

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



подписано электронно-цифровой подписью

## Программа дисциплины

### Механизмы химических реакций

Направление подготовки: 04.04.01 - Химия

Профиль подготовки: Хемоинформатика и молекулярное моделирование

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Год начала обучения по образовательной программе: 2017

## **Содержание**

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения ОПОП ВО
2. Место дисциплины (модуля) в структуре ОПОП ВО
3. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся
4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий
  - 4.1. Структура и тематический план контактной и самостоятельной работы по дисциплине (модулю)
  - 4.2. Содержание дисциплины (модуля)
5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю)
6. Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю)
7. Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)
8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)
9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)
10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)
11. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)
12. Средства адаптации преподавания дисциплины (модуля) к потребностям обучающихся инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья
13. Приложение №1. Фонд оценочных средств
14. Приложение №2. Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)
15. Приложение №3. Перечень информационных технологий, используемых для освоения дисциплины (модуля), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем

Программу дисциплины разработал(а)(и) заведующий кафедрой, д.н. (профессор) Антипин И.С. (Кафедра органической химии, Химический институт им. А.М. Бутлерова), iantipin54@yandex.ru

**1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения ОПОП ВО**

Обучающийся, освоивший дисциплину (модуль), должен обладать следующими компетенциями:

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ОК-3	готовностью к саморазвитию, самореализации, использованию творческого потенциала (ОК-3).
ОПК-1	способностью использовать и развивать теоретические основы традиционных и новых разделов химии при решении профессиональных задач (ОПК-1);
ПК-2	владением теорией и навыками практической работы в избранной области химии (ПК-2);

Обучающийся, освоивший дисциплину (модуль):

Должен знать:

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

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.

Должен владеть:

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

Должен демонстрировать способность и готовность:

- применять теоретические знания при выполнении курсовых и магистерских работ.

**2. Место дисциплины (модуля) в структуре ОПОП ВО**

Данная дисциплина (модуль) включена в раздел "Б1.В.ДВ.2 Дисциплины (модули)" основной профессиональной образовательной программы 04.04.01 "Химия (Хемоинформатика и молекулярное моделирование)" и относится к дисциплинам по выбору.

Осваивается на 1 курсе в 1 семестре.

**3. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся**

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

Контактная работа - 28 часа(ов), в том числе лекции - 10 часа(ов), практические занятия - 18 часа(ов), лабораторные работы - 0 часа(ов), контроль самостоятельной работы - 0 часа(ов).

Самостоятельная работа - 44 часа(ов).

Контроль (зачёт / экзамен) - 0 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины: зачет в 1 семестре.

**4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий**

**4.1 Структура и тематический план контактной и самостоятельной работы по дисциплине (модулю)**

N	Разделы дисциплины / модуля	Семестр	Виды и часы контактной работы, их трудоемкость (в часах)			Самостоятельная работа
			Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
N	Разделы дисциплины / модуля	Семестр	Виды и часы контактной работы, их трудоемкость (в часах)			Самостоятельная работа
			Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
1.	Тема 1. Общие понятия об органических реакциях и их механизмах.	1	1	0	0	
2.	Тема 2. Методы исследования механизма органических реакций	1	1	0	0	2
3.	Тема 3. Основные типы промежуточных частиц.	1	1	0	0	
4.	Тема 4. Реакционная способность : структурные и сольватационные эффекты.	1	1	0	0	2
5.	Тема 5. Нуклеофильное замещение в алифатическом ряду.	1	1	0	0	
6.	Тема 6. Реакции элиминирования.	1	1	0	0	2
7.	Тема 7. Электрофильное и нуклеофильное замещение в ароматическом ряду.	1	1	0	0	2
8.	Тема 8. Электрофильное присоединение по кратным связям.	1	1	0	0	2
9.	Тема 9. Нуклеофильное присоединение к C=O кратной связи.	1	2	0	0	4
10.	Тема 10. Круглый стол "Кислоты и основания в органической химии"	1	0	2	0	6
11.	Тема 11. Круглый стол "Применение корреляционного анализа для установления механизма реакций"	1	0	4	0	6
12.	Тема 12. Круглый стол "Шкалы сольватирующей способности растворителей"	1	0	4	0	6
13.	Тема 13. Круглый стол "Орбитальные взаимодействия в согласованных и многостадийных органических реакциях"	1	0	4	0	6

**4.2 Содержание дисциплины (модуля)****Тема 1. Общие понятия об органических реакциях и их механизмах.**

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 - Гамметта.

**Тема 2. Методы исследования механизма органических реакций**

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.**

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.**

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.**

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 Корнблюма. 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.**

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.**

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. Комpleксы Мезенгеймера. Реакции в неактивированных ароматических системах. Дегидробензол.

### **Тема 8. Электрофильное присоединение по кратным связям.**

Кинетика и механизм реакции присоединения галогеноводородов и галогенов. Классический и ониевый карбкатионы. 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.**

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"**

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 H0, HA, HR.

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

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

### **Тема 12. Круглый стол "Шкалы сольватирующей способности растворителей"**

Количественный учет эффектов среды: теоретический, корреляционный и термодинамический. Контигуумная 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), Ет (Димрот), р (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"**

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"**

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

## **5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю)**

Самостоятельная работа обучающихся выполняется по заданию и при методическом руководстве преподавателя, но без его непосредственного участия. Самостоятельная работа подразделяется на самостоятельную работу на аудиторных занятиях и на внеаудиторную самостоятельную работу. Самостоятельная работа обучающихся включает как полностью самостоятельное освоение отдельных тем (разделов) дисциплины, так и проработку тем (разделов), осваиваемых во время аудиторной работы. Во время самостоятельной работы обучающиеся читают и конспектируют учебную, научную и справочную литературу, выполняют задания, направленные на закрепление знаний и отработку умений и навыков, готовятся к текущему и промежуточному контролю по дисциплине.

Организация самостоятельной работы обучающихся регламентируется нормативными документами, учебно-методической литературой и электронными образовательными ресурсами, включая:

Порядок организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования - программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры (утвержден приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от 5 апреля 2017 года №301)

Письмо Министерства образования Российской Федерации №14-55-996н/15 от 27 ноября 2002 г. "Об активизации самостоятельной работы студентов высших учебных заведений"

Устав федерального государственного автономного образовательного учреждения "Казанский (Приволжский) федеральный университет"

Правила внутреннего распорядка федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего профессионального образования "Казанский (Приволжский) федеральный университет"

Локальные нормативные акты Казанского (Приволжского) федерального университета

## **6. Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю)**

Фонд оценочных средств по дисциплине (модулю) включает оценочные материалы, направленные на проверку освоения компетенций, в том числе знаний, умений и навыков. Фонд оценочных средств включает оценочные средства текущего контроля и оценочные средства промежуточной аттестации.

В фонде оценочных средств содержится следующая информация:

- соответствие компетенций планируемым результатам обучения по дисциплине (модулю);
- критерии оценивания сформированности компетенций;
- механизм формирования оценки по дисциплине (модулю);
- описание порядка применения и процедуры оценивания для каждого оценочного средства;
- критерии оценивания для каждого оценочного средства;
- содержание оценочных средств, включая требования, предъявляемые к действиям обучающихся, демонстрируемым результатам, задания различных типов.

Фонд оценочных средств по дисциплине находится в Приложении 1 к программе дисциплины (модулю).

## **7. Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)**

Освоение дисциплины (модуля) предполагает изучение основной и дополнительной учебной литературы.

Литература может быть доступна обучающимся в одном из двух вариантов (либо в обоих из них):

- в электронном виде - через электронные библиотечные системы на основании заключенных КФУ договоров с правообладателями;
- в печатном виде - в Научной библиотеке им. Н.И. Лобачевского. Обучающиеся получают учебную литературу на абонементе по читательским билетам в соответствии с правилами пользования Научной библиотекой.

Электронные издания доступны дистанционно из любой точки при введении обучающимся своего логина и пароля от личного кабинета в системе "Электронный университет". При использовании печатных изданий библиотечный фонд должен быть укомплектован ими из расчета не менее 0,5 экземпляра (для обучающихся по ФГОС З++ - не менее 0,25 экземпляра) каждого из изданий основной литературы и не менее 0,25 экземпляра дополнительной литературы на каждого обучающегося из числа лиц, одновременно осваивающих данную дисциплину.

Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля), находится в Приложении 2 к рабочей программе дисциплины. Он подлежит обновлению при изменении условий договоров КФУ с правообладателями электронных изданий и при изменении комплектования фондов Научной библиотеки КФУ.

## **8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)**

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>

## **9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)**

Методические указания по выполнению контрольных работ

К выполнению контрольных работ рекомендуется приступать только после усвоения всего учебного материала дисциплины. Задания на контрольные работы разрабатываются в нескольких вариантах.

Рекомендации по освоению контрольных работ:

- контрольную работу следует выполнять полностью, т.е. решить все задачи и ответить на все вопросы задания; непонятный вопрос или задачу не следует пропускать; в этом случае необходимо обратиться за помощью к преподавателю;
- ответы в контрольных работах излагать ясно, точно и полно, таким образом, чтобы преподавателю был ясен весь ход рассуждений;
- решения задачи работы необходимо представлять вместе со всеми промежуточными преобразованиями и ссылками на используемые справочные материалы;
- при выполнении расчётов необходимо внимательно относиться к единицам измерения всех величин, входящих в ту или иную формулу, и проверять, в каких единицах измерения должен быть результат;
- не допускаются перечёркивания, вставки, произвольное сокращение слов и каких - либо обозначений, не применяемых в литературе по изучаемой дисциплине;
- неудовлетворительное оформление контрольной работы может быть причиной её незачёта; небрежность письма и грамматические ошибки недопустимы;
- на каждой странице работы необходимо оставлять поля;
- в шапке контрольной работы необходимо написать фамилию, инициалы, группу, направление и профиль, курс, наименование дисциплины, номер контрольного задания.

Методические рекомендации по самостоятельной работе для студентов по дисциплине 'Механизмы химических реакций'

Успешное освоение дисциплины предполагает активное, творческое участие студента путем планомерной, повседневной работы.

Общие методические указания по организации самостоятельной работы студентов

Самостоятельное изучение курса 'Механизмы химических реакций' следует начать с ознакомления с программой и требованиями к результатам изучения курса. Изучать курс рекомендуется по темам в соответствии с программой (расположение материала в программе курса не всегда совпадает с расположением его в том или ином учебнике, но соответствует тематике лекционных занятий) постепенно, в течение семестра, не оставляя на период подготовки к зачету. Не следует переходить к изучению последующей темы, пока материал предыдущей не усвоен. Степень освоения материала темы можно контролировать так: перед изучением темы прочесть требования к результатам ее изучения, обратив внимание на ключевые слова в требованиях к знаниям, после изучения темы проверить себя по тексту требований ('это я знаю', 'это я помню').

Работа с книгой. Изучать материал, относящийся к данной теме, следует по одному или нескольким из рекомендованных учебников (список рекомендуемой литературы приведен после плана изучения курса). Если возникают трудности при работе с основными учебниками, можно изучить соответствующую тему по конспектам лекционного курса, но затем следует обязательно вернуться к данной теме в учебнике. Для поиска необходимых сведений в учебнике можно использовать предметный указатель в конце учебника.

Большинство тем курса 'Механизмы химических реакций' носят теоретический характер и достаточно трудны для восприятия, поэтому тексты учебников с изложением таких тем могут вызвать определенные затруднения при их изучении. Такие тексты лучше изучать так: при первом чтении надо стараться получить общее представление об излагаемых вопросах, а также отмечать трудные и непонятные места; при повторном изучении темы необходимо усвоить все теоретические положения. Необходимо вникать в сущность того или иного изучаемого вопроса, а не пытаться лишь запомнить отдельные факты и явления. Более глубокому и прочному усвоению материала способствует изучение любого вопроса на уровне сущности, а не на уровне отдельных явлений. Изучаемый материал следует заносить в рабочую тетрадь в виде конспекта, включающего краткое последовательное изложение наиболее важной информации: новые термины, даты, имена ученых и их достижения и т.д. Во всех случаях, когда материал поддается систематизации, полезно составлять схемы и таблицы, 'свертывая' информацию в удобную, компактную форму.

Составление конспектов, особенно в форме таблиц, схем, опорных сигналов, способствует эффективному запоминанию изученного материала, поскольку здесь привлекается логическое запоминание и используются зрительный и двигательный типы памяти.

#### **10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)**

Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем, представлен в Приложении 3 к рабочей программе дисциплины (модуля).

#### **11. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)**

Материально-техническое обеспечение образовательного процесса по дисциплине (модулю) включает в себя следующие компоненты:

Помещения для самостоятельной работы обучающихся, укомплектованные специализированной мебелью (столы и стулья) и оснащенные компьютерной техникой с возможностью подключения к сети "Интернет" и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду КФУ.

Учебные аудитории для контактной работы с преподавателем, укомплектованные специализированной мебелью (столы и стулья).

Компьютер и принтер для распечатки раздаточных материалов.

Мультимедийная аудитория.

#### **12. Средства адаптации преподавания дисциплины к потребностям обучающихся инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья**

При необходимости в образовательном процессе применяются следующие методы и технологии, облегчающие восприятие информации обучающимися инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья:

- создание текстовой версии любого нетекстового контента для его возможного преобразования в альтернативные формы, удобные для различных пользователей;
- создание контента, который можно представить в различных видах без потери данных или структуры, предусмотреть возможность масштабирования текста и изображений без потери качества, предусмотреть доступность управления контентом с клавиатуры;
- создание возможностей для обучающихся воспринимать одну и ту же информацию из разных источников - например, так, чтобы лица с нарушениями слуха получали информацию визуально, с нарушениями зрения - аудиально;
- применение программных средств, обеспечивающих возможность освоения навыков и умений, формируемых дисциплиной, за счет альтернативных способов, в том числе виртуальных лабораторий и симуляционных технологий;
- применение дистанционных образовательных технологий для передачи информации, организации различных форм интерактивной контактной работы обучающегося с преподавателем, в том числе вебинаров, которые могут быть использованы для проведения виртуальных лекций с возможностью взаимодействия всех участников дистанционного обучения, проведения семинаров, выступления с докладами и защиты выполненных работ, проведения тренингов, организации коллективной работы;
- применение дистанционных образовательных технологий для организации форм текущего и промежуточного контроля;

- увеличение продолжительности сдачи обучающимся инвалидом или лицом с ограниченными возможностями здоровья форм промежуточной аттестации по отношению к установленной продолжительности их сдачи;
- продолжительности сдачи зачёта или экзамена, проводимого в письменной форме, - не более чем на 90 минут;
- продолжительности подготовки обучающегося к ответу на зачётке или экзамене, проводимом в устной форме, - не более чем на 20 минут;
- продолжительности выступления обучающегося при защите курсовой работы - не более чем на 15 минут.

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

**Приложение 2**  
к рабочей программе дисциплины (модуля)  
**Б1.В.ДВ.2 Механизмы химических реакций**

**Перечень литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)**

Направление подготовки: 04.04.01 - Химия

Профиль подготовки: Хемоинформатика и молекулярное моделирование

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Год начала обучения по образовательной программе: 2017

**Основная литература:**

1. Реутов, Олег Александрович. Органическая химия : в 4-х частях : учебник для студентов высших учебных заведений, обучающихся по направлению и специальности 'Химия' / О. А. Реутов, А. Л. Курц, К. П. Бутин . - 5-е изд. - Москва : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2014 . - ; 22 см . - (Химия) . - ISBN 978-5-94774-611-2. Ч. 1 . - [2014] . - 566, [1] с.
2. Реутов, Олег Александрович. Органическая химия : в 4-х частях : учебник для студентов высших учебных заведений, обучающихся по направлению и специальности 'Химия' / О. А. Реутов, А. Л. Курц, К. П. Бутин . - 5-е изд. - Москва : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2014 . - ; 22 см . - (Химия) . - ISBN 978-5-94774-611-2. Ч. 2 . - [2013] . - 622, [1] с.
3. Реутов, Олег Александрович. Органическая химия : в 4-х частях : учебник для студентов высших учебных заведений, обучающихся по направлению и специальности 'Химия' / О. А. Реутов, А. Л. Курц, К. П. Бутин ; Моск. гос. ун-т им. М. В. Ломоносова . - Москва : БИНОМ, Лаборатория знаний, 2014 . - ; 22 . - (Классический университетский учебник / ред. совет: В.А. Садовничий [и др.]) . Ч. 3 . - 2-е изд. - [2014] . - 543, [1] с.
4. Реутов, Олег Александрович. Органическая химия : в 4-х частях : учебник для студентов высших учебных заведений, обучающихся по направлению и специальности 'Химия' / О. А. Реутов, А. Л. Курц, К. П. Бутин ; Моск. гос. ун-т им. М.В. Ломоносова . - Москва : БИНОМ, Лаборатория знаний, 2014 . - ; 22 . - (Классический университетский учебник / ред. совет: В. А. Садовничий [и др.]) . Ч. 4 . - [2014] . - 722, [4] с.
5. Органическая химия. Основной курс.: Учебник / 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. Тoub, М. Механизмы неорганических реакций. [Электронный ресурс] / М. Тoub, Д. Берджесс. - Электрон. дан. - М. : Издательство 'Лаборатория знаний', 2014. - 681 с. - Режим доступа: <http://e.lanbook.com/book/66360>

**Дополнительная литература:**

1. Чмутова, Галина Алексеевна (д-р хим. наук ; 1940-). Аспекты связи 'Строение - реакционная способность': учебное пособие / Г. А. Чмутова ; Казан. (Приволж.) федер. ун-т, Хим. ин-т . - 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. - Электрон. дан. - СПб. : Лань, 2014. - 288 с. - Режим доступа: <http://e.lanbook.com/book/42196>
3. Чоркендорф, Иб (1955-). Современный катализ и химическая кинетика / И. Чоркендорф, Х. Наймантсведрайт ; пер. с англ. В. И. Роддугина . - 2-е изд. - Долгопрудный : Интеллект, 2013 . - 500, [1] 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. Шабаров, Ю.С. Органическая химия. [Электронный ресурс] - Электрон. дан. - СПб. : Лань, 2011. - 848 с. - Режим доступа: <http://e.lanbook.com/book/4037>

Приложение 3  
к рабочей программе дисциплины (модуля)  
Б1.В.ДВ.2 Механизмы химических реакций

**Перечень информационных технологий, используемых для освоения дисциплины (модуля), включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем**

Направление подготовки: 04.04.01 - Химия

Профиль подготовки: Хемоинформатика и молекулярное моделирование

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Год начала обучения по образовательной программе: 2017

Освоение дисциплины (модуля) предполагает использование следующего программного обеспечения и информационно-справочных систем:

Операционная система Microsoft Windows 7 Профессиональная или Windows XP (Volume License)

Пакет офисного программного обеспечения Microsoft Office 365 или Microsoft Office Professional plus 2010

Браузер Mozilla Firefox

Браузер Google Chrome

Adobe Reader XI или Adobe Acrobat Reader DC

Kaspersky Endpoint Security для Windows

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе "ZNANIUM.COM", доступ к которой предоставлен обучающимся. 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, учебно-методические комплексы, 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 образования (ФГОС ВО) нового поколения.

Учебно-методическая литература для данной дисциплины имеется в наличии в электронно-библиотечной системе Издательства "Лань", доступ к которой предоставлен обучающимся. 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.