

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Сыров Игорь Анатольевич
Должность: Директор
Дата подписания: 21.08.2025 20:51:52
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.01.02 Механизмы перициклических реакций***

часть, формируемая участниками образовательных отношений

Направление

04.04.01
код

Химия
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

Формируемая компетенция (с указанием кода)	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Результаты обучения по дисциплине (модулю)
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 направления в исследованиях механизмов органических реакций, современные методы диагностики механизмов органических реакций и их теоретическое обоснование современных теоретических основ ароматичности
	ПК-1.2. применяет актуальную нормативную документацию в соответствующей области знаний; проводить анализ научных данных, результатов экспериментов и наблюдений	Обучающийся должен: уметь оценивать возможности современных методов теоретического анализа и экспериментальных способов диагностики механизмов органических реакций
	ПК-1.3. проводит анализ и теоретическое обобщение научных данных в соответствии с задачами исследования	Обучающийся должен: владеть навыками использования учебной, научной и справочной литературы в области теоретической органической химии вообще и механизмов органических реакций в частности

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

Цели изучения дисциплины:

1. знание способов поиска научной информации в области современной органической химии и методов ее систематизации; принципов выбора метода синтеза органических соединений, в том числе биологически активных веществ.

2. ведение поиска научной информации в области органической химии, проведение ее систематизации; осуществление поиска научной информации в отечественных и зарубежных источниках в области органической химии.

Основной задачей дисциплины является формирование у студентов знаний в области органической химии на основе современных электронных представлений; о наиболее важных закономерностях, связывающих химическое и пространственное строение и свойства

органических веществ; о механизмах органических реакций, включая синхронные реакции. Курс основан на детальном изучении структурных факторов, возникающих при протекании химических реакций с участием органических соединений.

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

Дисциплина «Механизмы перциклических реакций» 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	
1	Индексы реакционной способности	4	6	0	38
1.1	Граничные орбитали реагирующих систем	1	1	0	8
1.2	Некоторые положения теории функционала плотности	1	1	0	8
1.3	Эффекты заместителей	1	2	0	12
1.4	Ароматичность	1	2	0	10
2	Классификация и методы синхронных реакций	3	4	0	14

2.1	Классификация перициклических реакций	1	1	0	2
2.2	Основы метода МО ЛКМО	1	2	0	8
2.3	Граничные орбитали	1	1	0	4
3	Теория перициклических реакций	5	10	0	56
3.1	Метод граничных орбиталей Фукуи	1	2	0	10
3.2	Сигматропные перегруппировки	1	2	0	10
3.3	Метод корреляционных диаграмм	1	2	0	10
3.4	Метод ароматического и антиароматического переходного состояния Дьюара-Циммермана	1	2	0	12
3.5	Методы Фукуи и Дьюара-Циммермана для несогласованных реакций	1	2	0	14
	Итого	12	20	0	108

4.2. Содержание дисциплины, структурированное по разделам (темам)

Курс практических/семинарских занятий

№	Наименование раздела / темы дисциплины	Содержание
1	Индексы реакционной способности	
1.1	Граничные орбитали реагирующих систем	Расчет орбитального и зарядового контроля. Расчет индексов реакционной способности (электроотрицательность, потенциал ионизации, сродство к электрону, жесткость и мягкость молекулы). Жесткие и мягкие кислоты и основания.
1.2	Некоторые положения теории функционала плотности	Расчет функций Фукуи, локальной жесткости (мягкости). Изображение контурных карт функций Фукуи. Использование функций Фукуи, значений локальной мягкости (жесткости) для определения преимущественного направления протекания реакции.
1.3	Эффекты заместителей	Решение заданий на смещение электронной плотности. Полярность. Поляризация. Сопряженные системы. Влияние растворителя на реакционную способность органических соединений.
1.4	Ароматичность	Определение ароматичности и неароматичности систем по правилу Хюккеля, расчет критериев ароматичности: энергетические, структурные (индекс Берда, НОМА), магнитные (NICS).
2	Классификация и методы синхронных реакций	
2.1	Классификация перициклических реакций	Рассмотрение реакций циклоприсоединения, электроциклических реакций, сигматропных перегруппировок, хелетропных реакций.
2.2	Основы метода МО ЛКМО	Работа с методом МО ЛКМО. Условия эффективного взаимодействия орбиталей (заселенность, энергия, симметрия). Определение и изображение связывающих, разрыхляющих и несвязывающих орбиталей; сигма- и пи-орбиталей.
2.3	Граничные орбитали	Изображение и определение граничных орбиталей

		<p>простейших молекул и сопряженных систем. Изображение и определение граничных орбиталей (ВЗМО, НСМО) воды, аммиака, этилена, пропилена, формальдегида, ацетальдегида, ацетона, ацетилен, пропина, циановодорода, метилцианида. пи-МО линейных полиенов: аллильная система, формилфторид, формамид, бутадиен, акролеин, пентадиенильная система, гексатриен, гептатриенильная система.</p>
3	Теория перциклических реакций	
3.1	Метод граничных орбиталей Фукуи	Работа с методом граничных орбиталей Фукуи на примере реакций циклоприсоединения, электроциклических и хелетропных реакций. 1,3-Диполярное циклоприсоединение. Эндо- и экзопереходные состояния.
3.2	Сигматропные перегруппировки	Задания на перегруппировки Коупа и Кляйзена. Правила Вудворда-Гофмана для перциклических реакций.
3.3	Метод корреляционных диаграмм	Работа с методом корреляционных диаграмм на примере циклоприсоединения (образование циклобутана из этилена, реакция Дильса-Альдера) и электроциклических реакций.
3.4	Метод ароматического и антиароматического переходного состояния Дьюара-Циммермана	Определение ароматичности системы. пи-МО аннуленов (циклических полиенов): циклопропенильная система, циклобутадиен, циклопентадиенильная система, бензол, циклогептатриенильная система. Системы с топологией Хюккеля и Мебиуса. Перциклические реакции с позиции метода Дьюара-Циммермана. Работа с правилом Вудворда-Гофмана.
3.5	Методы Фукуи и Дьюара-Циммермана для несогласованных реакций	Работа с реакциями SN2, SN1, E2, AE и AN с позиции методов Фукуи и Дьюара-Циммермана.

Курс лекционных занятий

№	Наименование раздела / темы дисциплины	Содержание
1	Индексы реакционной способности	
1.1	Граничные орбитали реагирующих систем	Орбитальный и зарядовый контроль. Эффект сольватации. Жесткие и мягкие кислоты и основания. Взаимосвязь электроотрицательность – потенциал ионизации – сродство к электрону – жесткость. Следствия теории ЖМКО.
1.2	Некоторые положения теории функционала плотности	Локальные характеристики реагирующих систем. Функции Фукуи, локальная жесткость (мягкость). Контурные карты функций Фукуи. Конденсированные функции Фукуи. Использование функций Фукуи, значений локальной мягкости (жесткости) для определения преимущественного направления протекания реакции.

1.3	Эффекты заместителей	Пространственные затруднения. Внутримолекулярная водородная связь. Смещение электронной плотности. Полярность. Поляризация. Амбидентность. Сопряженные системы. Альфа-эффект. Влияние растворителя на реакционную способность органических соединений.
1.4	Ароматичность	Правило Хюккеля, критерии ароматичности: энергетические, структурные (индекс Берда, НОМА), магнитные (NICS).
2	Классификация и методы синхронных реакций	
2.1	Классификация перциклических реакций	Реакции циклоприсоединения, электроциклические реакции, сигматропные перегруппировки, хелетропные реакции. Общие признаки перциклических реакций.
2.2	Основы метода МО ЛКМО	Основы теории возмущения молекулярных орбиталей. Атомные и молекулярные орбитали. Метод МО ЛКМО. Условия эффективного взаимодействия орбиталей (заселенность, энергия, симметрия). Связывающие, разрыхляющие и несвязывающие орбитали; сигма- и пи-орбитали.
2.3	Граничные орбитали	Граничные орбитали простейших молекул и сопряженных систем. Граничные орбитали (ВЗМО, НСМО) воды, аммиака, этилена, пропилена, формальдегида, ацетальдегида, ацетона, ацетилен, пропина, циановодорода, метилцианида. пи-МО линейных полиенов: аллильная система, формилфторид, формамид, бутадиен, акролеин, пентадиенильная система, гексатриен, гептатриенильная система.
3	Теория перциклических реакций	
3.1	Метод граничных орбиталей Фукуи	Метод граничных орбиталей Фукуи на примере реакций циклоприсоединения, электроциклических и хелетропных реакций. 1,3-Диполярное циклоприсоединение. Эндо- и экзопереходные состояния.
3.2	Сигматропные перегруппировки	Миграции водорода и алкила с позиции метода ГО; стереохимические особенности этих миграций. Перегруппировки Коупа и Кляйзена. Правила Вудворда-Гофмана для перциклических реакций.
3.3	Метод корреляционных диаграмм	Метод корреляционных диаграмм на примере циклоприсоединения (образование циклобутана из этилена, реакция Дильса-Альдера) и электроциклических реакций.
3.4	Метод ароматического и антиароматического переходного состояния Дьюара-Циммермана	Ароматичность. пи-МО аннуленов (циклических полиенов): циклопропенильная система, циклобутадиен, циклопентадиенильная система, бензол, циклогептатриенильная система. Системы с топологией Хюккеля и Мебиуса. Перциклические реакции с позиции метода Дьюара-Циммермана. Обобщенное

		правило Вудворда-Гофмана.
3.5	Методы Фукуи и Дьюара-Циммермана для несогласованных реакций	Реакции SN2, SN1, E2, AE и AN с позиции методов Фукуи и Дьюара-Циммермана.