

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Сыров Игорь Анатольевич
Должность: Директор
Дата подписания: 21.08.2023 20:29:04
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

Рабочая программа 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.

Разработчик (составитель)

к.х.н., доцент

Колчина Г. Ю.

ученая степень, должность, ФИО

Стерлитамак 2023

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с установленными в образовательной программе индикаторами достижения компетенций	3
2. Цели и место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы	4
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	4
4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий.....	5
4.1. Разделы дисциплины и трудоемкость по видам учебных занятий (в академических часах).....	5
4.2. Содержание дисциплины, структурированное по разделам (темам)	5
5. Учебно-методическое обеспечение для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю).....	9
6. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины (модуля)	9
6.1. Перечень учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)	9
6.2. Перечень электронных библиотечных систем, современных профессиональных баз данных и информационных справочных систем	10
6.3. Перечень лицензионного и свободно распространяемого программного обеспечения, в том числе отечественного производства	10
7. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)	11

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 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
----------------	----------

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	Строение и реакционная способность органических соединений	2	6	0	18
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
2	Механизмы органических реакций	10	14	0	90
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
	Итого	12	20	0	108

4.2. Содержание дисциплины, структурированное по разделам (темам)

Курс практических/семинарских занятий

№	Наименование раздела / темы дисциплины	Содержание
1	Строение и реакционная способность органических соединений	
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.
2	Механизмы органических реакций	
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 _N 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
1	Строение и реакционная способность органических соединений	
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.
2	Механизмы органических реакций	
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_NAr. 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 ¹³ C-спектроскопии).

5. Учебно-методическое обеспечение для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю)

Перечень тем, рекомендуемых для самостоятельного изучения:

1. Строение и устойчивость карбенов, их способы получения и реакции.
2. Влияние структурных факторов на скорость SN1 реакций.
3. Влияние растворителя на скорость SN2 реакций.
4. Бимолекулярный механизм реакций отщепления.
5. Определение наличия интермедиата.
6. Влияние строения субстрата на скорость и избирательность процесса.
7. Влияние строения реагентов и природы нуклеофила на скорость замещения.
8. Механизм конденсации карбонильных соединений.
9. Совместное использование масс-спектрометрии, УФ-, ИК-, ПМР- и ЯМР ¹³C-спектроскопии.
10. Масс-спектрометрия.

Список учебно-методических материалов:

1. Киреев В.В. Учебник для бакалавров высш. проф. образования по направлению подготовки "Химическая технология" (углубленный курс). – М.: Юрайт, 2013. – 602с. (25 экз.)
2. Семчиков Ю.Д. Введение в химию полимеров : учеб. пособие для студ. вузов хим. спец. / Ю. Д. Семчиков, С. Ф. Жильцов, С. Д. Зайцев. - 2-е изд., стер. - СПб. : Лань, 2014. - 222с. (20 экз.)
3. Кленин В.И., Федусенко И.В. Высокомолекулярные соединения: учебник для вузов (специальная литература). – СПб.: Лань, 2013. – 508с. (10 экз.)

6. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины (модуля)

6.1. Перечень учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)

Основная учебная литература:

1. Киреев В.В. Учебник для бакалавров высш. проф. образования по направлению подготовки "Химическая технология" (углубленный курс). – М.: Юрайт, 2013. – 602 с. (25 экз.)
2. Семчиков Ю.Д. Введение в химию полимеров : учеб. пособие для студ. вузов хим. спец. / Ю. Д. Семчиков, С. Ф. Жильцов, С. Д. Зайцев. - 2-е изд., стер. - СПб. : Лань, 2014. - 222 с. (20 экз.)

Дополнительная учебная литература:

1. Кленин В.И., Федусенко И.В. Высокомолекулярные соединения: учебник для вузов (специальная литература). – СПб.: Лань, 2013. – 508с. (10 экз.)
2. Уманский С. Я. Теория элементарных химических реакций : научное издание / С. Я. Уманский. - Долгопрудный : Интеллект, 2009. - 408 с. - ISBN 978-5-91559-014-3. - Текст : электронный. - URL: <https://znanium.com/catalog/product/193564> (дата обращения: 01.06.2021).

6.2. Перечень электронных библиотечных систем, современных профессиональных баз данных и информационных справочных систем

№ п/п	Наименование документа с указанием реквизитов
1	Договор на доступ к ЭБС ZNANIUM.COM между БашГУ в лице директора СФ БашГУ и ООО «Знаниум» № 3/22-эбс от 05.07.2022
2	Договор на доступ к ЭБС «ЭБС ЮРАЙТ» (полная коллекция) между БашГУ в лице директора СФ БашГУ и ООО «Электронное издательство ЮРАЙТ» № 1/22-эбс от 04.03.2022
3	Договор на доступ к ЭБС «Университетская библиотека онлайн» между БашГУ и «Нексмедиа» № 223-950 от 05.09.2022
4	Договор на доступ к ЭБС «Лань» между БашГУ и издательством «Лань» № 223-948 от 05.09.2022
5	Договор на доступ к ЭБС «Лань» между БашГУ и издательством «Лань» № 223-949 от 05.09.2022
6	Соглашение о сотрудничестве между БашГУ и издательством «Лань» № 5 от 05.09.2022
7	ЭБС «ЭБ БашГУ», бессрочный договор между БашГУ и ООО «Открытые библиотечные системы» № 095 от 01.09.2014 г.
8	Договор на БД диссертаций между БашГУ и РГБ № 223-796 от 27.07.2022
9	Договор о подключении к НЭБ и о предоставлении доступа к объектам НЭБ между БашГУ в лице директора СФ БашГУ с ФГБУ «РГБ» № 101/НЭБ/1438-П от 11.06.2019
10	Договор на доступ к ЭБС «ЭБС ЮРАЙТ» (полная коллекция) между УУНиТ в лице директора СФ УУНиТ и ООО «Электронное издательство ЮРАЙТ» № 1/23-эбс от 03.03.2023

Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» (далее - сеть «Интернет»)

№ п/п	Адрес (URL)	Описание страницы
1	www.xumuk.ru	Сайт о химии для химиков
2	www.chemport.ru	Образовательный сайт по химии
3	www.uspkhim.ru/ukh_frm.phtml?jrnid=rc&page=ft	Журнал "Успехи химии"

6.3. Перечень лицензионного и свободно распространяемого программного обеспечения, в том числе отечественного производства

Наименование программного обеспечения
Office Standart 2010 RUS OLP NL Acdmc 200 /Лицензионный договор №04297 от 9.04.2012
Office Standart 2007 Russian OpenLicensePack NoLevel Acdmc 200 / ООО «Общество информационных технологий». Государственный контракт №13 от 06.05.2009
Windows XP Лицензионное соглашение MSDN. Государственный контракт №9 от 18.03.2008 г. ЗАО «СофтЛайн»

7. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)

Тип учебной аудитории	Оснащенность учебной аудитории
Учебная аудитория для проведения занятий лекционного типа, учебная аудитория для проведения занятий семинарского типа, учебная аудитория текущего контроля и промежуточной аттестации, учебная аудитория групповых и индивидуальных консультаций	учебная мебель, доска, мультимедиа-проектор, экран настенный, учебно-наглядные пособия