

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

Методы количественного изучения взаимосвязи между строением и реакционной способностью Б1.В.ДВ.9

Направление подготовки: 04.03.01 - Химия

Профиль подготовки: Химия высокомолекулярных и элементоорганических соединений

Квалификация выпускника: бакалавр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

**Автор(ы):**

Салин А.В.

**Рецензент(ы):**

Галкин В.И.

#### **СОГЛАСОВАНО:**

Заведующий(ая) кафедрой: Галкин В. И.

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 733217

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) доцент, к.н. Салин А.В. Кафедра высокомолекулярных и элементоорганических соединений Химический институт им. А.М. Бутлерова, Alexey.Salin@kpfu.ru

### 1. Цели освоения дисциплины

Целями освоения дисциплины "Методы установления количественной взаимосвязи между строением и реакционной способностью молекул" являются ознакомление учащихся с теоретическими основами и прикладными аспектами применения различных методов изучения реакционной способности и механизмов реакций органических и элементоорганических соединений, а также установления и анализа количественных взаимосвязей между строением и реакционной способностью молекул.

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

Данная учебная дисциплина включена в раздел " Б1.В.ДВ.9 Дисциплины (модули)" основной образовательной программы 04.03.01 Химия и относится к дисциплинам по выбору. Осваивается на 4 курсе, 8 семестр.

Дисциплина 'Методы установления количественной взаимосвязи между строением и реакционной способностью молекул' относится к вариативному блоку дисциплин Б1 (курс по выбору). В данном курсе представлены как теоретические основы, так и прикладные аспекты применения различных методов изучения реакционной способности и механизмов реакций органических и элементоорганических соединений (химическая термодинамика и химическая кинетика, роль интермедиатов и растворителей и т.д.), а также установления и анализа количественных взаимосвязей между строением и реакционной способностью молекул (корреляционный анализ, эффекты заместителей и их количественные модели). Для освоения дисциплины необходимо знание теоретических основ органической и элементоорганической химии.

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

В результате освоения дисциплины формируются следующие компетенции:

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ОК-6 (общекультурные компетенции)	способность работать в коллективе, толерантно воспринимать социальные, этнические, конфессиональные и культурные различия
ОК-7 (общекультурные компетенции)	способность к самоорганизации и самообразованию
ОПК-1 (профессиональные компетенции)	способность использовать полученные знания теоретических основ фундаментальных разделов химии при решении профессиональных задач
ОПК-3 (профессиональные компетенции)	способность использовать основные законы естественнонаучных дисциплин в профессиональной деятельности
ПК-3 (профессиональные компетенции)	владение системой фундаментальных химических понятий

В результате освоения дисциплины студент:

1. должен знать:

теоретические основы и методологию изучения механизмов органических и элементоорганических реакций, а также реакционной способности участвующих в них реагентов.

2. должен уметь:

на качественном и количественном уровне интерпретировать реакционную способность молекул на основе законов химической термодинамики и химической кинетики.

3. должен владеть:

основными понятиями, а также теорией и практикой применения современных математических методов количественной органической химии, лежащих в основе количественного анализа взаимосвязи между строением и реакционной способностью молекул (корреляционный и регрессионный анализ, эмпирические и теоретические методы количественной оценки электронных и пространственных эффектов заместителей).

#### 4. Структура и содержание дисциплины/ модуля

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетных(ые) единиц(ы) 108 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины зачет в 8 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	
1.	Тема 1. Общие понятия количественной органической химии.	8	1	4	0	0	
2.	Тема 2. История развития количественных подходов к оценке реакционной способности.	8	2	4	0	0	Устный опрос
3.	Тема 3. Механизмы влияния заместителя на реакционный центр: индуктивный, резонансный и стерический эффекты.	8	3	4	0	0	

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
4.	Тема 4. Цель и общая методология изучения механизмов химических реакций.	8	4	4	0	0	Устный опрос
5.	Тема 5. Химическая кинетика и ее связь с механизмом реакций.	8	5	4	0	0	
6.	Тема 6. Основные понятия химической кинетики.	8	6	4	0	0	Устный опрос
7.	Тема 7. Корреляционный анализ в органической и элементоорганической химии.	8	7	4	0	0	
8.	Тема 8. Принцип линейности свободных энергий.	8	8-9	4	0	0	Устный опрос
9.	Тема 9. Количественные методы оценки электронных и пространственных эффектов заместителей.	8	10	4	0	0	
10.	Тема 10. Неэмпирические методы оценки электронных и пространственных эффектов заместителей.	8	11	6	0	0	Контрольная работа
	Тема . Итоговая форма контроля	8		0	0	0	Зачет
	Итого			42	0	0	

## 4.2 Содержание дисциплины

### Тема 1. Общие понятия количественной органической химии.

#### *лекционное занятие (4 часа(ов)):*

Общие понятия количественной органической химии. Химическая термодинамика и химическая кинетика, их основные количественные параметры.

### Тема 2. История развития количественных подходов к оценке реакционной способности.

#### *лекционное занятие (4 часа(ов)):*

Механизмы влияния заместителя на реакционный центр. Индуктивный эффект. Резонансный эффект. Стерический эффект. Эффект сверхсопряжения.

### Тема 3. Механизмы влияния заместителя на реакционный центр: индуктивный, резонансный и стерический эффекты.

**лекционное занятие (4 часа(ов)):**

История развития количественных подходов к оценке реакционной способности: подходы и уравнения Дерика, Бренстеда, Гаммета.

**Тема 4. Цель и общая методология изучения механизмов химических реакций.**

**лекционное занятие (4 часа(ов)):**

Цель и общая методология изучения механизмов химических реакций. Основные понятия: путь реакции, механизм реакции, элементарная стадия, лимитирующая стадия, интермедиаты. Последовательность и методы экспериментального изучения механизмов реакций в цепочке: продукты - интермедиаты - химическая кинетика - влияние заместителя и растворителя - корреляционный анализ.

**Тема 5. Химическая кинетика и ее связь с механизмом реакций.**

**лекционное занятие (4 часа(ов)):**

Химическая кинетика и ее связь с механизмом реакций. Цели и задачи химической кинетики. Химическая кинетика - один из наиболее эффективных методов изучения реакционной способности и механизмов реакций.

**Тема 6. Основные понятия химической кинетики.**

**лекционное занятие (4 часа(ов)):**

Основные понятия химической кинетики, кинетические теории. Порядок и молекулярность реакции, константа скорости. Экспериментальные методы кинетических исследований. Связь кинетических параметров с механизмом реакции. Активационные параметры и их роль в анализе механизма реакции. Принцип Бэлла-Эванса-Поляни. Постулат Хэммонда. Изокинетическая зависимость, критерий Лефлера.

**Тема 7. Корреляционный анализ в органической и элементоорганической химии.**

**лекционное занятие (4 часа(ов)):**

Корреляционный анализ в органической и элементоорганической химии. Основные понятия корреляционного анализа: заместитель и реакционный центр, реакционная серия. Механизмы передачи электронного и пространственного влияния заместителей на реакционный центр: индуктивный, резонансный и стерический эффекты.

**Тема 8. Принцип линейности свободных энергий.**

**лекционное занятие (4 часа(ов)):**

Принцип линейности свободных энергий. Количественная оценка эффектов заместителей. Уравнение Гаммета. Уравнение Тафта. Константа заместителя и константа реакции, их связь с механизмом реакции. Множественность шкал количественной оценки различных эффектов заместителей. Их недостатки и преимущества. Одно-, двух- и многопараметровые корреляционные зависимости. Коэффициент корреляции и другие статистические параметры, характеризующие их качество. Необходимые требования для обеспечения корректного использования аппарата корреляционного анализа. Методы математической статистики в построении и анализе корреляционных уравнений. Физический смысл корреляционных уравнений, математические и методологические проблемы корреляционного анализа. Другие статистические методы изучения и анализа реакционной способности. Система C>8AЯ.

**Тема 9. Количественные методы оценки электронных и пространственных эффектов заместителей.**

**лекционное занятие (4 часа(ов)):**

Количественные методы оценки электронных и пространственных эффектов заместителей. Эмпирические методы на основе экспериментальных "стандартных" реакционных серий. Недостатки эмпирических методов.

**Тема 10. Неэмпирические методы оценки электронных и пространственных эффектов заместителей.**

**лекционное занятие (6 часа(ов)):**

Неэмпирические методы: топологические, квантовохимические. Их достоинства и недостатки. Моделирование эффектов заместителей - важнейшая современная тенденция в развитии корреляционного анализа. Модели индуктивного и стерического эффектов, их применение в корреляционном анализе и возможности при изучении механизмов реакций и тонких аспектов реакционной способности молекул (динамической стереохимии, структуры активированного комплекса и т.д.).

#### 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
2.	Тема 2. История развития количественных подходов к оценке реакционной способности.	8	2	подготовка к устному опросу	12	устный опрос
4.	Тема 4. Цель и общая методология изучения механизмов химических реакций.	8	4	подготовка к устному опросу	12	устный опрос
6.	Тема 6. Основные понятия химической кинетики.	8	6	подготовка к устному опросу	12	устный опрос
8.	Тема 8. Принцип линейности свободных энергий.	8	8-9	подготовка к устному опросу	12	устный опрос
10.	Тема 10. Неэмпирические методы оценки электронных и пространственных эффектов заместителей.	8	11	подготовка к контрольной работе	18	контрольная работа
	Итого				66	

#### 5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения

Дисциплина 'Методы установления количественной взаимосвязи между строением и реакционной способностью молекул' преподается в форме лекционных занятий и самостоятельной работы студентов. Лекционные занятия по указанной дисциплине сопровождаются компьютерными презентациями. На лекционных занятиях предусмотрено использование соответствующих компьютерных программ для демонстрации алгоритма применения одно- и многопараметрового корреляционного и регрессионного анализа в процессе обработки экспериментальных данных, для расчета геометрических параметров молекулы. Общий объем занятий в интерактивной форме составляет 14 часов.

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

##### Тема 1. Общие понятия количественной органической химии.

## **Тема 2. История развития количественных подходов к оценке реакционной способности.**

устный опрос , примерные вопросы:

Контроль усвоения лекционного материала в форме обсуждения вопросов: понятие заместителя и реакционного центра в количественной органической химии, подходы и уравнения Дерика, Бренстеда, Гаммета к оценке реакционной способности

**Тема 3. Механизмы влияния заместителя на реакционный центр: индуктивный, резонансный и стерический эффекты.**

**Тема 4. Цель и общая методология изучения механизмов химических реакций.**

устный опрос , примерные вопросы:

Контроль усвоения лекционного материала в форме обсуждения вопросов: последовательность и методы экспериментального изучения механизмов реакций в цепочке "продукты - интермедиаты - химическая кинетика - влияние заместителя и растворителя - корреляционный анализ"

**Тема 5. Химическая кинетика и ее связь с механизмом реакций.**

**Тема 6. Основные понятия химической кинетики.**

устный опрос , примерные вопросы:

Контроль усвоения лекционного материала в форме обсуждения вопросов: 1. Путь реакции, механизм реакции, элементарная стадия, лимитирующая стадия, интермедиаты 2. Связь кинетических параметров с механизмом реакции. Активационные параметры и их роль в анализе механизма реакции. 3. Принцип Бэлла-Эванса-Поляни. 4. Постулат Хэммонда.

**Тема 7. Корреляционный анализ в органической и элементоорганической химии.**

**Тема 8. Принцип линейности свободных энергий.**

устный опрос , примерные вопросы:

Контроль усвоения лекционного материала в форме обсуждения вопросов: 1. Исокинетическая зависимость, критерий Лефлера. 2. Количественная оценка эффектов заместителей. Уравнение Гаммета. Уравнение Тафта. 3. Физический смысл корреляционных уравнений, математические и методологические проблемы корреляционного анализа.

**Тема 9. Количественные методы оценки электронных и пространственных эффектов заместителей.**

**Тема 10. Неэмпирические методы оценки электронных и пространственных эффектов заместителей.**

контрольная работа , примерные вопросы:

Вопросы к контрольной работе: 1. Модели индуктивного и стерического эффектов, их применение в корреляционном анализе и возможности при изучении механизмов реакций и тонких аспектов реакционной способности молекул 2. Эмпирические и неэмпирические методы оценки электронных и пространственных эффектов заместителей.

**Тема . Итоговая форма контроля**

Примерные вопросы к зачету:

Вопросы для самостоятельной работы

1. Общие понятия количественной органической химии. Химическая термодинамика и химическая кинетика, их основные количественные параметры. Механизмы влияния заместителя на реакционный центр: индуктивный, резонансный и стерический эффекты  
2. Цель и общая методология изучения механизмов химических реакций. Основные понятия: путь реакции, механизм реакции, элементарная стадия, лимитирующая стадия, интермедиаты. Последовательность и методы экспериментального изучения механизмов реакций в цепочке: продукты - интермедиаты - химическая кинетика - влияние заместителя и растворителя - корреляционный анализ.

3. Химическая кинетика и ее связь с механизмом реакции. Цели и задачи химической кинетики. Химическая кинетика - один из наиболее эффективных методов изучения реакционной способности и механизмов реакций. Основные понятия химической кинетики, кинетические теории. Порядок и молекулярность реакции, константа скорости.
4. Экспериментальные методы кинетических исследований. Связь кинетических параметров с механизмом реакции. Активационные параметры и их роль в анализе механизма реакции.
5. Корреляционный анализ в органической и элементоорганической химии. Основные понятия корреляционного анализа: заместитель и реакционный центр, реакционная серия. Механизмы передачи электронного и пространственного влияния заместителей на реакционный центр: индуктивный резонансный и стерический эффекты. Количественная оценка эффектов заместителей. Уравнение Гаммета. Уравнение Тафта. Константа заместителя и константа реакции, их связь с механизмом реакции.
6. Количественные методы оценки электронных и пространственных эффектов заместителей. Эмпирические методы на основе экспериментальных "стандартных" реакционных серий. Недостатки эмпирических методов. Теоретическое моделирование эффектов заместителей -важнейшая современная тенденция в развитии корреляционного анализа.

#### Вопросы к зачету

1. Химическая термодинамика и химическая кинетика, их основные количественные параметры.
2. Модель фронтального стерического эффекта.
3. Механизмы влияния заместителя на реакционный центр: индуктивный, резонансный и стерический эффекты.
4. Цели и задачи химической кинетики. Основные понятия: порядок реакции и ее молекулярность.
5. История развития количественных подходов к оценке реакционной способности: подходы и уравнения Дерика, Бренстеда, Гаммета.
6. Экспериментальные методы кинетических исследований.
7. Цель и общая методология изучения механизмов химических реакций.
8. Основные понятия химической кинетики: путь реакции, механизм реакции, элементарная стадия, лимитирующая стадия, интермедиаты.
9. Основные понятия корреляционного анализа: заместитель и реакционный центр, реакционная серия. Уравнение Гаммета. Уравнение Тафта.
10. Активационные параметры и их роль в анализе механизма реакции. Принцип Бэлла-Эванса-Поляни. Постулат Хэммонда. Изокинетическая зависимость, критерий Лефлера.
11. Количественные методы оценки электронных и пространственных эффектов заместителей.

#### 7.1. Основная литература:

1. Семчиков, Ю.Д. Введение в химию полимеров: учебное пособие для студентов высших учебных заведений, обучающихся по направлению ВПО 020 100 'Химия' и специальности 020201 'Фундаментальная и прикладная химия' / Ю.Д. Семчиков, С.Ф. Жильцов, С.Д. Зайцев. Санкт-Петербург [и др.]: Лань, 2012. ?222 с.
2. Семчиков Ю. Д. Введение в химию полимеров [Электронный ресурс] : учебное пособие / Семчиков Ю. Д., Жильцов С. Ф., Зайцев С. Д. ? Электрон. дан. ? СПб. : Лань, 2014. ? 223 с. ? Режим доступа: [http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1\\_id=4036](http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=4036) ? Загл. с экрана.
3. Лебухов В. И. Физико-химические методы исследования [Электронный ресурс] : учебник / Лебухов В. И., Окара А. И., Павлюченкова Л. П. ? Электрон. дан. ? СПб. : Лань, 2012. ? 480 с. ? Режим доступа: [http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1\\_id=4543](http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=4543) ? Загл. с экрана.

4. Еремин, В.В. Основы общей и физической химии: учебное пособие для студентов высших учебных заведений, изучающих дисциплину 'Химия', по направлению подготовки ВПО 011200 / В. В. Еремин, А. Я. Борщевский. ?Долгопрудный: Интеллект, 2012. ?847 с.:

5. Буданов В.В., Ломова Т.Н. Химическая кинетика: учебное пособие. [Электронный ресурс]. - Санкт-Петербург: Лань, 2014. - 288 с.

Режим доступа: [http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1\\_cid=25&pl1\\_id=42196](http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_cid=25&pl1_id=42196)

6. Сироткин О. С. Эволюция теории химического строения вещества А.М. Бутлерова в унитарную теорию строен. химич. соед. (осн. един. химии): Монография [Электронный ресурс] / О.С. Сироткин. - М.: НИЦ ИНФРА-М, 2013 - 247с.

Режим доступа: <http://znanium.com/bookread.php?book=420415>

## 7.2. Дополнительная литература:

1. Кулезнев В.Н., Шершнева В.А. Химия и физика полимеров. - 2-е изд., испр.- СПб.:Лань, 2014. - 368 с.[http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1\\_id=51931](http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=51931)

2. Эльшенбройх К. Металлоорганическая химия [Электронный ресурс] : . ? Электрон. дан. ? М. : 'Лаборатория знаний' (ранее 'БИНОМ. Лаборатория знаний'), 2014. ? 745 с. ? Режим доступа: [http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1\\_id=50536](http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=50536) ? Загл. с экрана.

3. Семчиков, Ю.Д. Высокомолекулярные соединения: учеб. для студентов вузов, обучающихся по спец. 011000 'Химия' и направлению 510500 'Химия' / Ю.Д. Семчиков. ?3-е изд., стер..?Москва: Академия, 2006. ?366, [1] с

## 7.3. Интернет-ресурсы:

видео-лекции по реакционной способности органических соединений - <http://www.academicearth.org>

именные реакции в органической химии - <http://www.organic-chemistry.org/namereactions/>

новые реакции в органической химии - <http://newreactions.wordpress.com>

сайт лаборатории изучения механизмов реакций - <http://limor1.nioch.nsc.ru>

форум по обсуждению механизмов химических реакций -

<http://www.khanacademy.org/science/organic-chemistry/alkenes-alkynes/alkene-reactions/v/introduction-to>

## 8. Материально-техническое обеспечение дисциплины(модуля)

Освоение дисциплины "Методы количественного изучения взаимосвязи между строением и реакционной способностью" предполагает использование следующего материально-технического обеспечения:

Материально-техническое обеспечение дисциплины включает использование персонального портативного компьютера (ноутбука) с необходимым программным обеспечением, LCD проектора и мультимедийного экрана.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО и учебным планом по направлению 04.03.01 "Химия" и профилю подготовки Химия высокомолекулярных и элементоорганических соединений .

Автор(ы):

Салин А.В. \_\_\_\_\_

"\_\_" \_\_\_\_\_ 201\_\_ г.

Рецензент(ы):

Галкин В.И. \_\_\_\_\_

"\_\_" \_\_\_\_\_ 201\_\_ г.