

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное учреждение
высшего профессионального образования
"Казанский (Приволжский) федеральный университет"
Химический институт им. А.М. Бутлерова



УТВЕРЖДАЮ

Проректор по образовательной деятельности КФУ

Проф. Талорский Д.А.



_____ 20__ г.

подписано электронно-цифровой подписью

Программа дисциплины
Механизмы химических реакций Б1.В.ДВ.2

Направление подготовки: 04.04.01 - Химия

Профиль подготовки: Хемоинформатика и молекулярное моделирование

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Автор(ы):

Антипин И.С.

Рецензент(ы):

Антипин И.С.

СОГЛАСОВАНО:

Заведующий(ая) кафедрой: Антипин И. С.

Протокол заседания кафедры No ____ от " ____ " _____ 201__ г

Учебно-методическая комиссия Химического института им. А.М. Бутлерова:

Протокол заседания УМК No ____ от " ____ " _____ 201__ г

Регистрационный No 7101817

Казань
2017

Содержание

1. Цели освоения дисциплины
2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы
3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля
4. Структура и содержание дисциплины/ модуля
5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения
6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов
7. Литература
8. Интернет-ресурсы
9. Материально-техническое обеспечение дисциплины/модуля согласно утвержденному учебному плану

Программу дисциплины разработал(а)(и) ведущий научный сотрудник, д.н. (профессор) Антипин И.С. Отдел органической химии Химический институт им. А.М. Бутлерова, iantipin54@yandex.ru

1. Цели освоения дисциплины

Целями освоения дисциплины "Механизмы химических реакций" является получение магистрантами современных представлений о механизмах реакций, методах их исследования, а также формирование умения делать собственные заключения о механизме изучаемой реакции, уверенно ориентироваться в потоке информации, касающейся динамики химических процессов.

Основой дисциплины "Механизмы химических реакций", состоящей из двух взаимосвязанных частей, является теория переходного состояния, базирующаяся на принципах и постулатах химической кинетики и термодинамики. Первая часть курса направлена на изучение основных подходов и методов установления механизмов органических реакций, включая современные физические методы, но без рассмотрения их теоретических основ, которые излагаются в курсе "Физические методы исследования".

Во второй части курса рассматриваются наиболее важные механизмы органических реакций, природа интермедиатов (карбокатионов, карбанионов, радикалов, карбенов, нитренов), которые образуются в ходе химического взаимодействия, а также важная информация о природе растворителей, влиянии растворителей на скорости и механизмы реакций.

Усвоение теоретических знаний требует посещения лекций и самостоятельной работы с учебником. Отдельные темы теоретического курса прорабатываются магистрантами самостоятельно в соответствии с планом самостоятельной работы. По программе лекционного курса проводятся занятия, на которых решаются задачи по механизмам реакций. Большинство задач дается магистрантам для самостоятельного решения. Для проверки правильности решения приводятся ссылки на оригинальные работы.

2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы высшего профессионального образования

Данная учебная дисциплина включена в раздел "Б1.В.ДВ.2 Дисциплины (модули)" основной образовательной программы 04.04.01 Химия и относится к дисциплинам по выбору. Осваивается на 1 курсе, 2 семестр.

Изучение дисциплины "Механизмы химических реакций" базируется на знании общего курса неорганической, органической и физической химии, квантовой механики и химии программы бакалавриата и специалитета.

Дисциплина рассматривается в тесной взаимосвязи с такими курсами как "Электронная и пространственная структура органических соединений". Дисциплина "Механизмы химических реакций" логически связана с дисциплинами "Основы химии", "Основы квантовой химии", "Современные теории химической связи" и является одной из дисциплин, углубляющих знания студентов, поступающих в магистратуру, в области химии. Данная дисциплина помогает глубже усвоить материал в ходе изучения дисциплин "Хемоинформатика", "Дизайн лекарств", "Метаболизм и токсичность органических веществ".

3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля

В результате освоения дисциплины формируются следующие компетенции:

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ПК-1 (профессиональные компетенции)	Наличие представлений о наиболее актуальных направлениях исследований в современной теоретической и экспериментальной химии

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ПК-2 (профессиональные компетенции)	Знание основных этапов и закономерностей развития химической науки, пониманием объективной необходимости возникновения новых направлений, наличием представлений о системе фундаментальных химических понятий и методологических аспектов химии, форм и методов научного познания, их роли в общеобразовательной профессиональной подготовки химиков
ПК-5 (профессиональные компетенции)	Способность анализировать полученные результаты, делать необходимые выводы и формулировать предложения

В результате освоения дисциплины студент:

1. должен знать:

современные подходы и методы исследования механизмов органических реакций; механизмы важнейших органических реакций

2. должен уметь:

- ориентироваться в потоке информации, касающейся динамики химических процессов;
- интерпретировать экспериментальные данные и делать суждения о механизме реакции, природе переходного комплекса, интермедиатов и т.д.

3. должен владеть:

общими подходами по качественному и количественному описанию и предсказанию реакционной способности органических соединений.

4. должен демонстрировать способность и готовность:

применять теоретические знания при выполнении курсовых и магистерских работ

4. Структура и содержание дисциплины/ модуля

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 зачетных(ые) единиц(ы) 72 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины зачет во 2 семестре.

Суммарно по дисциплине можно получить 100 баллов, из них текущая работа оценивается в 50 баллов, итоговая форма контроля - в 50 баллов. Минимальное количество для допуска к зачету 28 баллов.

86 баллов и более - "отлично" (отл.);

71-85 баллов - "хорошо" (хор.);

55-70 баллов - "удовлетворительно" (удов.);

54 балла и менее - "неудовлетворительно" (неуд.).

4.1 Структура и содержание аудиторной работы по дисциплине/ модулю

Тематический план дисциплины/модуля

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
	Тема 1. Общие						

понятия об органических реакциях и их механизмах.

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
2.	Тема 2. Методы исследования механизма органических реакций	3	2	2	0	0	
3.	Тема 3. Основные типы промежуточных частиц.	3	3	2	0	0	
4.	Тема 4. Реакционная способность : структурные и сольватационные эффекты.	3	4	2	0	0	
5.	Тема 5. Нуклеофильное замещение в алифатическом ряду.	3	5	2	0	0	
6.	Тема 6. Реакции элиминирования.	3	6	2	0	0	
7.	Тема 7. Электрофильное и нуклеофильное замещение в ароматическом ряду.	3	7	2	0	0	
8.	Тема 8. Электрофильное присоединение по кратным связям.	3	8	2	0	0	
9.	Тема 9. Нуклеофильное присоединение к C=O кратной связи.	3	9	2	0	0	Контрольная работа
10.	Тема 10. Круглый стол "Кислоты и основания в органической химии"	3	10	0	2	0	Дискуссия
11.	Тема 11. Круглый стол "Применение корреляционного анализа для установления механизма реакций"	3	11	0	2	0	Дискуссия
12.	Тема 12. Круглый стол "Шкалы сольватирующей способности растворителей"	3	12	0	2	0	Дискуссия

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
13.	Тема 13. Круглый стол "Орбитальные взаимодействия в согласованных и многостадийных органических реакциях"	3	13	0	2	0	Дискуссия
14.	Тема 14. Круглый стол "Металлоорганические реакции"	3	14	0	2	0	Дискуссия
	Тема . Итоговая форма контроля	2		0	0	0	Зачет
	Итого			18	10	0	

4.2 Содержание дисциплины

Тема 1. Общие понятия об органических реакциях и их механизмах.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Поверхность потенциальной энергии реакции, координата реакции и изменение энергии системы вдоль нее. Энергетический профиль одно- и многостадийных реакций. Переходное состояние, интермедиат, промежуточные комплексы. Классификация органических реакций: по типу разрыва и образования связей, по типу механизма. Понятие о механизме реакции. Лимитирующая стадия. Основные постулаты, используемые для изучения механизмов реакций. Принцип структурного соответствия переходного состояния и интермедиата - постулат Хэммонда. Микроскопическая обратимость. Принципы Белла-Эванса-Поляни и Кертиса - Гаммета.

Тема 2. Методы исследования механизма органических реакций

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Основные типы реакций органических соединений: перегруппировки, рекомбинация и диссоциация, замещение, присоединение, циклоприсоединение, перенос электрона. Деление реакций на нуклеофильные, электрофильные и гомолитические. Общая классификация механизмов. Стадии изучения механизма реакций: материальный баланс, кинетика, стереохимические корреляции, изотопные и структурные метки, влияние заместителей, растворителя, катализаторов, поиск нестабильных интермедиатов. Термодинамические параметры реакций. Величина энтропии активации для реакций разных типов. Понятие о кинетическом и термодинамическом контроле реакций.

Тема 3. Основные типы промежуточных частиц.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Катионы, анионы, радикалы, карбены, катион- и анион-радикалы, неустойчивые ненасыщенные частицы. Строение, получение и влияние структуры на их устойчивость. Методы обнаружения промежуточных частиц: применение современных физико-химических методов (ЯМР, ЭПР, ИК, УФ спектроскопия), стереохимические методы, распределение изотопной метки, перекрестные эксперименты, метод ловушек. Неклассические карбокатионы.

Тема 4. Реакционная способность : структурные и сольватационные эффекты.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Основные электронные эффекты: индуктивный, эффект поля, сопряжение, сверхсопряжение. Стерические взаимодействия. Количественная оценка эффектов заместителей и прогнозирование реакционной способности: принцип линейности свободных энергий (Гаммет). Корреляционные уравнения. Множественность констант заместителей. Выделение вкладов различных эффектов, многопараметровые корреляционные уравнения. Общая характеристика природы межмолекулярных взаимодействий в растворах: специфические (водородная связь, донорно-акцепторное взаимодействие) и неспецифические (дисперсионные, индукционные, ориентационные). Определение процесса сольватации по Крестову. Составляющие процесса сольватации: образование полости, межмолекулярное взаимодействие, реорганизация. Качественная модель влияния растворителя на примере реакции нуклеофильного замещения (Ингольд, Хьюз).

Тема 5. Нуклеофильное замещение в алифатическом ряду.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Механизмы SN1 и SN2. Влияние одноименного иона на кинетику SN1 реакций. Стереохимический результат этих реакций. Зависимость соотношения этих механизмов от структуры субстрата, природы нуклеофила и сольватирующей способности растворителя. Влияние электронных и стерических факторов на скорость SN1 и SN2 реакций. Понятия об основности и нуклеофильности. Влияние среды на скорость и реакции нуклеофильного замещения в газовой фазе. Реакционная способность амбидентных нуклеофилов. Правило Корнблума. Влияние растворителя на направление реакции. Анхимерное содействие. Перегруппировки в ходе реакций нуклеофильного замещения. Ионно-парный механизм реакции. Процессы ионизации и диссоциации. Типы ионных пар: контактные, сольватно-разделенные.

Тема 6. Реакции элиминирования.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Механизмы гетеролитического элиминирования: E1, E2 и E1cb (предравновесный и неравновесный). Природа переходных состояний, влияние электронных и стерических факторов в субстрате, уходящей группе и основании на предпочтительность того или иного механизма. Стереохимия E2 отщепления (анти-элиминирование) и причины ее обуславливающие. Случаи син- элиминирования.

Тема 7. Электрофильное и нуклеофильное замещение в ароматическом ряду.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Электрофильное замещение в ароматических системах. Механизм реакции присоединения-замещения: образование пи- и сигма-комплексов. Субстратная и позиционная селективность. Влияние электронных и стерических эффектов заместителей на активность и на направление атаки электрофила. Механизм нуклеофильного замещения в активированных системах. Влияние структуры субстрата на механизм реакции нуклеофильного замещения. Комплексы Мезенгеймера. Реакции в неактивированных ароматических системах. Дегидробензол.

Тема 8. Электрофильное присоединение по кратным связям.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Кинетика и механизм реакции присоединения галогеноводородов и галогенов. Классический и ониевый карбокатионы. Стереохимия присоединения. Влияние заместителей на скорость реакции и природу переходного состояния. Региоселективность реакции (правило Марковникова) и причины ее нарушения.

Тема 9. Нуклеофильное присоединение к C=O кратной связи.

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Механизм присоединения заряженных и незаряженных нуклеофилов, криптооснований (металлорганических соединений). Кислотный и основной катализ присоединения. Влияние электронных эффектов заместителей на скорость реакции

Тема 10. Круглый стол "Кислоты и основания в органической химии"

практическое занятие (2 часа(ов)):

Кислоты и основания: теоретические представления. Принцип Пирсона (ЖМКО). Орбитальный и зарядовый контроль. Обсуждение структурных и сольватационных эффектов, определяющих кислотность и основность органических соединений. Уравнение Брёнстеда. Концентрированные растворы. Кислотные функции H_0 , H_A , H_R .

Тема 11. Круглый стол "Применение корреляционного анализа для установления механизма реакций"

практическое занятие (2 часа(ов)):

Интерпретация величины констант заместителя и растворителя и их связь с механизмом реакции.

Тема 12. Круглый стол "Шкалы сольватирующей способности растворителей"

практическое занятие (2 часа(ов)):

Количественный учет эффектов среды: теоретический, корреляционный и термодинамический. Континуумная модель сольватации. Уравнения Борна, Кирквуда и др. для описания энергии сольватации ионов и диполей. Корреляционный подход: теоретические и эмпирические параметры сольватирующей способности растворителей. Шкалы полярности растворителей: Z (Косовер), E_t (Димрот), ρ (Тафт, Камлет). Характеристика донорно-акцепторной способности среды: DN , AN (Гутман), альфа, бета (Тафт, Камлет), E , B (Коппель, Пальм). Многопараметровые корреляционные уравнения.

Тема 13. Круглый стол "Орбитальные взаимодействия в согласованных и многостадийных органических реакциях"

практическое занятие (2 часа(ов)):

Правила Вудворда-Гоффмана, понятие о корреляционных диаграммах. Электроциклические реакции, сигматропные перегруппировки. Конротаторное и дисротаторное замыкание циклов. Реакции 2+2 и 2+4 циклоприсоединения. Термически и фотохимически разрешенные реакции.

Тема 14. Круглый стол "Металлоорганические реакции"

практическое занятие (2 часа(ов)):

Катализ комплексами переходных металлов. Механизмы современных Pd-катализируемых реакций построения C-C-связей: реакции Хека, Стилле, Сузуки и Соногашира.

4.3 Структура и содержание самостоятельной работы дисциплины (модуля)

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
9.	Тема 9. Нуклеофильное присоединение к C=O кратной связи.	3	9	подготовка к контрольной работе	4	контрольная работа
10.	Тема 10. Круглый стол "Кислоты и основания в органической химии"	3	10		8	дискуссия
11.	Тема 11. Круглый стол "Применение корреляционного анализа для установления механизма реакций"	3	11		8	дискуссия
12.	Тема 12. Круглый стол "Шкалы сольватирующей способности растворителей"	3	12		8	дискуссия

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
13.	Тема 13. Круглый стол "Орбитальные взаимодействия в согласованных и многостадийных органических реакциях"	3	13		8	дискуссия
14.	Тема 14. Круглый стол "Металлоорганические реакции"	3	14		8	дискуссия
	Итого				44	

5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения

Преподавание дисциплины "Механизмы химических реакций" сопровождается:

- демонстрацией слайдов с применением мультимедийной техники,
- проведение круглых столов с обсуждением современного состояния изучения механизмов важнейших химических реакций и современных техник изучения механизмов,
- чтение докладов студентами по современным представлениям о механизме той или иной реакции и их обсуждение.

6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов

Тема 1. Общие понятия об органических реакциях и их механизмах.

Тема 2. Методы исследования механизма органических реакций

Тема 3. Основные типы промежуточных частиц.

Тема 4. Реакционная способность : структурные и сольватационные эффекты.

Тема 5. Нуклеофильное замещение в алифатическом ряду.

Тема 6. Реакции элиминирования.

Тема 7. Электрофильное и нуклеофильное замещение в ароматическом ряду.

Тема 8. Электрофильное присоединение по кратным связям.

Тема 9. Нуклеофильное присоединение к С=О кратной связи.

контрольная работа , примерные вопросы:

Контрольная работа по темам: 1. Основные постулаты химической кинетики 2. Формальная кинетика. Интерпретация кинетических параметров. 3. Основные типы промежуточных частиц (интермедиаты) 4. Методы обнаружения промежуточных частиц 5. Кинетический изотопный эффект 6. Туннельный эффект 7. Основные электронные эффекты и их количественное описание 8. Влияние среды на реакционную способность 9. Эмпирические шкалы сольватирующей способности растворителей 10. Катализ (общий и специфический) 11. Реакции SN1 нуклеофильного замещения у насыщенного атома углерода 12. Реакции SN2 нуклеофильного замещения у насыщенного атома углерода

Тема 10. Круглый стол "Кислоты и основания в органической химии"

дискуссия , примерные вопросы:

Кислоты и основания: теоретические представления. Принцип Пирсона (ЖМКО). Орбитальный и зарядовый контроль. Обсуждение структурных и сольватационных эффектов, определяющих кислотность и основность органических соединений. Уравнение Брэнстеда. Концентрированные растворы. Кислотные функции H_0 , H_A , H_R

Тема 11. Круглый стол "Применение корреляционного анализа для установления механизма реакций"

дискуссия, примерные вопросы:

Интерпретация величины параметра заместителя и его связь с механизмом реакции.

Тема 12. Круглый стол "Шкалы сольватирующей способности растворителей"

дискуссия, примерные вопросы:

Количественный учет эффектов среды: теоретический, корреляционный и термодинамический. Континуумная модель сольватации. Уравнения Борна, Кирквуда и др. для описания энергии сольватации ионов и диполей. Корреляционный подход: теоретические и эмпирические параметры сольватирующей способности растворителей. Шкалы полярности растворителей: Z (Косовер), E_t (Димрот), ρ (Тафт, Камлет). Характеристика донорно-акцепторной способности среды: DN , AN (Гутман), α , β (Тафт, Камлет), E , B (Коппель, Пальм). Многопараметровые корреляционные уравнения.

Тема 13. Круглый стол "Орбитальные взаимодействия в согласованных и многостадийных органических реакциях"

дискуссия, примерные вопросы:

Правила Вудворда-Гофмана, понятие о корреляционных диаграммах. Электроциклические реакции, сигматропные перегруппировки. Конротаторное и дисротаторное замыкание циклов. Реакции $2+2$ и $2+4$ циклоприсоединения. Термически и фотохимически разрешенные реакции.

Тема 14. Круглый стол "Металлоорганические реакции"

дискуссия, примерные вопросы:

Катализ комплексами переходных металлов. Механизмы современных Pd-катализируемых реакций построения C-C-связей: реакции Хека, Стилле, Сузуки и Соногашира.

Тема . Итоговая форма контроля

Примерные вопросы к зачету:

Вопросы к зачету:

1. Основные постулаты химической кинетики
2. Формальная кинетика. Интерпретация кинетических параметров.
3. Основные типы промежуточных частиц (интермедиаты)
4. Методы обнаружения промежуточных частиц
5. Кинетический изотопный эффект
6. Туннельный эффект
7. Основные электронные эффекты и их количественное описание
8. Влияние среды на реакционную способность
9. Эмпирические шкалы сольватирующей способности растворителей
10. Катализ (общий и специфический)
11. Реакции SN_1 нуклеофильного замещения у насыщенного атома углерода
12. Реакции SN_2 нуклеофильного замещения у насыщенного атома углерода
13. Реакции E_1 элиминирования
14. Реакции E_2 и E_1cB элиминирования
15. Нуклеофильное замещение в ароматическом ряду
16. Электрофильное замещение в ароматических системах
17. Механизм реакций этерификации
18. Реакции свободно - радикального замещения
19. Реакции электрофильного присоединения по кратным связям

20. Нуклеофильное присоединение к C=O кратной связи

21. Синхронные процессы. Правило Вудворда - Гофмана.

22. Корреляционный анализ в органической химии

Образцы билетов к зачету:

Билет ♦ 1

1. Кинетический изотопный эффект
2. Реакции SN1 нуклеофильного замещения у насыщенного атома углерода
3. Задача

Билет ♦ 2

1. Корреляционный анализ в органической химии
2. Реакции SN2 нуклеофильного замещения у насыщенного атома углерода
3. Задача

Билет ♦ 3

1. Влияние среды на реакционную способность
2. Реакции E1 элиминирования
3. Задача

Билет ♦ 4

1. Эмпирические шкалы сольватирующей способности растворителей
2. Реакции E2 и E1cb элиминирования
3. Задача

Билет ♦ 5

1. Катализ (общий и специфический)
2. Нуклеофильное замещение в ароматическом ряду
3. Задача

Билет ♦ 6

1. Формальная кинетика. Интерпретация кинетических параметров.
2. Электрофильное замещение в ароматических системах
3. Задача

Билет ♦ 7

1. Основные типы промежуточных частиц (интермедиаты)
2. Реакции электрофильного присоединения по кратным связям
3. Задача

Билет ♦ 8

1. Основные постулаты химической кинетики
2. Нуклеофильное присоединение к C=O кратной связи
3. Задача

Билет ♦ 9

1. Туннельный эффект
2. Механизм реакций этерификации
3. Задача

Билет ♦ 10

1. Методы обнаружения промежуточных частиц
2. Реакции свободно - радикального замещения
3. Задача

Билет ♦ 11

1. Основные электронные эффекты и их количественное описание
2. Синхронные процессы. Правило Вудворда - Гофмана.
3. Задача

7.1. Основная литература:

1. Реутов, О.А. Органическая химия: В 4 ч.: Ч. 1: Учебное пособие для вузов / О.А.Реутов, А.Л.Курц, К.П.Бутин. - М.: Бином, 2014. - 567 с.
2. Реутов, О.А. Органическая химия: В 4 ч.: Ч. 2: Учебное пособие для вузов / О.А.Реутов, А.Л.Курц, К.П.Бутин. - М.: Бином, 2013. - 623 с.
3. Реутов, О.А. Органическая химия: В 4 ч.: Ч. 3: Учебное пособие для вузов / О.А.Реутов, А.Л.Курц, К.П.Бутин. - М.: Бином, 2014. - 543 с.
4. Реутов, О.А. Органическая химия: В 4 ч.: Ч. 4: Учебное пособие для вузов / О.А.Реутов, А.Л.Курц, К.П.Бутин. - М.: Бином, 2014. - 722 с.
5. Щербина, А.Э. Органическая химия. Основной курс.: Учебник [Электронный ресурс]/ А.Э. Щербина, Л.Г. Матусевич; Под ред. А.Э. Щербины. - М.: НИЦ ИНФРА-М; Мн.: Нов. знание, 2013. - 808 с. - URL: <http://znanium.com/bookread.php?book=415732>
6. Шабаров, Ю. С. Органическая химия [Электронный ресурс] / Ю.С. Шабаров. - 5-е изд., стер. - СПб.: Лань, 2011. - 848 с. - URL: http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_cid=25&pl1_id=4037
7. Тоуб, М. Механизмы неорганических реакций. [Электронный ресурс] / М. Тоуб, Д. Берджесс. - Электрон. дан. - М. : Издательство 'Лаборатория знаний', 2014. - 681 с. - Режим доступа: <http://e.lanbook.com/book/66360>

7.2. Дополнительная литература:

1. Чмутова, Г.А. Аспекты связи 'Строение - реакционная способность': учебное пособие / Г. А. Чмутова. - Казань: Казанский (Приволжский) федеральный университет, 2010. - 93 с.
2. Буданов, В. В. Химическая кинетика [Электронный ресурс] / В.В. Буданов, Т. Н. Ломова, В. В. Рыбкин. - СПб.: Лань, 2014. - 283 с. - URL: http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=42196
3. Чоркендорф, И. Современный катализ и химическая кинетика / И. Чоркендорф, Х. Наймантсведрайт; пер. с англ. . - 2-е изд. - Долгопрудный: Интеллект, 2013. - 500 с.
4. Травень, В.Ф. Органическая химия : учебное пособие для вузов : в 3 т. Т. 1. [Электронный ресурс] - Электрон. дан. - М. : Издательство 'Лаборатория знаний', 2015. - 401 с. - Режим доступа: <http://e.lanbook.com/book/84108>
5. Травень, В.Ф. Органическая химия : учебное пособие для вузов : в 3 ч. Т. 2. [Электронный ресурс] - Электрон. дан. - М. : Издательство 'Лаборатория знаний', 2015. - 550 с. - Режим доступа: <http://e.lanbook.com/book/84109>
6. Травень, В.Ф. Органическая химия : учебное пособие для вузов : в 3 т. Т. 3. [Электронный ресурс] - Электрон. дан. - М. : Издательство 'Лаборатория знаний', 2015. - 391 с. - Режим доступа: <http://e.lanbook.com/book/84110>

7.3. Интернет-ресурсы:

- ChemPort - <http://www.chemport.ru/>
Библиотека химического факультета МГУ - <http://www.chem.msu.ru/rus/library/welcome.html#teaching>
Библиотека. Химия. - <http://chemlib.ru/books/>
Википедия - <http://ru.wikipedia.org/wiki>

Химик - <http://www.xumuk.ru/organika>

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины(модуля)

Освоение дисциплины "Механизмы химических реакций" предполагает использование следующего материально-технического обеспечения:

Мультимедийная аудитория, вместимостью более 60 человек. Мультимедийная аудитория состоит из интегрированных инженерных систем с единой системой управления, оснащенная современными средствами воспроизведения и визуализации любой видео и аудио информации, получения и передачи электронных документов. Типовая комплектация мультимедийной аудитории состоит из: мультимедийного проектора, автоматизированного проекционного экрана, акустической системы, а также интерактивной трибуны преподавателя, включающей тач-скрин монитор с диагональю не менее 22 дюймов, персональный компьютер (с техническими характеристиками не ниже Intel Core i3-2100, DDR3 4096Mb, 500Gb), конференц-микрофон, беспроводной микрофон, блок управления оборудованием, интерфейсы подключения: USB, audio, HDMI. Интерактивная трибуна преподавателя является ключевым элементом управления, объединяющим все устройства в единую систему, и служит полноценным рабочим местом преподавателя. Преподаватель имеет возможность легко управлять всей системой, не отходя от трибуны, что позволяет проводить лекции, практические занятия, презентации, вебинары, конференции и другие виды аудиторной нагрузки обучающихся в удобной и доступной для них форме с применением современных интерактивных средств обучения, в том числе с использованием в процессе обучения всех корпоративных ресурсов. Мультимедийная аудитория также оснащена широкополосным доступом в сеть интернет. Компьютерное оборудование имеет соответствующее лицензионное программное обеспечение.

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе "ZNANIUM.COM", доступ к которой предоставлен студентам. ЭБС "ZNANIUM.COM" содержит произведения крупнейших российских учёных, руководителей государственных органов, преподавателей ведущих вузов страны, высококвалифицированных специалистов в различных сферах бизнеса. Фонд библиотеки сформирован с учетом всех изменений образовательных стандартов и включает учебники, учебные пособия, УМК, монографии, авторефераты, диссертации, энциклопедии, словари и справочники, законодательно-нормативные документы, специальные периодические издания и издания, выпускаемые издательствами вузов. В настоящее время ЭБС ZNANIUM.COM соответствует всем требованиям федеральных государственных образовательных стандартов высшего профессионального образования (ФГОС ВПО) нового поколения.

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе Издательства "Лань", доступ к которой предоставлен студентам. ЭБС Издательства "Лань" включает в себя электронные версии книг издательства "Лань" и других ведущих издательств учебной литературы, а также электронные версии периодических изданий по естественным, техническим и гуманитарным наукам. ЭБС Издательства "Лань" обеспечивает доступ к научной, учебной литературе и научным периодическим изданиям по максимальному количеству профильных направлений с соблюдением всех авторских и смежных прав.

Для презентации лекций используется мультимедийное оборудование.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО и учебным планом по направлению 04.04.01 "Химия" и магистерской программе Хемоинформатика и молекулярное моделирование .

Автор(ы):

Антипин И.С. _____

"__" _____ 201__ г.

Рецензент(ы):

Антипин И.С. _____

"__" _____ 201__ г.