

Минобрнауки России
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

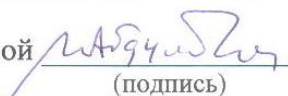
Статус дисциплины: вариативная по выбору

Махачкала, 2018 г.

Рабочая программа дисциплины “ Индексы реакционной способности органических молекул” составлена в 2018 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 «29» мая 2018г., протокол № 10

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

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

Председатель  доц. Гасангаджиева У.Г.
(подпись)

Рабочая программа дисциплины согласована с учебно-методическим

управлением «28» 06 2018г. 
(подпись)

Аннотация рабочей программы дисциплины

Дисциплина “Индексы реакционной способности органических молекул” входит в вариативную часть дисциплин по выбору образовательной программы Б1.В.ДВ.4.1 магистратуры по направлению 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-1; 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 зачетных единиц, в том числе в академических часах по видам учебных занятий:

Семе- стр	Учебные занятия в том числе						СРС, в том числе экзамен	Форма проме- жуточной атте- стации (зачет, дифференциро- ванный зачет, экзамен
	Контактная работа обучающихся с преподавателем							
	Все го	Лек- ции	Лабора- торные занятия	из них Практ. занятия	КСР	Кон- сульт		
4	144	16	28	-	-	-	64+36	экзамен

1. Цели освоения дисциплины

Целью изучения дисциплины “Индексы реакционной способности органических 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 ОПОП магистратуры

Дисциплина “Индексы реакционной способности органических молекул” входит в вариативную часть дисциплин по выбору образовательной программы Б1.В.ДВ.4.2 магистратуры по направлению 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 предска-

ния 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).

Код компетенции из ФГОС ВО	Наименование компетенции из ФГОС ВО	Планируемые результаты обучения
ПК-1	Обладать способностью проводить научные исследования по сформулированной тематике и получать новые научные и прикладные результаты	Знает: экспериментальные и теоретические методы проведения научных исследований по сформулированной тематике. Умеет: применять экспериментальные и теоретические методы проведения научных исследований по сформулированной тематике и получать новые научные и прикладные результаты Владеет: навыками применения экспериментальных и теоретических методов исследования по сформулированной тематике и получения новых научных и прикладных результатов
ПК-2	Владение теорией и навыками практической работы в избранной области химии	Знает: приближенные методы квантовой химии, решающее значение электронных параметров атомов и связей в установлении направления реакций. Умеет: оценивать возможности квантовой химии в оценке реакционной способности органических соединений. Владеет: 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	Знает: теоретические основы органической и физической химии, современные квантово-химические методы оценки реакционной способности органических соединений Умеет: использовать современную аппаратуру при проведении научных исследований, проводить качественную и количественную оценку влияния различных факторов на механизмы химических реакций. Владеет: в полном объеме владеет навыками многостадийного синтеза, основными методами диагностики веществ и методами обработки результатов расчетов и 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 сто яте льн ая раб .	Формы текущего контроля успевае- мости (по неделям семестра) Форма промежу- точной аттестации (по семестрам)
				Л ек .	Прак т. зан.	Ла б. за н.	Кон тр и сам раб.		
Модуль 1. Индексы реакционной способности молекул									
1	Электронная плот- ность. Порядок связи. Индекс свободной ва-	2	2	4		6		30	Устный опрос, письменный опрос, тестирова-

	лентности. <i>Итого по модулю 1:</i> 36	36		4		6		20	ние коллоквиум
Модуль 2. Применение ИРС в статическом методе Коулсона и Лонге-Хиггенса									
1	Реакции электрофильного и нуклеофильного замещения	3	5	4		6			Устный опрос, письменный опрос, тестирование
2	Реакции свободнорадикального замещения	3	6	2		4			Устный опрос, письменный опрос, тестирование
	<i>Итого по модулю 2:</i> 36	36		6		10		20	коллоквиум
Модуль 3. Применение ИРС в динамическом методе Уэланда									
1	Динамическое приближение Вычисление энергий катионной и анионной локализации	3	7	4		6		16	Устный опрос, письменный опрос, тестирование
2	Роль граничных орбиталей при нуклеофильном и электрофильном замещении	3	8	2		6		14	Устный опрос, письменный опрос, тестирование
	<i>Итого по модулю 3:</i>	36		6		12		18	коллоквиум
1	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. 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

4.3.2. Содержание лабораторно-практических занятий по дисциплине.

№ и названия разделов и тем	Содержание лабораторной работы	Часы
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	6
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	6
Лабораторная работа № 3. Реакции свободнорадикального замещения		
Модуль 2. Применение ИРС в статическом методе Коулсона и Лонге-Хиггенса Тема 2. Реакции свободнорадикального замещения МО и электронные параметры монозамещенных	Построение МО монозамещенных линейных и циклических полиенов при замещении – $CH=$ на $=O$, $-N=$ и др. Сравнение энергий незамещенных и замещенных линейных и циклических полиенов. Альтернантные углеводороды	6
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	4
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 катион-радикале нафталина.	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 материала	Прием реферата и выступление с докладом	См. разделы 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.

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	Наименование компетенции из ФГОС ВО	Планируемые результаты обучения	Процедура освоения
ПК-1	Обладать способностью проводить научные исследования по сформулированной тематике и получать новые научные и прикладные результаты	Знает: экспериментальные и теоретические методы проведения научных исследований по сформулированной тематике Умеет: применять экспериментальные и теоретические методы проведения научных исследований по сформулированной тематике и получать новые научные и прикладные результаты Владет: навыками применения экспериментальных и теоретических методов исследования по сформулированной тематике и получения новых научных и прикладных результатов	Устный опрос, письменный опрос, тестирование Устный опрос, письменный опрос, тестирование Устный опрос, письменный опрос, тестирование
ПК-2	Владение теорией и навыками практической работы в избранной области химии	Знает: основы квантовой механики, обобщенные закономерности смежных с химией естественнонаучных дисциплин и способах их использования при решении профессиональных задач в органической химии. Умеет: строить молекулярные молекулы в методах МО ЛКАО и МОХ, вычислять электронные параметры атомов и связей. Владет: учебной, научной и справочной литературой в изучаемой области, владением теорией и навыками практической работы в избранной области химии	Устный опрос, письменный опрос, тестирование Письменный опрос, коллоквиум Круглый стол, деловая игра
ПК-3	Готовность использовать современную ап-	Знает: теоретические основы органической, физической и квантовой	Устный опрос, пись-

	паратуру при проведении научных исследований	химии, современные квантовохимические методы оценки реакционной способности органических соединений	менный опрос, тестирование
		Умеет: использовать современную аппаратуру при проведении научных исследований; применять индексы реакционной способности молекул для предсказания и объяснения механизмов реакций.	Письменный опрос, коллоквиум
		Владеет: в полном объеме методами вычисления индексов реакционной способности сопряженных линейных и циклических соединений.	Круглый стол, деловая игра

7.2. Типовые контрольные задания

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:

$$E_1 = \alpha + 2,17\beta, E_2 = \alpha + 0,31\beta, E_3 = \alpha - \beta, E_4 = \alpha - 1,48\beta. \quad \text{Вычислите}$$

полную π -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 π -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 φ_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). $\varphi_4 = 0,372\varphi_1 + 0,602\varphi_2 + 0,602\varphi_3 + 0,372\varphi_4$

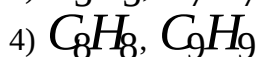
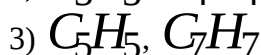
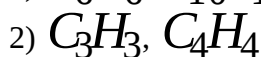
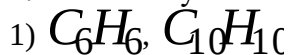
6. Коэффициенты C_{ij} в разложении МО ψ_j метиленициклопропена в простом методе МОХ представим в виде матрицы:

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

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?



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:

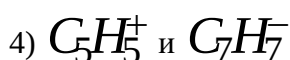
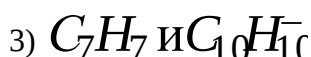
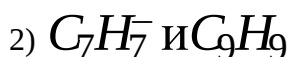
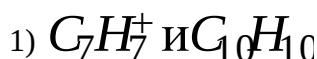
1) увеличением π -электронной плотности атомов 1, 3 и 5

2) уменьшением π -электронной плотности атомов 2, 4 и 6

3) увеличением π -электронной плотности атомов 2, 4 и 6

4) увеличением π -электронной плотности атомов 1, 3 и 5.

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



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 π -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). $\delta\alpha < 0$. 2). $\delta\alpha > 0$. 3). $\delta\alpha = 0$.

13. Как изменяется кулоновский интеграл при атаке нуклеофильной атаке?

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

14. Как изменяется кулоновский интеграл при атаке радикальными реагентами?

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

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

- 1). ~~2,54β~~. 2). ~~0,54β~~ 3). ~~6β~~. 4). ~~6β~~

16. Почему нафталин подвергается галогенированию и нитрованию в α -положение?

- 1). Потому что в α -положении наибольший индекс свободной валентности.
- 2). Потому, что в α -положении наибольшая электронная плотность.
- 3). Потому, что в α -положении наименьшая электронная плотность.
- 4). Потому, что нафталин альтернантный 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). ~~2,54β~~. 2). ~~8β~~. 3). ~~4,54β~~. 4). ~~6,54β~~

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 (АУ) 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 $\mathcal{E}_{aa}, \mathcal{E}_{ab}$ 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, метиленциклопропен-циклопропенон.
7. Электронные параметры атомов и связей в методе МОХ.
8. Теоремы об АУ (с иллюстрацией)
9. Поляризуемости атомов и связей. Расчет π_{11} 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. σ - и π - 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

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 π -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

7.3. 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. Шабанов О.М. Математические начала квантовой химии [Текст]. - Махачкала, Изд-во «Эпоха», 2003.
2. О.М. Шабанов. Симметрия в органической химии [Текст]. ИПЦ ДГУ.2015.
3. В. И. Минкин, Б.Я. Симкин, Р.М. Миняев. Квантовая химия органических соединений. Механизмы реакций [Текст]. – М.: Химия. – 1986 – 246 с.

4. Самуилов Я.Д. Реакционная способность органических соединений [Электронный ресурс]: учебное пособие/ Самуилов Я.Д., Черезова Е.Н.— Электрон. текстовые данные.— Казань: Казанский национальный исследовательский технологический университет, 2010.— 430 с.— Режим доступа: <http://www.iprbookshop.ru/62653.html>.

б) Дополнительная

1. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Теория строения молекул [Текст].- Изд-во «Феникс». Ростов-на-дону, 1997.
2. Жидкомиров Г.М., Багатурьянц А.А., Абронин И.А. Прикладная квантовая химия. Расчеты реакционной способности и механизмов химических реакций [Текст]. М.: Химия, 1979. - 296 с.
3. Гришаева О.В. Основы строения органических соединений [Электронный ресурс]: методические рекомендации для студентов 2-го курса фармацевтического факультета/ Гришаева О.В.— Электрон. текстовые данные.— Кемерово: Кемеровская государственная медицинская академия, 2008.— 72 с.— Режим доступа: <http://www.iprbookshop.ru/6182.html>
4. Ефремов, Ю.С. Квантовая механика: учебное пособие / Ю.С. Ефремов. - Москва; Берлин : Директ-Медиа, 2015. - 457 с. : ил. - Библиогр. в кн. - ISBN 978-5-4475-4072-2; То же [Электронный ресурс]. - URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=273446> (24.10.2018).

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>
2. 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>
3. 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/
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;
- 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
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.	Решить задачи по строению МО линейных полиенов, аннуленов и их замещенных молекул. Представление молекулярных диаграмм индексов реакционной способности молекул.

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 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; 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 Мазстро, США, Россия; Высокоэффективный жидкостной хроматограф, Agilent 1220 Infinity, США. Для проведения качественных и количественных исследований наноструктур кафедра так же пользуется центром коллективного пользования «Аналитическая спектроскопия» ДГУ.