

Минобрнауки России  
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования  
«ДАГЕСТАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»  
Химический факультет

## **РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ**

### **СОХРАНЕНИЕ ОРБИТАЛЬНОЙ СИММЕТРИИ В РЕАКЦИЯХ ЦИКЛООБРАЗОВАНИЯ И ЦИКЛОПРИСОЕДИНЕНИЯ**

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, 2018 г.

Рабочая программа дисциплины “ Сохранение орбитальной симметрии в реакциях циклообразования и циклоприсоединения” составлена в 2018 году в соответствии с требованиями ФГОС ВО по направлению подготовки 04.04.01Химия (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 «29» сентября 2018г., протокол № 10

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

на заседании Методической комиссии Меминского факультета от  
«22» июня 2018г., протокол № 10.

Председатель Гасангаджиева доц. Гасангаджиева У.Г.  
(подпись)

Рабочая программа дисциплины согласована с учебно-методическим

управлением «28» 06 2018г. Апр  
(подпись)

## Аннотация рабочей программы дисциплины

Дисциплина “Сохранение орбитальной симметрии в реакциях циклообразования и циклоприсоединения” входит в вариативную часть дисциплин по выбору образовательной программы *Б1.В.ДВ.4.2* магистратуры по направлению 04.04.01 Химия.

Дисциплина реализуется на химическом факультете кафедрой физической и органической.

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 распределением электронной плотности на атомах и связях органических молекул, установлением симметрии молекулярных орбиталей (МО), позволяющих 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 4 зачетные единицы, в том числе в академических часах по видам учебных занятий:

Семестр	Учебные занятия						СРС, в том числе экзамен	Форма промежуточной аттестации (зачет, дифференцированный зачет, экзамен)
	в том числе							
	Контактная работа обучающихся с преподавателем							
	Все	из них						
	го	Лекции	Лабораторные занятия	Практ. занятия	КСР	Консульт		
4	144	16	28	-	-	-	64+36	экзамен

### 1. Цели освоения дисциплины

Целью изучения дисциплины “Сохранение орбитальной симметрии в реакциях циклообразования и циклоприсоединения” является:

- сформировать у студентов навыки квантово-химических расчетов волновых функций МО;

- устанавливать симметрию МО исходных молекул и продуктов реакций;

- умение рассчитывать электронные плотности атомов и связей и индексы свободной валентности атомов;

- механизмы электроциклических и перициклических реакций при термическом и фотохимическом инициировании;

- механизмы перициклических реакций при термическом и фотохимическом иницировании;

## 2. Место дисциплины в структуре ОПОП магистратуры

Дисциплина “Сохранение орбитальной симметрии в реакциях циклообразования и циклоприсоединения” входит в вариативную часть дисциплин по выбору образовательной программы *Б1.В.ДВ.4.2* магистратуры по направлению 04.04.01 Химия.

Курс “Сохранение орбитальной симметрии в реакциях внутримолекулярной циклизации и циклоприсоединения” предусматривает применение обучающимися студентами квантово-химических методов определения электронного строения молекул, симметрии молекул и МО, распределения электронов по атомам и связям для предсказания и объяснения механизмов реакций в различных условиях. Курс предполагает успешное освоение предыдущих курсов «Органическая химия», «Квантовая механика и квантовая химия», «Теория симметрии и ее применение в химии».

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

Код компетенции из ФГОС ВО	Наименование компетенции из ФГОС ВО	Планируемые результаты обучения
ПК-2	владением теорией и навыками практической работы в избранной области химии	<b>Знает:</b> теоретические основы квантовой химии <b>Умеет:</b> устанавливать симметрию МО исходных молекул и продуктов реакций, рассчитывать электронные плотности атомов и связей и индексы свободной валентности атомов; <b>Владеет:</b> навыки квантово-химических расчетов волновых функций МО; 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	готовностью использовать современную аппаратуру при проведении научных исследований	<b>Знает:</b> теоретические основы органической и физической химии, современные квантово-химические методы оценки реакционной способности органических соединений <b>Умеет:</b> использовать современную аппаратуру при проведении научных исследований, проводить качественную и количественную оценку влияния различных факторов на механизмы химических реакций. <b>Владеет:</b> 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- мест р	Не- деля се- мест ра	Виды учебной работы, включая самостоятель- ную работу студентов и трудоемкость (в часах)				Са мо ст оя те ль на я ра бо та	Формы текущего контроля успевае- мости (по неделям семестра) Форма промежу- точной аттестации (по семестрам)
				Л е к.	Пра кт. зан.	Л аб .за ня ти я			
<b>Модуль 1. Симметрия молекул и молекулярных орбиталей</b>									
1	Симметрия МО ли- нейных полиенов и циклоалкенов и их МО <i>Итого по модулю 1:</i> 36	3	2	4		6		26	Устный опрос, письменный опрос, тестирова- ние коллоквиум
<b>Модуль 2. Сохранение орбитальной симметрии в перициклических реакциях</b>									
2	Сохранение орби- тальной симметрии в реакциях циклопри- соединения $4q$ и $4q+2$	3	5	4		6		10	Устный опрос, письменный опрос, тестирова- ние
3	Разрешенные реакции в зависимости от чис- ла $\pi$ -электронов	3	6	2		4		10	Устный опрос, письменный опрос, тестирова- ние
	<i>Итого по модулю 2:</i> 36	36		6		10		20	коллоквиум
<b>Модуль 3. Сохранение орбитальной симметрии в электроциклических реакциях</b>									
4	Сохранение орбиталь- ной симметрии в электроциклических реакциях $4q$ и $4q+2$	3	7	2		6		8	Устный опрос, письменный опрос, тестиро- вание
5	Разрешенные реакции в зависимости от числа $\pi$ -электронов	3	8	4		6		10	Устный опрос, письменный опрос, тестиро- вание
	<i>Итого по модулю 3:</i>	36		6		12		18	коллоквиум
6	Модуль 4. Подготовка к экзамену							36	Экзамен
	<i>Итого по модулю 4:</i>	36				-		36	
	<i>Итого:</i>	144		16		28		64+36	Экзамен

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

#### 4.3.1. Содержание лекционных занятий по дисциплине.

#### Модуль 1. Симметрия молекул и молекулярных орбиталей

Тема 1. Симметрия МО линейных полиенов и циклоалкенов и их МО

#### Модуль 2. Сохранение орбитальной симметрии в перициклических реакциях

Тема 2. Сохранение орбитальной симметрии в реакциях циклоприсоединения  $4q$  и  $4q+2$

Тема 3. Разрешенные реакции в зависимости от числа  $\pi$ -электронов

#### Модуль 3. Сохранение орбитальной симметрии в электроциклических реакциях

Тема 5. Сохранение орбитальной симметрии в электроциклических реакциях  $4q$  и  $4q+2$

Тема 6. Разрешенные реакции в зависимости от числа  $\pi$ -электронов

#### 4.3.2. Содержание лабораторно-практических занятий по дисциплине.

№ и названия разделов и тем	Цель и содержание лабораторной работы	Часы
Лабораторная работа № 1. Симметрия молекул и молекулярных орбиталей		
Модуль 1. Симметрия МО линейных полиенов и циклоалкенов и их МО Тема 1. Симметрия МО линейных полиенов, циклоалкенов и их МО	Элементы симметрии и операции и линейных полиенов $C_n H_{n+2}$ , циклоалкенов $C_n H_{3n-2}$ и их молекулярных орбиталей	6
Лабораторная работа № 2. Симметрия молекул и их орбиталей		
Модуль 2. Сохранение орбитальной симметрии в перициклических реакциях Тема 1. Сохранение орбитальной симметрии в реакциях циклоприсоединения $4q$	Сохранение орбитальной симметрии в реакциях циклоприсоединения циклоприсоединения с $\pi$ -электронами $4q$	6
Лабораторная работа № 3. Сохранение орбитальной симметрии в реакциях циклоприсоединения $4q+2$		
Модуль 2. Сохранение орбитальной симметрии в перициклических реакциях Тема 2. Сохранение орбитальной симметрии в реакциях циклоприсоединения $4q+2$	Сохранение орбитальной симметрии в реакциях циклоприсоединения с $\pi$ -электронами $4q+2$	6
Лабораторная работа № 4. Сохранение орбитальной симметрии в электроциклических реакциях с $\pi$ -электронами $4q$		
Модуль 3. Сохранение орбитальной симметрии в электроциклических реакциях Тема 1. Сохранение орбитальной симметрии в электроциклических реакциях $4q$	Сохранение орбитальной симметрии в реакциях внутримолекулярной циклизации с $\pi$ -электронами $4q$	4

Лабораторная работа № 5. Сохранение орбитальной симметрии в электроциклических реакциях с $\pi$ -электронами $4q + 2$		
Модуль 3. Сохранение орбитальной симметрии в перициклических и электроциклических реакциях Тема 2. Сохранение орбитальной симметрии в реакциях внутримолекулярной циклизации полиенов $4q + 2$	Сохранение орбитальной симметрии в реакциях внутримолекулярной циклизации с $\pi$ -электронами $4q + 2$	6

### 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

*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 ма-	Прием реферата и выступление с докладом	См. разделы 6.2, 7.3, 8, 9 данного доку-

	териала		мента.
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.

## **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.

Код компетенции из ФГОС ВО	Планируемые результаты обучения	Процедура освоения
ПК-2	Знает: основы квантовой механики, обобщенные закономерности смежных с химией естественнонаучных дисциплин и способах их использования при решении профессиональных задач в органической химии.	Устный опрос, письменный опрос, тестирование
ПК-3	Умеет: строить молекулярные молекулы в методах МО ЛКАО и МОХ, устанавливать симметрию МО исходных веществ, переходного состояния и продуктов реакции. Владеет: учебной, научной и справочной литературой в изучаемой области, владением теорией и навыками практической работы в избранной области химии Знает: теоретические основы органической, физической и квантовой химии, современные квантово-химические методы оценки реакционной способности органических соединений	Письменный опрос, коллоквиум Круглый стол, деловая игра Устный опрос, письменный опрос, тести-

	<p>Умеет: использовать современную теорию сохранения орбитальной симметрии в перициклических реакций при проведении научных исследований; применять индексы реакционной способности молекул для предсказания и объяснения механизмов реакций.</p> <p>Владеет: в полном объеме теорией стереоспецифичности перициклических реакций.</p>	<p>рование Письменный опрос, коллоквиум</p> <p>Круглый стол, деловая игра</p>
--	--	---

## 7.2. Типовые контрольные задания

### 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, нейтральных аннуленов, циклоалкенов и циклоалкадиенов.
4. Симметрия молекул линейных полиенов, нейтральных аннуленов, циклоалкенов и циклоалкадиенов.
5. Симметрия молекулярных орбиталей линейных полиенов, нейтральных аннуленов, циклоалкенов и циклоалкадиенов
6. Реакции Дильса-Алдера при различных количествах  $\pi$ -электронов.
7. Реакции внутримолекулярной циклизации линейных полиенов.
8. Истинные пути циклоприсоединения.
9. Истинные пути внутримолекулярной циклизации полиенов.
10. Механизм реакции циклоприсоединения в основном электронном состоянии.
11. Механизм фотохимических реакций циклоприсоединения при различных числах  $\pi$ -электронов.
12. Механизм внутримолекулярной циклизации в основном электронном состоянии.
11. Механизм внутримолекулярной циклизации фотохимических реакций при различных числах  $\pi$ -электронов.
12. Сохранение орбитальной симметрии в реакциях внутримолекулярной циклизации.
13. Сохранение орбитальной симметрии в реакциях циклоприсоединения.
14. Стереоспецифичность электроциклических реакций, протекающих термически или фотохимически при различных количествах  $\pi$ - электронов.
15. Стереоспецифичность перициклических реакций, протекающих термически фотохимически при различных количествах  $\pi$ - электронов.
16. Роль граничных орбиталей (ВЗМО и НСМО) при протекании химических реакций.
17. Правило непересечения энергетических уровней.
18. Корреляционная диаграмма молекулярных орбиталей исходных молекул и продуктов реакции.
19. Конротаторная и дисротаторная циклизация.
20. Циклизация гексатриена.

### 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 MOX 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  $W$

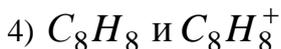
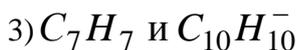
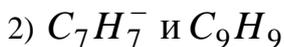
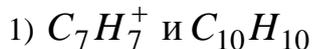
1)  $W = 4\alpha + 4,962\beta$

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?



4. 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  $\varphi_4$

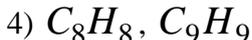
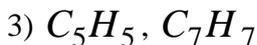
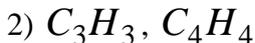
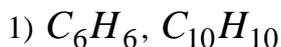
1)  $\varphi_4 = 0,372\varphi_1 - 0,602\varphi_2 + 0,602\varphi_3 - 0,372\varphi_4$

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

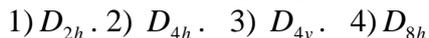
3)  $\varphi_4 = 0,372\varphi_1 - 0,602\varphi_2 - 0,602\varphi_3 - 0,372\varphi_4$

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

5. Какие аннулены по правилу Хюккеля являются ароматическими?



6. кажите точечную группу симметрии нафталина



7. При превращении бензола в пиридин сопровождается:

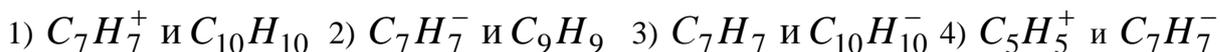
1) увеличением  $\pi$ -электронной плотности атомов 1, 3 и 5

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.

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

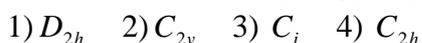


9. При раскрытии определителя для линейного полиена в варианте простого метода Хюккеля получаются четыре корня:  $x_1 = -1,618$ ;  $x_2 = -0,618$ ;  $x_3 = 0,618$ ;  $x_4 = 1,618$ .

Чему равна полная  $\pi$ -электронная энергия молекулы?

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

10. Укажите точечную группу симметрии молекулы этилена.



11. Укажите точечную группу симметрии циклогексана

- 1)  $D_{3d}$  2)  $D_{6d}$  3)  $C_{6v}$  4)  $C_{6v}$
12. 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 альтернантный углеводород.
13. Какой атом бутадиена (АУ) предпочтительный для нуклеофильной атаки.
- 1) 2-атом. 2) 3-атом. 3) 1-атом. 4) 4-атом
14. Укажите точечную группу симметрии циклогексена
- 1)  $C_i$ . 2)  $D_{6d}$ . 3)  $C_{6v}$ . 4)  $C_{6v}$
15. Как можно охарактеризовать реакцию димеризации этилена?
- 1) Как возможную фотохимическую.
  - 2) Как возможную термически.
  - 3) Она разрешена в обоих условиях.
  - 4) Она не разрешена в обоих условиях.
16. Как можно охарактеризовать реакцию циклоприсоединения 1,3-бутадиена и этилена?
- 1) как разрешенную термически.
  - 2) Как разрешенную фотохимически
  - 3) Она разрешена в обоих условиях.
  - 4) Она не разрешена в обоих условиях
17. Как можно охарактеризовать реакцию циклизации бутадиена?
- 1) Как разрешенную термически
  - 2) Как разрешенную при конротаторном вращении.
  - 3) Как разрешенную фотохимически и
  - 4) при конротаторном вращении.
18. Как можно охарактеризовать реакцию циклизации гекстриена?
- 1) Как разрешенную термически
  - 2) при дисротаторном вращении.
  - 3) Как разрешенную при термически
  - 4) При конротаторном вращении.
19. Как можно охарактеризовать реакцию циклизации гекстриена?
- 1) Как разрешенную фотохимически
  - 2) Как разрешенную при конротаторном вращении.
  - 3) Как разрешенную при фотохимически и
  - 4) Как разрешенную при дисротаторном вращении.
20. Какие реакции относятся к перициклическим?
- 1) Реакции циклоприсоединения
  - 2) Реакции внутримолекулярной циклизации
  - 3) Реакции галогенирования.
  - 4) Реакции нитрования.

### 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  $\mathcal{E}_{aa}$ ,  $\mathcal{E}_{ab}$  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. МО триметиленметана и вычисление индекса свободной валентности молекул.
12. Сохранение орбитальной симметрии в реакциях циклоприсоединения.
13. Сохранение орбитальной симметрии в реакциях внутримолекулярной циклизации.
14. Пути реакций внутримолекулярной циклизации.
15. Пути реакций циклоприсоединения.
16. Разрешенные по орбитальной симметрии термических реакций циклоприсоединения в зависимости от общего числа  $\pi$ -электронов.
17. Разрешенные по орбитальной симметрии фотохимических реакций циклоприсоединения в зависимости от общего числа  $\pi$ -электронов.
18. Разрешенные по орбитальной симметрии термических электроциклических реакций в зависимости от общего числа  $\pi$ -электронов.
19. Разрешенные по орбитальной симметрии фотохимических электроциклических реакций в зависимости от общего числа  $\pi$ -электронов.
20. Обобщенные правила отбора по симметрии для согласованных перициклических реакций.

### **7.3. Методические материалы, определяющие процедуру оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций.**

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.

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

#### **а) основная литература**

1. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Теория строения молекул [Текст]. -Изд- во «Феникс». Ростов-на-дону, 1997.
2. О.М.Шабанов. Симметрия в органической химии [Текст]. ИПЦ ДГУ .2015.
3. Черезова, Е.Н. Реакционная способность органических соединений: учебное пособие / Е.Н. Черезова, Я.Д. Самуилов; Министерство образования и науки РФ, Федеральное агентство по образованию, Государственное образовательное учреждение Высшего профессионального образования Казанский государственный технологический университет. - Казань: Издательство КНИТУ, 2010. - 430 с. : ил., табл., схем. - Библиогр. в кн. - ISBN

978-5-7882-0941-8; То же [Электронный ресурс]. –  
URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=259047>

#### **б) Дополнительная**

1. В. И. Минкин, Б.Я. Симкин, Р.М. Миняев. Квантовая химия органических соединений [Текст]. Механизмы реакций. – М.: Химия. – 1986 – 246 с.
2. Жидомиров Г.М., Багатурьянц А.А., Абронин И.А. Прикладная квантовая химия. Расчеты реакционной способности и механизмов химических реакций [Текст]. М.: Химия, 1979. - 296с.
3. Шабанов О.М. Математические начала квантовой химии [Текст]. - Махачкала, Изд-во «Эпоха», 2003.
4. Крашенинин, В.И. Симметрия в химии : учебное пособие / В.И. Крашенинин, Е.Г. Газенаур, Л.В. Кузьмина. - Кемерово : Кемеровский государственный университет, 2013. - 80 с. - ISBN 978-5-8353-1321-1 ; То же [Электронный ресурс]. - URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=232679>

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

1. eLIBRARY.RU [Электронный ресурс]: электронная библиотека / Науч. электрон. б-ка. - Москва, 1999 - . Режим доступа: <http://elibrary.ru/defaultx.asp>– Яз. рус., англ.
2. Зависимость реакционной способности органических соединений ...  
[www.xumuk.ru/organika/36.html](http://www.xumuk.ru/organika/36.html)
3. 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)
4. Moodle [Электронный ресурс]: система виртуального обучения: [база данных] / Даг. гос. ун-т. – Махачкала, г. – Доступ из сети ДГУ или, после регистрации из сети ун-та, из любой точки, имеющей доступ в интернет. – URL: <http://moodle.dgu.ru/>
5. Электронный каталог НБ ДГУ [Электронный ресурс]: база данных содержит сведения о всех видах лит, поступающих в фонд НБ ДГУ/Дагестанский гос. ун-т. – Махачкала, 2010 – Режим доступа: <http://elib.dgu.ru>
4. ЭБС ibooks.ru [Электронный ресурс]: электронно-библиотечная система. – Режим доступа: <https://ibooks.ru/>
5. ЭБС book.ru [Электронный ресурс]: электронно-библиотечная система. – Режим доступа: [www.book.ru/](http://www.book.ru/)
6. ЭБС iprbook.ru [Электронный ресурс]: электронно-библиотечная система. – Режим доступа: <http://www.iprbookshop.ru/31168.html>

#### **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.

Разделы и темы для самостоятельного изучения	Виды и содержание самостоятельной работы
<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 диаграммы индексов реакционной способности молекул.</p>	<p>Решить задачи по строению МО линейных полиенов, аннуленов Учет симметрии молекул при построении МО симметрии в и их замещенных молекул.</p>

Сохранение орбитальной симметрии в реакциях циклоприсоединения и в реакциях внутримолекулярной циклизации полиенов. Установление разрешенных реакций циклоприсоединения и циклизации полиенов в основном и электронно возбужденном состояниях.	Изучение условий и механизмов протекания реакций циклоприсоединения и в реакциях внутримолекулярной циклизации полиенов. Установления протекания этих реакций в основном и электронно возбужденном состояниях.
--	--

### **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. Применяются методы активной и интерактивной форм обучения. 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 лабораторные трансформаторы, бидистилляторы, рН-метр ЛП4-01, микроскопы, хроматограф - Хром -5, сушильные шкафы КС-65, реактивы, 3 компьютера и 2 узла Интернета, кондуктометры и спектрометры ИКС и КРС.

В соответствии с требованиями ФГОС ВО 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; SPECORD 210 PlusBU, AnalytikJena, Германия; Система капиллярного электрофореза, Капель-105М, ЛЮМЕКС, Санкт-Петербург; 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 кафедра так же пользуется центром коллективного пользования «Аналитическая спектроскопия» ДГУ.