

Документ подписан простой электронной подписью  
Информация о владельце:  
ФИО: Сыров Игорь Анатольевич  
Должность: Директор  
Дата подписания: 21.08.2023 20:51:51  
Уникальный программный ключ:  
b683afe664d7e9f64175886cf9626a196149ad36

СТЕРЛИТАМАКСКИЙ ФИЛИАЛ  
ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО БЮДЖЕТНОГО ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО  
УЧРЕЖДЕНИЯ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
«УФИМСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ НАУКИ И ТЕХНОЛОГИЙ»

Факультет  
Кафедра

*Естественнонаучный*  
*Химии и химической технологии*

**Аннотация рабочей программы дисциплины (модуля)**

дисциплина ***Б1.В.ДВ.01.01 Механизмы химических реакций и методы их установления***

часть, формируемая участниками образовательных отношений

Направление

***04.04.01***

***Химия***

код

наименование направления

Программа

***Фундаментальная и прикладная химия***

Форма обучения

***Очная***

Для поступивших на обучение в  
***2022 г.***

Стерлитамак 2023

**1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с установленными в образовательной программе индикаторами достижения компетенций**

<b>Формируемая компетенция (с указанием кода)</b>	<b>Код и наименование индикатора достижения компетенции</b>	<b>Результаты обучения по дисциплине (модулю)</b>
ПК-1. Способен проводить научно-исследовательские и опытно-конструкторские работы по тематике организации	ПК-1.1. знает методы проведения исследований и разработок, средства и практику планирования, организации, проведения и внедрения научных исследований и разработок.	Обучающийся должен: знать современные подходы и методы исследования механизмов органических реакций; механизмы важнейших органических реакций; методы проведения эксперимента, закономерности процессов органических синтезов, полимеризации, поликонденсации и т.д.; основные принципы организации химического производства органических веществ, требования к качеству продукции и технологические приемы обеспечения требуемого качества.
	ПК-1.2. умеет применять актуальную нормативную документацию в соответствующей области знаний.	Обучающийся должен: уметь планировать эксперименты на основе анализа литературных данных и последних достижений науки; проводить научные исследования, ставить эксперименты по оптимизации процессов синтеза органических соединений; прогнозировать свойства органических веществ, исходя из их состава, способа получения, строения и структуры; интерпретировать экспериментальные данные и делать суждения о механизме химической реакции, природе переходного комплекса, интермедиатов и т.д., а также формулировать выводы.
	ПК-1.3. владеет навыками проведения анализа и теоретического обобщения научных данных в соответствии с задачами исследования.	Обучающийся должен: владеть навыками проведения типового эксперимента; общими подходами по качественному и количественному описанию и предсказанию реакционной способности органических соединений; анализа и обобщения результатов эксперимента;

		информацией о типах производственных процессов.
--	--	---

## 2. Цели и место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы

Цели изучения дисциплины:

получение студентами современных представлений о механизмах реакций, методах их исследования, а также формирование умения делать собственные заключения о механизме изучаемой реакции, ориентироваться в потоке информации, касающейся динамики химических процессов.

Задачи дисциплины:

1. Знакомство с теоретическими основами современной органической химии, с актуальными направлениями исследований в современной теоретической и экспериментальной химии.
2. Формирование глубокого понимания взаимосвязей между строением органических соединений, их реакционной способностью и механизмами превращений.
3. Выработка умения анализировать научную литературу - в том числе на иностранном языке - при выборе направления исследования, самостоятельно составлять план исследования.
4. Формирование навыков применения полученных знаний при выполнении работы, связанной со своей будущей профессиональной деятельностью.

Для освоения дисциплины «Механизмы химических реакций и методы их установления» требуются знания и умения, приобретенные обучающимися в результате освоения ряда дисциплин, таких как: "Планирование синтеза органических соединений", "Дополнительные главы высокомолекулярных соединений".

Дисциплина «Механизмы химических реакций и методы их установления» относится к части, формируемой участниками образовательных отношений.

Дисциплина изучается на 1 курсе в 2 семестре

## 3. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества академических или астрономических часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся

Общая трудоемкость (объем) дисциплины составляет 5 зач. ед., 180 акад. ч.

Объем дисциплины	Всего часов
	Очная форма обучения
Общая трудоемкость дисциплины	180
Учебных часов на контактную работу с преподавателем:	
лекций	12
практических (семинарских)	24
другие формы контактной работы (ФКР)	1,2
Учебных часов на контроль (включая часы подготовки):	34,8
экзамен	
Учебных часов на самостоятельную работу обучающихся (СР)	108

Формы контроля	Семестры
----------------	----------

экзамен	2
---------	---

**4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий**

**4.1. Разделы дисциплины и трудоемкость по видам учебных занятий (в академических часах)**

№ п/п	Наименование раздела / темы дисциплины	Виды учебных занятий, включая самостоятельную работу обучающихся и трудоемкость (в часах)			
		Контактная работа с преподавателем			СР
		Лек	Пр/Сем	Лаб	
<b>1</b>	<b>Строение и реакционная способность органических соединений</b>	<b>2</b>	<b>6</b>	<b>0</b>	<b>18</b>
1.1	Методы валентных связей и МО. Теория ароматичности.	1	2	0	6
1.2	Электронные и пространственные взаимодействия в молекулах. Проявления эффектов в молекулах. Кислотно-основные свойства соединений.	1	4	0	12
<b>2</b>	<b>Механизмы органических реакций</b>	<b>10</b>	<b>14</b>	<b>0</b>	<b>90</b>
2.1	Общие понятия о механизме химических реакций. Структура и устойчивость интермедиатов	1	2	0	16
2.2	Свободнорадикальные реакции	1	2	0	10
2.3	Мономолекулярное и бимолекулярное нуклеофильное замещение и отщепление	2	2	0	12
2.4	Реакции электрофильного замещения	2	2	0	12
2.5	Реакции нуклеофильного замещения	2	2	0	12
2.6	Реакции нуклеофильного присоединения к кратным связям углерод-кислород и углерод-азот	1	2	0	12
2.7	Применение физико-химических методов для идентификации органических соединений и установления механизмов реакций.	1	2	0	16
	<b>Итого</b>	<b>12</b>	<b>20</b>	<b>0</b>	<b>108</b>

**4.2. Содержание дисциплины, структурированное по разделам (темам)**

Курс практических/семинарских занятий

№	Наименование раздела / темы дисциплины	Содержание
<b>1</b>	<b>Строение и реакционная способность органических соединений</b>	
1.1	Методы валентных связей и МО. Теория ароматичности.	Решение заданий по методу валентных связей, концепции резонанса. Определение гибридизации атомных орбиталей. Орбитали в напряженных циклах. Химические связи с дефицитом электронов. Строение ароматических

		соединений. Расчет критериев ароматичности.
1.2	Электронные и пространственные взаимодействия в молекулах. Проявления эффектов в молекулах. Кислотно-основные свойства соединений.	Определение электронных и пространственных взаимодействий в молекулах. Проявление кислотно-основных свойств соединений. Работа с концепцией жестких и мягких кислот и оснований (ЖМКО). Водородная связь и факторы, влияющие на её геометрию и прочность.
<b>2</b>	<b>Механизмы органических реакций</b>	
2.1	Общие понятия о механизме химических реакций. Структура и устойчивость интермедиатов	Типы механизмов реакций. Типы реакций и реагентов. Определение термодинамических и кинетических условий реакций. Понятие о стадии и нахождение лимитирующей скорости реакции. Кинетический и термодинамический контроль реакции. Кинетические методы установления механизмов реакции. Определение порядка и молекулярности реакции. Координата реакции, переходное состояние. Активные частицы в органических реакциях, их строение. Карбанионы. Карбокатионы. Свободные радикалы. Катион- и анион-радикалы. Карбены.
2.2	Свободнорадикальные реакции	Работа с частицами - свободными радикалами. Структура и пространственное строение радикальных интермедиатов. Характеристика механизмов реакций, идущих через радикальные интермедиаты. Рассмотрение свободнорадикальных реакций замещения (галогенирование, окисление, замещение с участием арильных радикалов), свободнорадикальных реакций присоединения, присоединения галогенводородов, галогенметанов и т.д.
2.3	Мономолекулярное и бимолекулярное нуклеофильное замещение и отщепление	Рассмотрение влияния структурных факторов на скорость SN1 реакций. Электронные факторы. Стерические факторы. Влияние растворителя в реакциях мономолекулярного замещения. Взаимодействие карбокатиона с нуклеофилом. Влияние строения субстрата на реакционную способность в реакциях SN2. Стерические факторы. Электронные эффекты заместителей в субстрате. Природа уходящей группы. Роль нуклеофила. Нуклеофильная реакционная способность реагента. Влияние растворителя на скорость SN2 реакций. Реакционная способность амбидентных нуклеофилов. Карбанионный механизм реакций отщепления. Рассмотрение бимолекулярного механизма реакций отщепления. Работа с правилами Зайцева и Гофмана.
2.4	Реакции электрофильного замещения	Рассмотрение механизма реакции электрофильного ароматического замещения. Ориентация в реакциях электрофильного

		замещения.
2.5	Реакции нуклеофильного замещения	Рассмотрение двухстадийного механизма реакций S <sub>N</sub> Ar. Влияние строения реагентов и природы нуклеофила на скорость замещения.
2.6	Реакции нуклеофильного присоединения к кратным связям углерод-кислород и углерод-азот	Рассмотрение механизма присоединения по С=О-связям в различных реакциях. Влияние строения реагентов на скорость реакции. Взаимодействие карбонильных соединений с азотсодержащими нуклеофильными реагентами. Механизм конденсации карбонильных соединений.
2.7	Применение физико-химических методов для идентификации органических соединений и установления механизмов реакций.	Решение задач по масс-спектрометрии, электронной УФ-спектроскопии, колебательной ИК-спектроскопии, спектроскопии ЯМР. Спектрометрическая идентификация органических соединений.

Курс лекционных занятий

№	Наименование раздела / темы дисциплины	Содержание
<b>1</b>	<b>Строение и реакционная способность органических соединений</b>	
1.1	Методы валентных связей и МО. Теория ароматичности.	Современное состояние теории химического строения. Метод валентных связей, концепция резонанса. Метод молекулярных орбиталей. Гибридизация атомных орбиталей. Орбитали в напряженных циклах. Химические связи с дефицитом электронов. Строение ароматических соединений. Критерии ароматичности. Антиароматические, гомоароматические, мезоионные соединения.
1.2	Электронные и пространственные взаимодействия в молекулах. Проявления эффектов в молекулах. Кислотно-основные свойства соединений.	Электронные и пространственные взаимодействия в молекулах. Кислотно-основные свойства соединений. Бренстедовская и льюисовская кислотность и основность органических соединений. Концепция жестких и мягких кислот и оснований (ЖМКО). Водородная связь и факторы, влияющие на её геометрию и прочность.
<b>2</b>	<b>Механизмы органических реакций</b>	
2.1	Общие понятия о механизме химических реакций. Структура и устойчивость интермедиатов	Типы механизмов реакций. Типы реакций и реагентов. Термодинамические условия реакций. Кинетические условия реакций. Кинетика и понятие о стадии, лимитирующая скорость реакции. Кинетический и термодинамический контроль. Кинетические методы установления механизмов реакции. Порядок и молекулярность реакции. Координата реакции, переходное состояние. Активные частицы в органических реакциях, их строение. Карбанионы. Карбокатионы. Свободные радикалы. Катион- и анион-радикалы. Карбены.
2.2	Свободнорадикальные реакции	Генерирование, обнаружение и определение

		<p>свободных радикалов. Устойчивые свободные радикалы. Структура и пространственное строение радикальных интермедиатов. Характеристика механизмов реакций, идущих через радикальные интермедиаты. Свободнорадикальные реакции замещения (галогенирование, окисление, замещение с участием арильных радикалов). Свободнорадикальные реакции присоединения. Присоединение галогенводородов, галогенметанов, других углеродных радикалов.</p>
2.3	Мономолекулярное и бимолекулярное нуклеофильное замещение и отщепление	<p>Общие представления о механизмах реакций нуклеофильного замещения. Стехиометрическое течение реакций нуклеофильного замещения. Влияние структурных факторов на скорость SN1 реакций. Электронные факторы. Стерические факторы. Участие соседних групп. Влияние растворителя в реакциях мономолекулярного замещения. Взаимодействие карбокатиона с нуклеофилом. Влияние строения субстрата на реакционную способность в реакциях SN2. Стерические факторы. Электронные эффекты заместителей в субстрате. Природа уходящей группы. Роль нуклеофила. Нуклеофильная реакционная способность реагента. Влияние растворителя на скорость SN2 реакций. Реакционная способность амбидентных нуклеофилов. Карбанионный механизм реакций отщепления. Различия между карбанионным и синхронным механизмами. Бимолекулярный механизм реакций отщепления. Влияние строения реагентов на скорость бимолекулярного отщепления. Позиционная селективность в реакциях E2. Правила Зайцева и Гофмана. Стереохимия бимолекулярного отщепления.</p>
2.4	Реакции электрофильного замещения	<p>Механизм реакции электрофильного ароматического замещения. Характер электрофильного реагента. Ориентация в реакциях электрофильного замещения. Влияние строения субстрата на скорость и избирательность процесса.</p>
2.5	Реакции нуклеофильного замещения	<p>Мономолекулярное замещение. Двухстадийный механизм реакций S<sub>N</sub>Ar. Влияние строения реагентов и природы нуклеофила на скорость замещения. Нуклеофильное замещение в неактивированных галогенаренах (ариновый механизм).</p>
2.6	Реакции нуклеофильного присоединения к кратным связям углерод-кислород и углерод-азот	<p>Механизм присоединения по C=O-связям. Влияние строения реагентов на скорость реакции. Взаимодействие карбонильных соединений с азотсодержащими</p>

		нуклеофильными реагентами. Роль кислотно-основного катализа в реакциях A(Nu) по кратным связям. Механизм конденсации карбонильных соединений.
2.7	Применение физико-химических методов для идентификации органических соединений и установления механизмов реакций.	Основные и современные спектроскопические методы исследования. Масс-спектрометрия. Электронная УФ-спектроскопия. Колебательная ИК-спектроскопия. Спектроскопия ядерного магнитного резонанса. Спектрометрическая идентификация органических соединений (совместное использование масс-спектрометрии, УФ-, ИК-, ПМР- и ЯМР <sup>13</sup> C-спектроскопии).