

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РФ  
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования  
«ДАГЕСТАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»  
*Химический факультет*

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ**  
**ИНДЕКСЫ РЕАКЦИОННОЙ СПОСОБНОСТИ**  
**ОРГАНИЧЕСКИХ МОЛЕКУЛ**

Кафедра физической и органической химии  
химического факультета

Образовательная программа  
**04.04.01 Химия**

Профиль подготовки: **«Органическая химия»**

Уровень высшего образования: **магистратура**

Форма обучения: **Очная**

Статус дисциплины: **вариативная по выбору**

Махачкала, 2016 г.

Рабочая программа дисциплины **“Индексы реакционной способности органических молекул”** составлена в 2016 году в соответствии с требованиями ФГОС ВО по направлению подготовки 04.04.01 Химия (уровень магистратура) от «23» сентября 2015 г. № 1042.

Разработчик: кафедра физической и органической химии, Шабанов О.М., д.х.н., профессор

Рабочая программа дисциплины одобрена:  
на заседании кафедры физической и органической химии  
от «4» 09 2016 г., протокол № 1

Зав. кафедрой И. Абдулагатов проф. Абдулагатов И.М.  
(подпись)

на заседании Методической комиссии химического факультета от  
«23» 09 2016 г., протокол № 1.

Председатель М.А. Бабуев Бабуев М.А.  
(подпись)

Рабочая программа дисциплины согласована с учебно-методическим  
управлением «23» 09 2016 г. А.К.  
(подпись)

Дисциплина “Индексы реакционной способности органических молекул” входит в вариативную часть дисциплин по выбору образовательной программы *магистратуры* 04.04.01 Химия.

Дисциплина реализуется на химическом факультете кафедрой физической и органической химии.

Содержание дисциплины охватывает круг вопросов, связанных с подготовкой магистра химии по профилю органическая химия, свободно владеющего теоретическими и практическими основами органической химии и квантовой химии в частности распределения электронной плотности на атомах и связях органических молекул, позволяющего предсказать реакционную способность и механизмы реакций в решении научно-исследовательских задач.

Дисциплина нацелена на формирование следующих профессиональных компетенций выпускника: ПК-2, ПК-3.

Преподавание дисциплины предусматривает проведение следующих видов учебных занятий: *лекции, лабораторные занятия*.

Рабочая программа дисциплины предусматривает проведение следующих видов контроля успеваемости в форме *отчетов по лабораторным работам, контрольных работ и коллоквиумов, устный опрос, письменный опрос, тестирование* и промежуточный контроль в форме зачета и экзамена.

Объем дисциплины 6 зачетных единиц, в том числе в академических часах по видам учебных занятий:

Семестр	Учебные занятия в том числе						СРС, в том числе экзамен	Форма промежуточной аттестации (зачет, дифференцированный зачет, экзамен)
	Контактная работа обучающихся с преподавателем							
	Все го	из них						
		Лекции	Лабораторные занятия	Практические занятия	КСР	Консульт		
4	144	10	20	-	-	-	78+36	экзамен

## 1. Цели освоения дисциплины

Целью изучения дисциплины “Индексы реакционной способности орга-

нических молекул” является:

- сформировать у студентов навыки квантово-химических расчетов волновых функций молекулярных орбиталей (МО);
- умение рассчитывать электронные плотности атомов и связей и индексы свободной валентности атомов;
- предсказывать роль электронной плотности верхних занятых и нижних свободных МО;
- определять направления реакций при нуклеофильном, электрофильном и радикальном замещении.

## 2. Место дисциплины в структуре ООП магистратуры

Дисциплина “Индексы реакционной способности органических молекул” входит в вариативную часть дисциплин по выбору образовательной программы *магистратуры* 04.04.01 Химия.

Курс “Индексы реакционной способности органических молекул” предусматривает применение обучающимися студентами квантово-химических методов определения электронного строения молекул, распределения электронов по атомам и связям для предсказания и объяснения механизмов реакций для решения научных задач. Курс предполагает успешное освоение предыдущих курсов «Органическая химия», «Квантовая механика и квантовая химия».

## 3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины (перечень планируемых результатов обучения).

Компетенции	Формулировка компетенции из ФГОС ВО	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций)
ПК-2	Владение теорией и навыками практической работы в избранной области химии	Имеет четкое, целостное представление об общих закономерностях смежных с химией естественнонаучных дисциплин и способах их использования при решении профессиональных задач в области химии и материаловедения
ПК-3	Готовность использовать современную аппаратуру при проведении научных исследований	В полном объеме владеет навыками многостадийного синтеза, основными методами диагностики веществ (материалов) и методами обработки результатов эксперимента

## 4. Объем, структура и содержание дисциплины.

4.1. Объем дисциплины составляет 4 зачетных единиц, 144 академических часа.

#### 4.2. Структура дисциплины.

№ п/п	Разделы и темы дисциплины	се-местр	Не-деля семестра	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу студентов и трудоемкость (в часах)				Само-стоя-тель-ная ра-ба.	Формы текущего контроля успеваемости (по неделям семестра) Форма промежуточной аттестации (по семестрам)
				Лек.	Практ. зан.	Лаб.	Контр. и сам. раб.		
<b>Модуль 1. Индексы реакционной способности молекул</b>									
1	Электронная плотность. Порядок связи. Индекс свободной валентности. <i>Итого по модулю 1:</i> 36	2	2	2		4		30	Устный опрос, письменный опрос, тестирование
		36		2		4		30	коллоквиум
<b>Модуль 2. Применение ИРС в статическом методе Коулсона и Лонге-Хиггенса</b>									
1	Реакции электрофильного и нуклеофильного замещения	3	5	2		4			Устный опрос, письменный опрос, тестирование
2	Реакции свободнорадикального замещения  <i>Итого по модулю 2:</i> 36	3	6	2		4			Устный опрос, письменный опрос, тестирование
		36		4		8		24	коллоквиум
<b>Модуль 3. Применение ИРС в динамическом методе Уэланда</b>									
1	Динамическое приближение Вычисление энергий катионной и анионной локализации	3	7	2		4		16	Устный опрос, письменный опрос, тестирование
2	Роль граничных орбиталей при нуклеофильном и электрофильном замещении  <i>Итого по модулю 3:</i> 36	3	8	2		4		14	Устный опрос, письменный опрос, тестирование
		36		4		8		24	коллоквиум
1	Модуль 4. Подготовка к экзамену							36	Экзамен
	<i>Итого по модулю 4:</i> <i>Итого:</i>	36 144		10		- 20		36 78+36	Экзамен

#### 4.3. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам).

##### Модуль 1. Применение ИРС в статическом методе Коулсона и Лонге-Хиггенса

**Тема 1.** Молекулярные орбитали как линейные комбинации атомных орбиталей (МО ЛКАО). Расчет энергий МО аннуленов и полиенов и коэффициентов при атомах в МО.

**Тема 2.** Энергия резонанса. Расчет электронной плотности, порядка связи и индекса свободной валентности.

**Тема 3.** МО и электронные параметры монозамещенных полиенов и аннуленов. Альтернантные и неальтернантные углеводороды.

### Модуль 2. Применение ИРС в динамическом приближении Уэланда.

**Тема 1.** Динамическое приближение Уэланда. Вычисление энергий катионной, анионной и радикальной локализации.

**Тема 2.** Роль граничных орбиталей при нуклеофильном и электрофильном замещении

### Лабораторные работы

Целью лабораторных занятий является:

- освоение методов построения МО ЛКАО линейных и циклических полиенов и их замещенных молекул;
- освоение методов расчета электронной плотности, порядка связи и индекса свободной валентности;
- составление молекулярных диаграмм Страйтвизера с представлением индексов реакционной способности молекул.

№ и названия разделов и тем	Цель и содержание лабораторной работы	Результаты лабораторной работы
Лабораторная работа № 1. Расчет молекулярных орбиталей линейных полиенов и аннуленов		
Модуль 1. Применение ИРС в статическом методе Коулсона и Лонге-Хиггенса Тема 1. Метод молекулярных орбиталей. Полиены. Аннулены	Построение молекулярных орбиталей в приближении ЛКАО Хюккеля линейных полиенов $C_nH_{n+2}$ и аннуленов $C_nH_n$ Расчет электронных параметров атомов и связей	Закономерности в энергиях МО полиенов $C_nH_{n+2}$ и аннуленов $C_nH_n$ и электронных параметров атомов и связей.
Лабораторная работа № 2. Молекулярные диаграммы		
Модуль 2. Применение ИРС в статическом методе Коулсона и Лонге-Хиггенса Тема 1. Реакции электрофильного и нуклеофильного замещения	Построение молекулярных диаграмм с указанием индексов реакционной способности: порядков связей, зарядов и индексов свободной валентности атомов.	Установление направления электрофильного и нуклеофильного замещения
Лабораторная работа № 3. Реакции свободнорадикального замещения		
Модуль 2. Применение ИРС в статическом методе Коулсона и Лонге-Хиггенса Тема 2. Реакции свободно-	Построение МО монозамещенных линейных и циклических полиенов при замещении $-CH=$ на $=O$ , $-N=$ и др. Сравнение энергий незамещенных и	Перераспределение электронов на МО и

радикального замещения МО и электронные параметры монозамещенных	замещенных линейных и циклических полиенов. Альтернативные углеводороды	атомах и изменение электронных спектров при замещении
Лабораторная работа № 4. Динамическое приближение Уэланда. Вычисление энергий катионной и анионной локализации		
Модуль 3. Применение ИРС в динамическом методе Уэланда. Тема 1. Динамическое приближение Уэланда. Вычисление энергий катионной и анионной локализации.	Переходные состояния Уэланда в реакциях электрофильном, нуклеофильном и свободнорадикальном замещениях. Определение энергий катионной, анионной и радикальной локализации. Предсказание направления этих реакций	Определение направления реакций при электрофильном, нуклеофильном и радикальном замещениях в ароматических соединениях.
Лабораторная работа № 5. Роль граничных орбиталей при нуклеофильном и электрофильном замещении		
Модуль 3. Применение ИРС в динамическом методе Уэланда. Тема 2. Роль граничных орбиталей при нуклеофильном и электрофильном замещении	Построение граничных (ВЗ и НС) молекулярных орбиталей линейных полиенов и ароматических соединений. Представление электрофильного и нуклеофильного замещения методом МО. Заселенность электронами МО в нейтральной молекуле, анион - и катионрадикале нафталина.	Предсказание электронных переходов, структуры спектров СТВ ЯМР и ЭПР.

## 5. Образовательные технологии

В курсе по направлению подготовки магистров широко используются в учебном процессе компьютерные программы, различные методики в сочетании с внеаудиторной работой с целью формирования и развития профессиональных навыков обучающихся. В соответствии с требованиями ФГОС предусматривается использование при проведении занятий следующих активных методов обучения:

- самостоятельное изучение теоретического материала с последующим разбором на семинарском занятии;
- подготовка к лабораторным работам;
- оформление результатов лабораторной работы;
- подготовка к промежуточному контролю;
- подготовка к экзамену.

## 6. Учебно - методическое обеспечение самостоятельной работы

## студентов

### 6.1. Виды и порядок выполнения самостоятельной работы

1. Изучение рекомендованной литературы.
2. Подготовка к отчетам по лабораторным работам.
3. Решение задач.
4. Подготовка к коллоквиуму.
5. Поиск в Интернете дополнительного материала.
6. Подготовка к экзамену.

№	Вид самостоятельной работы	Вид контроля	Учебно-методич. обеспечение
1.	Изучение рекомендованной литературы.	Устный опрос по разделам дисциплины.	См. разделы 7.3, 8, 9 данного документа.
2.	Подготовка к отчетам по лабораторным работам	Проверка выполнения расчетов, оформления работы в лабораторном журнале и проработки вопросов к текущей теме по рекомендованной литературе.	См. разделы 7.3, 8, 9 данного документа.
3.	Решение задач	Проверка домашних задач.	См. разделы 7.3, 8, 9 данного документа.
4.	Подготовка к коллоквиуму	Промежуточная аттестация в форме контрольной работы.	См. разделы 7.3, 8, 9 данного документа.
5.	Поиск в Интернете дополнительного материала	Прием реферата и выступление с докладом	См. разделы 6.2, 7.3, 8, 9 данного документа.
6.	Подготовка к экзамену	Устный опрос, либо компьютерное тестирование.	См. разделы 7.3, 8, 9 данного документа.

1. Текущий контроль: подготовка к отчетам по лабораторным работам.
2. Текущий контроль: решение задач.
3. Промежуточная аттестация в форме контрольной работы.

*Текущий контроль* успеваемости осуществляется непрерывно, на протяжении всего курса. Прежде всего, это устный опрос по ходу лабораторных занятий, выполняемый для оперативной активизации внимания студентов и оценки их уровня восприятия. Результаты устного опроса учитываются при выборе индивидуальных задач для решения. Каждую неделю осуществляется проверка выполнения расчетов, оформления работы в лабораторном журнале.

*Промежуточный контроль* проводится в форме контрольной работы, в которой содержатся теоретические вопросы и задачи.

*Итоговый контроль* проводится либо в виде устного экзамена, либо в форме тестирования.

Оценка “отлично” ставится за уверенное владение материалом курса.



Оценка “хорошо” ставится при полном выполнении требований к прохождению курса и умении ориентироваться в изученном материале.

Оценка “удовлетворительно” ставится при достаточном выполнении требований к прохождению курса и владении конкретными знаниями по программе курса.

Оценка “неудовлетворительно” ставится, если требования к прохождению курса не выполнены и студент не может показать владение материалом.

## **6.2. Примерные темы рефератов**

1. Приближенные методы в квантовой химии.
2. Методы МО ЛКАО и расширенный метод Хюккеля (PMX).
3. Закономерности в энергии МО линейных полиенов.
4. Закономерности в энергии МО нейтральных аннуленов и их анион- и катион-радикалах.
5. Правило  $4n+2$  и электронное строение сопряженных циклических соединений. Ароматичность и антиароматичность.
6. Электронные параметры атомов и связей.
7. Энергии делокализации  $\pi$ -электронов.
8. Молекулярные диаграммы индексов реакционной способности молекул.
9. Альтернантные и неальтернантные углеводороды.
10. Статическое приближение - исходной молекулы.
11. Динамическое приближение реагирующей молекулы.
12. Электронные спектры и потенциалы ионизации полиенов.
13. Спектры ЭПР и ЯМР нейтральных молекул аннуленов и полициклических соединений и их катион- и анион- радикалов.
14. Теоремы об альтернантных углеводородах.
15. Роль граничных орбиталей в реакциях радикального замещения.
16. Индексы реакционной способности молекул.
17. Теоремы об альтернантных углеводородах.
18. Направления нуклеофильной атаки.
19. Направления электрофильного замещения.
20. Направления радикального замещения

## **7. Фонд оценочных средств для проведения текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины.**

7.1. Перечень компетенций с указанием этапов их формирования в процессе освоения образовательной программы.

Перечень компетенций с указанием этапов их формирования приведен в описании образовательной программы.

Компетенция	Знания, умения, навыки	Процедура освоения
ПК-2	Знать: - основы квантовой механики, - обобщенные закономерности смежных с химией естественно-научных дисциплин и способах их использования при решении профессиональных задач в органической химии.	Устный опрос, письменный опрос, тестирование
	Уметь: - строить молекулярные молекулы в методах МО ЛКАО и МОХ, - вычислять электронные параметры атомов и связей.	Письменный опрос, коллоквиум
	Владеть: - учебной, научной и справочной литературой в изучаемой области - владением теорией и навыками практической работы в избранной области химии	Круглый стол, деловая игра
ПК-3	Знать: - теоретические основы органической, физической и квантовой химии, - современные квантовохимические методы оценки реакционной способности органических соединений	Устный опрос, письменный опрос, тестирование
	Уметь: - использовать современную аппаратуру при проведении научных исследований; - применять индексы реакционной способности молекул для предсказания и объяснения механизмов реакций.	Письменный опрос, коллоквиум
	Владеть: - в полном объеме методами вычисления индексов реакционной способности сопряженных линейных и циклических соединений.	Круглый стол, деловая игра

7.2. Описание показателей и критериев оценивания компетенций, описание шкал оценивания.

ПК-2 – “Владение теорией и навыками практической работы в избранной области химии”

Уровень	Показатели (что обучающийся должен продемонстриро-	Оценочная шкала		
		Удовлетво-	Хорошо	Отлично

	вать)	рительно		
поро- говый	Знать: -приближенные методы квантовой химии, - решающее значение электронных параметров атомов и связей в установлении направления реакций.	Знать: - общие закономерности смежных с химией естественнонаучных дисциплин	Знать: - современные направления в области органической и квантовой химии органических соединений.	Знать: - современные направления в области органической и квантовой химии, - общие закономерности смежных с химией естественнонаучных дисциплин
	Уметь: - оценивать возможности квантовой химии в оценке реакционной способности органических соединений.	Уметь: - оценивать возможности получения индексов реакционной способности молекул	Уметь: - оценивать возможности современных методов теоретического анализа	Уметь: - оценивать возможности современных теоретических методов анализа реакционной способности молекул и механизмов реакций..
	Владеть: - учебной, научной и справочной литературой в изучаемой области - владением теорией и навыками практической работы в избранной области химии	Владеть: - учебной, научной и справочной литературой в изучаемой области	Владеть: - учебной, научной и справочной литературой в изучаемой области	Владеть: - учебной, научной и справочной литературой в изучаемой области - теорией и навыками практической работы в избранной области химии
базо- вый	Знать: -приближенные методы квантовой химии, - решающее значение электронных параметров атомов и связей в установлении направления реакций.	Знать: - общие закономерности смежных с химией естественнонаучных дисциплин	Знать: - современные направления в области органической и квантовой химии органических соединений.	Знать: - современные направления в области органической и квантовой химии, - общие закономерности смежных с химией естественнонаучных дисциплин
	Уметь: - оценивать возможности квантовой химии в оценке реакционной способности органических соединений.	Уметь: - оценивать возможности получения индексов реакционной способности	Уметь: - оценивать возможности современных методов теоретического анализа	Уметь: - оценивать возможности современных теоретических методов анализа реакционной способности молекул и ме-

		молекул		ханизмов реак- ций..
	Владеть: - учебной, научной и справочной литературой в изучаемой области - владением теорией и навыками практической работы в избранной области химии	Владеть: - учебной, научной и справочной литературой в изучаемой области	Владеть: - учебной, научной и справочной литературой в изучаемой области	Владеть: - учебной, научной и справочной литературой в изучаемой области - теорией и навыками практической работы в избранной области химии
про- двину тый	Знать: -приближенные методы квантовой химии, - решающее значение электронных параметров атомов и связей в установлении направления реакций.	Знать: - общие закономерности смежных с химией естественных дисциплин	Знать: - современные направления в области органической и квантовой химии органических соединений.	Знать: - современные направления в области органической и квантовой химии, - общие закономерности смежных с химией естественных дисциплин
	Уметь: - оценивать возможности квантовой химии в оценке реакционной способности органических соединений.	Уметь: - оценивать возможности получения индексов реакционной способности молекул	Уметь: - оценивать возможности современных методов теоретического анализа	Уметь: - оценивать возможности современных теоретических методов анализа реакционной способности молекул и механизмов реакций..
	Владеть: - учебной, научной и справочной литературой в изучаемой области - владением теорией и навыками практической работы в избранной области химии	Владеть: - учебной, научной и справочной литературой в изучаемой области	Владеть: - учебной, научной и справочной литературой в изучаемой области	Владеть: - учебной, научной и справочной литературой в изучаемой области - теорией и навыками практической работы в избранной области химии

ПК-3 «Готовность использовать современную аппаратуру при проведении научных исследований».

Уро- вень	Показатели (что обучающийся должен продемонстрировать)	Оценочная шкала		
		Удовлетвори- тельно	Хорошо	Отлично

поро- говый	Знать: - теоретические основы органической и физической химии, - современные квантово-химические методы оценки реакционной способности органических соединений	знает: - в значительном объеме основные законы органической и физической химии,	знает: - теоретические основы современной органической, физической и квантовой химии в хорошем объеме	знает: - теоретические основы органической и физической химии, - современные квантовохимические методы оценки реакционной способности молекул
	Уметь: - использовать современную аппаратуру при проведении научных исследований; -проводить качественную и количественную оценку влияния различных факторов на механизмы химических реакций.	Уметь: - использо- вать современную аппаратуру при проведении научных исследований;	Уметь: - использо- вать современные теоретические методы; -проводить качественную оценку влияния различных факторов на механизмы реакций.	Уметь: - использовать современные теоретические методы при проведении научных исследований; -проводить качественную и количественную оценку влияния различных факторов на механизмы реакций
	Владеть: - в полном объеме владеет навыками многостадийного синтеза, основными методами диагностики веществ и методами обработки результатов расчетов и эксперимента	Владеть: - в определенном объеме навыками многостадийного синтеза желанных соединений	Владеть: - навыками многостадийного синтеза с учетом теоретических расчетов	Владеть: - в полном объеме владеет навыками многостадийного синтеза с учетом вычисляемых индексов реакционной способности молекул.
базо- вый	Знать: - теоретические основы органической и физической химии, - современные квантово-химические методы оценки реакционной способности органических соединений	знает: - в значительном объеме основные законы органической и физической химии,	знает: - теоретические основы современной органической, физической и квантовой химии в хорошем объеме	знает: - теоретические основы органической и физической химии, - современные квантовохимические методы оценки реакционной способности молекул
	Уметь:	Уметь:	Уметь:	Уметь:

	<p>- использовать современную аппаратуру при проведении научных исследований;</p> <p>-проводить качественную и количественную оценку влияния различных факторов на механизмы химических реакций.</p>	<p>- использо- вать современную аппаратуру при проведении научных исследований;</p>	<p>- использо- вать современные теоретические методы;</p> <p>-проводить качественную оценку влияния различных факторов на механизмы реакций.</p>	<p>- использовать современные теоретические методы при проведении научных исследований;</p> <p>-проводить качественную и количественную оценку влияния различных факторов на механизмы реакций</p>
	<p>Владеть:</p> <p>- в полном объеме владеет навыками многостадийного синтеза, основными методами диагностики веществ и методами обработки результатов расчетов и эксперимента</p>	<p>Владеть:</p> <p>- в определенном объеме навыками многостадийного синтеза желанных соединений</p>	<p>Владеть:</p> <p>- навыками многостадийного синтеза с учетом теоретических расчетов</p>	<p>Владеть:</p> <p>- в полном объеме владеет навыками многостадийного синтеза с учетом вычисляемых индексов реакционной способности молекул.</p>
продвину- тый	<p>Знать:</p> <p>- теоретические основы органической и физической химии,</p> <p>- современные квантово-химические методы оценки реакционной способности органических соединений</p>	<p>знает:</p> <p>- в значительном объеме основные законы органической и физической химии,</p>	<p>знает:</p> <p>- теоретические основы современной органической, физической и квантовой химии в хорошем объеме</p>	<p>знает:</p> <p>- теоретические основы органической и физической химии,</p> <p>- современные квантовохимические методы оценки реакционной способности молекул</p>
	<p>Уметь:</p> <p>- использовать современную аппаратуру при проведении научных исследований;</p> <p>-проводить качественную и количественную оценку влияния различных факторов на механизмы химических реакций.</p>	<p>Уметь:</p> <p>- использо- вать современную аппаратуру при проведении научных исследований;</p>	<p>Уметь:</p> <p>- использо- вать современные теоретические методы;</p> <p>-проводить качественную оценку влияния различных факторов на механизмы реакций.</p>	<p>Уметь:</p> <p>- использовать современные теоретические методы при проведении научных исследований;</p> <p>-проводить качественную и количественную оценку влияния различных факторов на механизмы реакций</p>
	<p>Владеть:</p> <p>- в полном объеме владеет</p>	<p>Владеть:</p> <p>- в опреде-</p>	<p>Владеть:</p> <p>- навыками</p>	<p>Владеть:</p> <p>- в полном объеме</p>

навыками многостадийного синтеза, основными методами диагностики веществ и методами обработки результатов расчетов и эксперимента	ленном объеме навыками многостадийного синтеза желанных соединений	многостадийного синтеза с учетом теоретических расчетов	владеет навыками многостадийного синтеза с учетом вычисляемых индексов реакционной способности молекул.
---	--	---	---

### 7.3. Типовые контрольные задания

#### Формы контроля и критерии оценок

Формы контроля: текущий контроль (систематический учет знаний и активность студентов на занятиях), промежуточный контроль по модулю (рубежная контрольная работа по пройденному блоку тем) и итоговой контроль (экзамен). Текущий контроль осуществляется в виде устного опроса, тестирования, проведения коллоквиума, обсуждения реферата, проверки домашнего задания.

Оценка текущего контроля включает 70 баллов:

- допуск к выполнению лабораторных работ (10 баллов);
- выполнение и сдача лабораторных работ (20 баллов);
- тестирование (10 баллов);
- выполнение контрольной работы (с включением задач) – 20 баллов.

Промежуточный контроль (в виде контрольной работы или коллоквиума) оценивается в 30 баллов.

Итоговый контроль (100 баллов) проводится в виде устного собеседования или в виде письменного теста, содержащего вопросы по всем разделам курса “Каталитический синтез азотсодержащих соединений”, изучавшимся в процессе семестра. Среднее число баллов по всем модулям, которое дает право получения положительной оценки без итогового контроля знаний – 51 и выше.

#### Типовые тесты

1. Метод молекулярных орбиталей Хюккеля позволяет рассчитывать
  - 1). Энергии молекулярных орбиталей.
  - 2) Электронные плотности
  - 3). Геометрию молекулы.
  - 4) Симметрию молекулы
2. Орбитальные энергии для метиленициклопропена в методе МОХ равны:  $E_1 = \alpha + 2,17\beta$ ;  $E_2 = \alpha + 0,311\beta$ ;  $E_3 = \alpha - \beta$ ;  $E_4 = \alpha - 1,481\beta$ . Вычислите полную  $\pi$ -электронную энергию  $W$ 
  - 1).  $W = 4\alpha + 4,962\beta$ .
  - 2).  $W = 2\alpha + 2,981\beta$ .
  - 3).  $W = 4\alpha - 4,962\beta$ .
  - 4).  $W = 2\alpha - 2,981\beta$
3. Какой нейтральный аннулен ( $C_nH_n$ ) или ион при  $6 < n < 12$  проявляют ароматичность?
  - 1).  $C_7H_7^+$  и  $C_{10}H_{10}$ .
  - 2).  $C_7H_7^-$  и  $C_9H_9$ .
  - 3).  $C_7H_7$  и  $C_{10}H_{10}^-$ .
  - 4).  $C_8H_8$  и  $C_8H_8^+$

4. При раскрытии определителя для линейного полиена в варианте простого метода Хюккеля получаются четыре корня:

$x_1 = -1,618$ ;  $x_2 = -0,618$ ;  $x_3 = 0,618$ ;  $x_4 = 1,618$ . Чему равна полная  $\pi$ -электронная энергия молекулы?

1).  $W = 4\alpha + 4,672\beta$ . 2).  $W = 9,344\beta$ . 3).  $W = 2\alpha + 2,336\beta$ . 4).

$W = 2,336\beta$

5. Для низшей МО бутадиена  $\varphi_1 = 0,372\varphi_1 + 0,602\varphi_2 + 0,602\varphi_3 + 0,372\varphi_4$ .

На основании теорем об АУ напишите, чему равна  $\varphi_4$

1).  $\varphi_4 = 0,372\varphi_1 - 0,602\varphi_2 + 0,602\varphi_3 - 0,372\varphi_4$

2).  $\varphi_4 = 0,372\varphi_1 + 0,602\varphi_2 - 0,602\varphi_3 - 0,372\varphi_4$

3).  $\varphi_4 = 0,372\varphi_1 - 0,602\varphi_2 - 0,602\varphi_3 - 0,372\varphi_4$

4).  $\varphi_4 = 0,372\varphi_1 + 0,602\varphi_2 + 0,602\varphi_3 + 0,372\varphi_4$

6. Коэффициенты  $c_{ij}$  в разложении МО  $\psi_j$  метиленициклопропена в простом методе МОХ представим в виде матрицы:

$$[c_{ij}] = \begin{bmatrix} 0,282 & 0,612 & 0,523 & 0,523 \\ 0,815 & 0,254 & -0,368 & -0,368 \\ 0 & 0 & 0,707 & -0,707 \\ 0,506 & -0,749 & 0,303 & 0,302 \end{bmatrix}$$

Какой атом обладает наибольшим индексом свободной валентности?

1). первый. 2).  $F_1 = F_2 = F_3 = F_4$ . 3). второй. 4). третий

7. Какие аннулены по правилу Хюккеля являются ароматическими?

1)  $C_6H_6$ ,  $C_{10}H_{10}$

2)  $C_3H_3$ ,  $C_4H_4$

3)  $C_5H_5$ ,  $C_7H_7$

4)  $C_8H_8$ ,  $C_9H_9$

8. Укажите направление атаки молекулы метиленициклопропена при нуклеофильном замещении

1) атом №3

2) атом №4

3) атом №1

4) атом №2

9. При превращении бензола в пиридин сопровождается:

1) увеличением  $\pi$ -электронной плотности атомов 1, 3 и 5

2) уменьшением  $\pi$ -электронной плотности атомов 2, 4 и 6

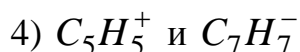
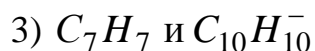
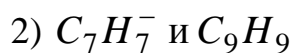
3) увеличением  $\pi$ -электронной плотности атомов 2, 4 и 6

4) увеличением  $\pi$ -электронной плотности атомов 1, 3 и 5.

10. Какой нейтральный аннулен ( $C_nH_n$ ) или ион при  $6 < n < 12$  проявляют ароматичность?

1)  $C_7H_7^+$  и  $C_{10}H_{10}$





11. При раскрытии определителя для линейного полиена в варианте простого метода Хюккеля получаются четыре корня:

$x_1 = -1,618$ ;  $x_2 = -0,618$ ;  $x_3 = 0,618$ ;  $x_4 = 1,618$ . Чему равна полная  $\pi$ -электронная энергия молекулы?

1)  $W = 4\alpha + 4,672\beta$

2)  $W = 9,344\beta$

3)  $W = 2\alpha + 2,336\beta$

12. Как изменяется кулоновский интеграл при атаке электрофильной атаке?

1).  $\delta\alpha_r < 0$ . 2).  $\delta\alpha_r > 0$ . 3).  $\delta\alpha_r = 0$ .

13. Как изменяется кулоновский интеграл при атаке нуклеофильной атаке?

1).  $\delta\alpha_r > 0$ . 2).  $\delta\alpha_r < 0$ . 3).  $\delta\alpha_r = 0$ .

14. Как изменяется кулоновский интеграл при атаке радикальными реагентами?

1).  $\delta\alpha_r = 0$ . 2).  $\delta\alpha_r < 0$ . 3).  $\delta\alpha_r > 0$ .

15. Чему равна энергия катионной локализации бензола при электрофильной атаке?

1).  $2,54\beta$ . 2).  $0,54\beta$  3).  $6\beta$ . 4).  $6\beta$

16. Почему нафталин подвергается галогенированию и нитрованию в  $\alpha$ -положение?

1). Потому что в  $\alpha$ -положении наибольший индекс свободной валентности.

2). Потому, что в  $\alpha$ -положении наибольшая электронная плотность.

3). Потому, что в  $\alpha$ -положении наименьшая электронная плотность.

4). Потому, что нафталин альтернатный углеводород.

17. Вычислите индексы свободной валентности метиленциклопропена (номер 1 у метиленового атома углерода).

1). 1: 0,972; 2: 0,519; 3: 0,465, 4: 0,465.

2). 1: 0,519; 2: 0,465; 3: 0,465, 4: 0,465.

3). 1: 2,0; 2: 0,656, 3: 0,8; 4: 0,8.

4). 1 : 0,8; 2: 0,7; 3: 0,54; 4: 0,95.

18. Определите энергию катионной локализации бензола при электрофильной атаке (напр.,  $NO_2^+$ ,  $Br^+$ ).

1).  $2,54\beta$ . 2).  $8\beta$ . 3).  $4,54\beta$ . 4).  $6,54\beta$

19. Укажите атом предпочтительной атаки электрофильной атаки молекулы метленциклопропена (1-номер у атома O)

1). 4- атом. 2). 3-атом. 3). 2-атом. 4). 1-атом

20. Какой атом бутадиена (AУ) предпочтительный для нуклеофильной атаки.

1). 2-атом. 2). 3-атом. 3). 1-атом. 4). 4-атом

### Контрольные вопросы к экзамену

1. Основные постулаты квантовой механики. Волновая функция. Средние значения наблюдаемых физических величин.
2. Вариационная теорема и вариационный принцип.
3. Метод МО ЛКАО. Простой и расширенный методы Хюккеля.
4. Метод МО. Энергии связывающей и разрыхляющей орбиталей – выразить через  $\varepsilon_{aa}$ ,  $\varepsilon_{ab}$  и  $S_{ab}$
5. Линейные полиены. Закономерности в МО и их энергиях.
6. Метод Хюккеля (МОХ) для молекул с гетероатомом. Сопоставить  $E_j$  для пар этилен-формальдегид, бутадиен-акролеин, метиленициклопропен-циклопропенон.
7. Электронные параметры атомов и связей в методе МОХ.
8. Теоремы об АУ (с иллюстрацией)
9. Поляризуемости атомов и связей. Расчет  $\pi_{1,1}$  в молекуле бутадиена.
10. Индексы реакционной способности молекулы.
11. Статическое приближение исходной молекулы.
12. Направление электрофильной, нуклеофильной и радикальной атак.
13. Роль электронных плотностей на атомах граничных (НСМО и ВСМО) в случае альтернантных МО.
14. Приближение реагирующей молекулы.
15.  $\sigma$  - и  $\pi$ - комплексы переходных состояний.
16. Модель Уэлленда для электрофильного замещения.
17. Модель Уэлленда для нуклеофильного замещения.
18. Модель Уэлленда для реакции радикального замещения
19. Энергии катионной, анионной и радикальной локализации.
20. МО триметиленметана и вычисление индекса свободной валентности

### 8. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины.

#### а) основная литература:

1. Я.Д.Самуилов Е.Н.Черезова Реакционная способность органических соединений. Учебное пособие. Казань, 2003.
2. Г.И. Кобзев. Расчет электронных характеристик молекул полуэмпирическим методом Хюккеля. Оренбург 2004.
3. Шабанов О.М. Математические начала квантовой химии. - Махачкала, Изд-во «Эпоха», 2003.
4. О.М. Шабанов. Симметрия в органической химии. ИПЦ ДГУ.2015.

#### б) Дополнительная

1. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Теория строения молекул.- Изд-во «Феникс». Ростов-на-дону, 1997.

2. Хигаси К., Баба Х., Рембаум А. Квантовая органическая химия. - М: Мир, 1967.
3. Базилевский М. В. Метод молекулярных орбит и реакционная способность органических молекул. - М.: Химия, 1969.
4. Дьюар М. Теория молекулярных орбиталей в органической химии. - М.: Мир, 1972.
5. В. И. Минкин, Б.Я. Симкин, Р.М. Миняев. Квантовая химия органических соединений. Механизмы реакций. – М.: Химия. – 1986 – 246 с.
6. Жидомиров Г.М., Багатурьянц А.А., Абронин И.А. Прикладная квантовая химия. Расчеты реакционной способности и механизмов химических реакций. М.: Химия, 1979. - 296 с.

#### **9. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины.**

1. Электронные образовательные ресурсы образовательного сервера ДГУ [elib.dgu.ru](http://elib.dgu.ru).
2. Зависимость реакционной способности органических соединений ... [www.xumuk.ru/organika/36.html](http://www.xumuk.ru/organika/36.html)
3. Реакционная способность органических соединений - Справочник ... [chem21.info/info/291920/](http://chem21.info/info/291920/)
5. Строение и реакционная способность органических ... [ido.tsu.ru/schools/chem/data/res/org/uchpos/text/1\\_1.html](http://ido.tsu.ru/schools/chem/data/res/org/uchpos/text/1_1.html)
6. Chemical Reactivity Indices as a Tool for Understanding the Support ... [pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/jp903913m](http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/jp903913m)

#### **10. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.**

Методические указания студентам должны раскрывать рекомендуемый режим и характер учебной работы по изучению теоретического курса (или его раздела/части), практических и/или семинарских занятий, лабораторных работ (практикумов), и практическому применению изученного материала, по выполнению заданий для самостоятельной работы, по использованию информационных технологий и т.д. Методические указания должны мотивировать студента к самостоятельной работе и не подменять учебную литературу.

Указывается перечень учебно-методических изданий, рекомендуемых студентам для подготовки к занятиям и выполнения самостоятельной работы, а также методические материалы на бумажных и/или электронных носителях, выпущенные кафедрой своими силами и предоставляемые студентам во время занятий:

- рабочие тетради студентов;
- наглядные пособия;
- гlossарий (словарь терминов по тематике дисциплины);
- тезисы лекций,
- раздаточный материал и др.

Самостоятельная работа студентов, предусмотренная учебным планом в объеме не менее 50-70% общего количества часов, должна соответствовать

более глубокому усвоению изучаемого курса, формировать навыки исследовательской работы и ориентировать студентов на умение применять теоретические знания на практике.

Задания для самостоятельной работы составляются по разделам и темам, по которым не предусмотрены аудиторские занятия, либо требуется дополнительно проработать и проанализировать рассматриваемый преподавателем материал в объеме запланированных часов.

Задания по самостоятельной работе могут быть оформлены в виде таблицы с указанием конкретного вида самостоятельной работы:

- конспектирование первоисточников и другой учебной литературы;
- проработка учебного материала (по конспектам лекций учебной и научной литературе) и подготовка докладов на семинарах и практических занятиях, к участию в тематических дискуссиях и деловых играх;
- работа с нормативными документами и законодательной базой;
- поиск и обзор научных публикаций и электронных источников информации, подготовка заключения по обзору;
- выполнение контрольных работ, творческих (проектных) заданий, курсовых работ (проектов);
- решение задач, упражнений;
- написание рефератов (эссе);
- работа с тестами и вопросами для самопроверки;
- выполнение переводов на иностранные языки/с иностранных языков;
- моделирование и/или анализ конкретных проблемных ситуаций ситуации;
- обработка статистических данных, нормативных материалов;
- анализ статистических и фактических материалов, составление выводов на основе проведенного анализа и т.д.

Самостоятельная работа должна носить систематический характер, быть интересной и привлекательной для студента.

Результаты самостоятельной работы контролируются преподавателем и учитываются при аттестации студента (зачет, экзамен). При этом проводятся: тестирование, экспресс-опрос на семинарских и практических занятиях, заслушивание докладов, проверка письменных работ и т.д.

<b>Разделы и темы для самостоятельного изучения</b>	<b>Виды и содержание самостоятельной работы</b>
<p>Приближенные методы решения уравнения Шредингера. Метод МО ЛКАО. Метод МОХ. Построение молекулярных орбиталей линейных полиенов, аннуленов и их замещенных молекул. Расчеты электронных параметров атомов и связей. Молекулярные диаграм-</p>	<p>Решить задачи по строению МО линейных полиенов, аннуленов и их замещенных молекул. Представление молекулярных диаграмм индексов реакционной способности молекул.</p>

Индексы реакционной способности сопряженных молекул. Приближение изолированной молекулы. Определение направления реакций по индексам реакционной способности. Приближение реагирующей молекулы. Энергии катионной, анионной и радикальной локализации.	Вычисление ИРС молекул. Предсказание направления электрофильной, нуклеофильной и радикальной атаки изолированной молекулы. Определение энергии катионной, анионной и радикальной локализации.
--	---

### **11. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине, включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем.**

При осуществлении образовательного процесса по дисциплине наряду с традиционным чтением лекций используются информационно-коммуникационные технологии, аудитория оснащенная компьютером и видеопроектором, применяются презентации. Используется технология критического мышления, включающая знакомство с работами ведущих российских ученых, составлением конспектов, выполнением проблемного проекта. Представление проекта проходит в виде научной конференции на практическом занятии. Самостоятельная работа студентов заключается в написании рефератов с использованием современных публикаций и подготовке к экзамену.

### **12. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине.**

Лаборатории кафедры оснащены установками для каталитического синтеза органических соединений, имеются установка для синтеза с вакуумной перегонкой, рефрактометр RL-2, термостат, роторный испаритель, лабораторные трансформаторы, бидистилляторы, рН-метр ЛП4-01, микроскопы, хроматограф - Хром -5, сушильные шкафы КС-65, реактивы, 3 компьютера и 2 узла Интернета.

В соответствии с требованиями ГОС кафедра имеет специально оборудованные лаборатории для проведения лабораторных работ и учебные аудитории для проведения лекционных занятий по потокам студентов. Лекционные помещения укомплектованы техническими средствами обучения для проведения интерактивных занятий, в том числе и с доступом в интернет (экран настенный с электроприводом и дистанционным управлением, мультимедиа проектор с ноутбуком, проводной и дистанционный интернет). Обеспечение дисциплины осуществляется кафедрой физической и органической химии химического факультета и включает в себя приборы для физико-химического анализа (спектрофотометрия, кондуктометрия, газо-жидкостная хроматография и пр., вычислительная техника, химическое программное обеспечение (программы 3D Viever, MDL ISIS, 7.0 Origin, Hyper Chem 7.5, Gaussian 98, 03 и 09 и др). Научно-исследовательская работа проводится на кафедре физической и органической химии факультета, ее материальным техническим обеспечением является используемое кафедрой в процессе преподавания учебно-

методическое обеспечение (компьютерный класс, видеопроекторы, учебное и лабораторное оборудование): Атомно-абсорбционный спектрометр, Contr AA-700, AnalytikJena, Германия; Рентгеновский дифрактометр, EmpyreanSeries 2 Фирма Panalytical (Голландия); Дифференциальный сканирующий калориметр, NETZSCH STA 409 PC/PG, Германия; Лабораторная экстракционная система, SFE1000M1-2- FMC-50, Waters, США; Хромато-масс-спектрометр, 7820 Маэстро, США, Россия; Высокоэффективный жидкостной хроматограф, Agilent 1220 Infinity, США. Для проведения качественных и количественных исследований наноструктур кафедры так же пользуется центром коллективного пользования «Аналитическая спектроскопия» ДГУ.