

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. Минзарипов Р.Г.

_____ 20__ г.

Программа дисциплины

Методы количественного изучения взаимосвязи между строением и реакционной способностью СЗ.ДВ.2

Специальность: 020201.65 - Фундаментальная и прикладная химия

Специализация: Химия высокомолекулярных и элементоорганических соединений

Квалификация выпускника:

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

Казань
2014

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) старший преподаватель, 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 "СЗ.ДВ.2 Профессиональный" основной образовательной программы 020201.65 Фундаментальная и прикладная 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 профессиональному циклу СЗ. 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
ПК-1 (профессиональные компетенции)	понимает сущность и социальную значимость профессии, основных перспектив и проблем, определяющих конкретную область деятельности;

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 экзамен 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	
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

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
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	устный опрос
	Тема . Итоговая форма контроля	8		0	0	0	экзамен
	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)

№	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	6	устный опрос
4.	Тема 4. Цель и общая методология изучения механизмов химических реакций.	8	4	подготовка к устному опросу	6	устный опрос
6.	Тема 6. Основные понятия химической кинетики.	8	6	подготовка к устному опросу	6	устный опрос
8.	Тема 8. Принцип линейности свободных энергий.	8	8-9	подготовка к устному опросу	6	устный опрос
10.	Тема 10. Неэмпирические методы оценки электронных и пространственных эффектов заместителей.	8	11	подготовка к устному опросу	6	устный опрос
	Итого				30	

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.

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 - важная современная тенденция в развитии корреляционного анализа.

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. Изокинетическая зависимость, критерий Леффлера. 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.

устный опрос , примерные вопросы:

Предзачетный контроль усвоения лекционного материала в форме обсуждения вопросов: 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 экзамену:

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. Высокомолекулярные соединения: учеб. для студентов вузов, обучающихся по спец. 011000 "Химия" и направлению 510500 "Химия" / Ю. Д. Семчиков. ?2-е изд., стер.. ?Москва: Академия, 2005?366,[1] с.:
2. 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
3. Семчиков, Ю.Д. Введение в химию полимеров: учебное пособие для студентов высших учебных заведений, обучающихся по направлению ВПО 020100 "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.:
4. Кленин В.И., Федусенко И.В. Высокомолекулярные соединения: учебник. - 2-е изд., испр. - Санкт-Петербург, 2013. - 512 с.
http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_cid=25&pl1_id=5842

7.2. Дополнительная литература:

1. Галкин В.И., Саяхов Р.Д., Черкасов Р.А. Стерический эффект: проблема количественной оценки и проявление в реакционной способности элементоорганических соединений (обзор) // Успехи химии.- 1991.- Т.60, вып.8.-С.1617-1641.
 2. Черкасов А.Р., Галкин В.И., Черкасов Р.А. Индуктивный эффект заместителей в корреляционном анализе (обзор) // Успехи химии.- 1996.- Т.65, ВЫП.8.-С.695-711.
 3. Саяхов Р.Д., Седых А.Е., Галкин В.И., Черкасов Р.А. Новые возможности применения модели фронтального стерического эффекта. IV. Оптимизация структуры молекул // Ж. орг. химии, -1999,-т. 35, вып. 5,- с. 691- 695.
 4. Galkin V.I. Inductive substituent effects (обзор) // J. Phys. Org.Chem.- 1999.- V.12,N4.-P.283-288.
 5. Exner O., Charton M., Galkin V. The inductive effect - the present position // J.Phys. Org.Chem.- 1999.- V.12, N4.- P.289.
 6. Galkin. V.I., Cherkasov A.R., Cherkasov R.A. "Inductive" electronegativity scale // Journal of Mol. Struct. (Theochem). -2000.- V.489, N 1. - P. 43-46.
 7. Galkin V.I., Cherkasov A.R., Cherkasov R.A. Modelling of substituents electronic and steric effects for effective analysis of organoelement and organophosphorus reactivity // Phosphorus, Sulfur and Silicon and Relat. Elem. 1999. Vol. 144-146.- P.329-332.
 8. Марч Дж. Органическая химия. Реакции, механизмы, структура (в 4-х томах). М.: Мир, 1987.
 9. Francis A. Carey, Richard J. Sundberg Advanced Organic Chemistry Part A: Structure and mechanisms. 5th ed. - Springer, 2007 - 1199 p.
 10. Романовский Б.В. Основы химической кинетики. М.: Изд. "Экзамен", 2006. - 416 с.
 11. Бадаев Ф.З. Кинетика химических реакций. - М.: Изд. МГИУ, 2007. - 67 с.
 12. Семчиков Ю. Д., Жильцов С. Ф., Зайцев С. Д. Введение в химию полимеров. - Санкт-Петербург: Лань, 2012. - 224 с.
- http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_cid=25&pl1_id=4036

7.3. Интернет-ресурсы:

видео-лекции по реакционной способности органических соединений - www.academicearth.org
именные реакции в органической химии - www.organic-chemistry.org/namereactions/
новые реакции в органической химии - newreactions.wordpress.com
сайт лаборатории изучения механизмов реакций - <http://limor1.nioch.nsc.ru>
форум по обсуждению механизмов химических реакций -
www.khanacademy.org/science/organic-chemistry/alkenes-alkynes/alkene-reactions/v/introduction-to-reactions

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 специальности: 020201.65 "Фундаментальная и прикладная химия" и специализации Химия высокомолекулярных и элементоорганических соединений .

Автор(ы):

Салин А.В. _____

"__" _____ 201__ г.

Рецензент(ы):

Галкин В.И. _____

"__" _____ 201__ г.