) химическим дисциплинам Уметь выполнять стандартные действия (классификация веществ, составление схем процессов, систематизация данных и т.п.) с учетом основных понятий и общих закономерностей, формулируемых в рамках базовых химических дисциплин	полученные знания теоретических основ фундаментальных разделов химии при решении профессиональных задач	групповой опрос коллоквиум, тест
	Уметь проводить простые химические опыты по предлагаемым методикам	ОПК-2 владением навыками химического эксперимента, основными синтетическими и аналитическими методами получения и исследования химических веществ и реакций	Индивидуальный, групповой опрос коллоквиум, тест
	Уметь выполнять основные операции выполняемые при синтезе и анализе химических соединений	ПК- 1 способностью выполнять стандартные операции по предлагаемым методикам	Индивидуальный, групповой опрос коллоквиум, тест
	Уметь проводить химические эксперименты с использованием современной аппаратуры	ПК- 2 владением базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований	Индивидуальный, групповой опрос коллоквиум, тест
Владения (навыки / опыт деятельности)	Владеть навыками работы с учебной литературой по основным химическим дисциплинам	ОПК-1 способностью использовать полученные знания теоретических основ фундаментальных разделов химии при решении профессиональных задач	Индивидуальный, групповой опрос коллоквиум, тест
	Владеть базовыми навыками проведения химического эксперимента и оформления его результатов	ОПК-2 владением навыками химического эксперимента, основными синтетическими и аналитическими методами получения и исследования химических веществ и реакций	Индивидуальный, групповой опрос коллоквиум, тест
	Владеть навыками выполнения стандартных операций по предлагаемым	ПК- 1 способностью выполнять стандартные операции по предлагаемым методикам	Индивидуальный, групповой опрос коллоквиум, тест

	методикам		
	Владеть базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований	ПК- 2 владением базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований	Индивидуальный, групповой опрос 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-N 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,  $\beta$ -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,  $\pi$ - и  $\sigma$ - 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 (обратимост – ипсо 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,  $\pi$  и  $\sigma$  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 преподавателя 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"> <li>1. Ауд. 405,</li> <li>2. Ауд. 310,</li> <li>3. Ауд. 311,</li> <li>4. Ауд. 305</li> <li>5. ауд. 001,</li> <li>6. ауд. 002</li> <li>7. ауд. 006</li> <li>8. ауд. 007</li> <li>9. ауд. 008</li> </ol>	Лекции	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Мультимедиа-проектор BenQ MX660 (инв. № 410134000000111) (405 ауд.);</li> <li>2. Мультимедиа-проектор Mitsubishi EW230ST 2.8 кг (инв. № 410134000000106) (311 ауд.),</li> <li>3. Мультимедиа-проектор Mitsubishi EW230ST 2.8 кг (инв. № 410134000000107) (310 ауд.),</li> <li>4. Проектор Mitsubishi XD 490U DLP True XGA 1024*768 3000 ANSI (000001101044092 ) (305 ауд.),</li> <li>5. Экран настенный Classic Norma 244*183 (инв. № 410134000000138) (405 ауд.),</li> <li>6. Экран настенный Classic на штативе 244*183 с возм.настенного (инв. № 410134000000154) (311 ауд.)</li> </ol>
<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"> <li>1. Набор химической посуды</li> <li>2. Весы Ohaus SPU-402 электронные(000002101043292)</li> <li>3. Генератор чистого водорода (210134000003761)</li> <li>4. Дистиллятор ДЭ-4 электрический (000002101042653)</li> <li>5. Комплекс «Хроматэк-кристалл» аппаратнопрограммный для мед.исследований(000002101041625)</li> <li>6. Спектрофотометр(1101041148)</li> <li>7. Мешалка верхнеприводная RW 11basic 0-2000 об.(21010473370</li> <li>8. Перемешивающее устройство ПЭ-6500(1101042957)</li> <li>9. Шкаф лабораторный СПТ-200(1101041229)</li> <li>10. Рефрактометр(1101043869)</li> <li>11. УльтратермостатNBE(1101040126)</li> <li>12. Насос вакуумный KNF (410134000009290)</li> <li>13. Колбонагреватель(2101047336)</li> <li>14. Насос вакуумный мембранный НВМ-12(2101047411)</li> <li>15. Шкаф сушильный КС-65(1101041322)</li> </ol>



		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

<b>Вид работы</b>	<b>Объем дисциплины</b>
Общая трудоемкость дисциплины (ЗЕТ / часов)	4/144
Учебных часов на контактную работу с преподавателем:	62,7
лекций	32
практических/ семинарских	-
лабораторных	30
других (групповая, индивидуальная консультация и иные виды учебной деятельности, предусматривающие работу обучающихся с преподавателем)(ФКР)	0,7
Учебных часов на самостоятельную работу обучающихся (СР)	81.3
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>Введение в курс «Химия реакционных интермедиатов». 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	10	[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</p>	4	-	4	11.3	[1-5]	11-20 [1-5]	Индивидуальный , групповой опрос

	эффектов, прочности связей, относительной устойчивости интермедиатов. Поиск переходных состояний и лимитирующих стадий.							
3.	<p>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.</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, <math>\beta</math>-распад, взаимодействие субстратом.</p>	4	-	4	10	[1-5]	21-35 [1-5]	Групповой опрос
4.	<p>Реакции нуклеофильного замещения у насыщенного атома углерода. Классификация механизмов реакций нуклеофильного замещения. Основные характеристики <math>S_N1</math>, <math>S_N2</math> реакций. Энергетический профиль реакций. Кинетика, стереохимические аспекты. Влияние природы радикала, уходящей группы, субстрата, природы нуклеофильного агента, растворителя на скорость <math>S_N2</math> и <math>S_N1</math> реакций.</p>	4	-	4	10	[1-5]	40-55 [1-5]	Индивидуальный опрос
5	<p>Нуклеофильное ароматическое замещение. Общие представления. Механизм отщепления присоединения. Методы генерирования и фиксации дегидробензола.</p>	4	-	4	10	[1-5]	56-60 [1-5]	Индивидуальный , групповой опрос

	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.							
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	10	[1-5]	61-70 [1-5]	Групповой опрос
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	10	[1-5]	61-70 [1-5]	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 $C=C-C=O$ .	4		4	10	[1-5]	56-60	Индивидуальный , групповой опрос
	<b>Всего часов:</b>	32		30	81.3			

## 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
<b>Модуль 1</b>				
<b>Текущий контроль</b>				
1. Индивидуальный опрос	5	2	0	10
2. Групповой опрос	5	2	0	10
<b>Рубежный контроль</b>				
Коллоквиум	10	1	0	10
<b>Модуль 2</b>				
<b>Текущий контроль</b>				
1. Индивидуальный опрос	5	2	0	10
2. Групповой опрос	5	2	0	10
<b>Рубежный контроль</b>				
Коллоквиум	10	1	0	10
Тест	10	1	0	10
<b>Поощрительные баллы</b>				
1. Студенческая олимпиада	5	1	0	5
2. Публикация статей	5	1	0	5
<b>Посещаемость (баллы вычитаются из общей суммы набранных баллов)</b>				
1. Посещение лекционных занятий			0	-6
2. Посещение практических (семинарских, лабораторных занятий)			0	-10
<b>Итоговый контроль</b>				
Экзамен	30	1	0	30

