

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



подписано электронно-цифровой подписью

Программа дисциплины

Методы количественного изучения взаимосвязи между строением и реакционной способностью БЗ.ДВ.4

Направление подготовки: 020100.62 - 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 721315

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 "Б3.ДВ.4 Профессиональный" основной образовательной программы 020100.62 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 Б3. 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 2 зачетных(ые) единиц(ы) 72 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	
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	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)

№	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 зачету:

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. Афанасьев Б.Н. Физическая химия: учебное пособие для студентов вузов, обучающихся по направлениям "Химическая технология", "Биотехнология" и "Энерго- и ресурсосберегающие процессы в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии" / Б. Н. Афанасьев, Ю. П. Акулова. Санкт-Петербург [и др.]: Лань, 2012. - 463 с.
2. Чоркендорф, И. Современный катализ и химическая кинетика / И. Чоркендорф, Х. Наймантсведрайт; пер. с англ. В. И. Ролдугина. ?2-е изд..?Долгопрудный: Интеллект, 2013.?500 с.
3. 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
4. Афанасьев Б.Н. Акулова Ю.П. Физическая химия. [Электронный ресурс]. - Санкт-Петербург.: Лань, 2012. - 416 с. Режим доступа:
http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_cid=25&pl1_id=4312

7.2. Дополнительная литература:

1. Пурмаль А.П. А, Б, В- химической кинетики. М.: ИКЦ "Академкнига". 2004.
2. Байрамов В.М. Основы химической кинетики и катализа. М.: Академия. 2003.

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 020100.62 "Химия" и профилю подготовки Химия высокомолекулярных и элементоорганических соединений .

Автор(ы):

Салин А.В. _____

"__" _____ 201__ г.

Рецензент(ы):

Галкин В.И. _____

"__" _____ 201__ г.