

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
Ярославский государственный университет им. П.Г. Демидова

Институт фундаментальной и прикладной химии

УТВЕРЖДАЮ

Декан факультета биологии и экологии



О.А.Маракаев

« 24 » мая 2022 г.

Рабочая программа дисциплины
«Методы исследования механизма органических реакций»

Направление подготовки
04.04.01 Химия

Направленность (профиль)
«Физико-органическая и фармацевтическая химия»

Форма обучения
очная

Программа одобрена
на заседании института
от 14 апреля 2022 г., протокол № 8

Программа одобрена НМК
факультета биологии и экологии
протокол № 8 от 18 апреля 2022 г.

Ярославль

1. Цели освоения дисциплины

Целью освоения дисциплины является формирование у студентов:

- теоретического фундамента для исследования механизмов органических реакций, расширения и закрепления базовых понятий органической химии;
- умений и навыков экспериментальной работы, самостоятельной работы с научно-технической литературой, способностей к творчеству, в том числе к научно-исследовательской работе, потребности к самостоятельному приобретению знаний;
- современных представлений о взаимосвязи строения и свойств органических веществ, закономерностях протекания химических процессов, научных теориях, методах исследования механизмов органических реакций.

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина «Методы исследования механизма органических реакций» относится к дисциплинам по выбору (Б1.В.ДВ.05.02) части образовательной программы, формируемой участниками образовательных отношений.

Необходимыми для освоения этой дисциплины являются понятия, полученные при изучении химических дисциплин предыдущего уровня образования. Знания и навыки, полученные при изучении данной дисциплины, используются обучаемыми при освоении других профессиональных дисциплин и при выполнении выпускной работы магистра. Итоговой формой контроля по дисциплине является зачёт.

3. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование следующих элементов компетенций в соответствии с ФГОС ВО, ОП ВО и приобретения следующих знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности:

Формируемая компетенция (код и формулировка)	Индикатор достижения компетенции (код и формулировка)	Перечень планируемых результатов обучения
Профессиональные компетенции		
ПК-1-н Способен планировать работу и выбирать адекватные методы решения научно-исследовательских задач в области контроля структуры и качества биологически активных соединений.	ПК-1-н.1 Составляет общий план исследования в области контроля структуры и качества биологически активных соединений и детальные планы отдельных стадий.	Знать: – методы, используемые для проведения исследований в области контроля структуры и качества биологически активных соединений и составления детальных планов отдельных стадий. Уметь: – составлять общий план исследования в области контроля структуры и качества биологически активных соединений и детальные планы отдельных стадий. Владеть навыками: – научно-исследовательской работы; – планирования и выполнения операций с учетом знаний о свойствах биологически активных соединений.

	<p>ПК-1-н.2 Выбирает экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения задачи в области контроля структуры и качества биологически активных соединений исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов.</p>	<p>Знать: – основные экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения задачи в области контроля структуры и качества биологически активных соединений исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов.</p> <p>Уметь: – использовать экспериментальные методы для контроля структуры и качества биологически активных соединений исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов; – использовать расчетно-теоретические методы решения задачи в области контроля структуры и качества биологически активных соединений исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов.</p> <p>Владеть навыками: – интерпретации данных о строении и чистоте биологически активных ароматических соединений, полученных с помощью различных методов анализа.</p>
<p>ПК-6-н Способен выбирать обоснованные подходы к анализу связи структуры и активности и конструированию структур с заданной физиологической активностью с учетом доступной информации об их действии в организме.</p>	<p>ПК-6-н.1 Применяет знания о химических свойствах известных лекарственных препаратов и их биомиметизации при анализе соотношения «структура-активность».</p>	<p>Знать: – к какому классу веществ относятся исследуемые лекарственные препараты; – физико-химические свойства основных классов органических веществ.</p> <p>Уметь: – применять знания о химических свойствах известных лекарственных препаратов при анализе соотношения «структура-активность».</p> <p>Владеть навыками: – анализа влияния структуры органического вещества на его физико-химические и биологические свойства.</p>
	<p>ПК-6-н.2 Применяет на практике принципы рационального создания лекарственных веществ.</p>	<p>Знать: – принципы рационального создания лекарственных веществ.</p> <p>Уметь: – разрабатывать эффективные схемы получения биологически активных веществ.</p> <p>Владеть навыками: – выбора наиболее перспективного пути создания целевой молекулы биологически активного соединения.</p>

	<p>ПК-6-н.3 Вырабатывает стратегию поиска структурных прототипов лекарственных веществ (соединения-лидера) с учетом требований к его структуре и возможных ограничениях.</p>	<p>Знать: – основные подходы к поиску структурных прототипов лекарственных веществ с учетом требований к его структуре и возможных ограничениях.</p> <p>Уметь: – на основе анализа структуры лекарственных веществ разрабатывать стратегию поиска их структурных прототипов.</p> <p>Владеть навыками: – разработки стратегий поиска структурных прототипов лекарственных веществ.</p>
<p>ПК-7-н Способен использовать теоретические представления химии для анализа механизмов химических реакций и реакционной способности органических соединений.</p>	<p>ПК-7-н.1 Выбирает методы исследования закономерностей и механизмов химических процессов, интерпретирует и анализирует полученные результаты.</p>	<p>Знать: – основные типы органических реакций; – факторы, влияющие на закономерности протекания химических реакций (гет)аренов; – механизмы химических реакций основных классов органических веществ.</p> <p>Уметь: – использовать различные методы физико-химического анализа для изучения закономерностей и механизмов химических процессов; – представлять полученные в ходе исследований результаты в виде отчета.</p> <p>Владеть навыками: – проведения исследований закономерностей и механизмов химических процессов и объяснения полученных результатов.</p>
	<p>ПК-7-н.2 Проводит анализ связи строения с реакционной способностью органических соединений, выявляет корреляции «структура – реакционная способность».</p>	<p>Знать: – строение и химические свойства органических соединений.</p> <p>Уметь: – использовать знания об особенностях строения органических соединений для заключения о закономерностях реализации различных механизмов химических превращений.</p> <p>Владеть навыками: – анализа данных о влиянии строения органических соединений на их реакционную способность.</p>

4. Объем, структура и содержание дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 зачетные единицы, 144 acad.ч.

№ п/п	Темы (разделы) дисциплины, их содержание	Семестр	Виды учебных занятий, включая самостоятельную работу студентов, и их трудоемкость (в академических часах)						Формы текущего контроля успеваемости Форма промежуточной аттестации (по семестрам) Формы ЭО и ДОТ (при наличии)
			Контактная работа						
			лекции	практические	лабораторные	консультации	аттестационные испытания	самостоятельная работа	
1	Общая классификация механизмов.	1	2		4	0,6		20	Самостоятельная работа. Отчет по лабораторной работе
2	Стадии изучения механизма реакций.	1	2		4	0,6		21	Самостоятельная работа. Отчет по лабораторной работе
3	Термодинамические параметры реакций.	1	2		4	0,6		20	Самостоятельная работа. Отчет по лабораторной работе
4	Индексы реакционной способности.	1	2		4	0,6		20	Самостоятельная работа. Отчет по лабораторной работе
5	Стерические эффекты.	1	2		8	0,6		21	Самостоятельная работа. Отчет по лабораторной работе
							0,3	4,7	Зачет
	ИТОГО		10		24	3	0,3	106,7	

4.1 Информация о реализации дисциплины в форме практической подготовки

Информация о разделах дисциплины и видах учебных занятий, реализуемых в форме практической подготовки

№ п/п	Темы (разделы) дисциплины, их содержание	Семестр	Виды учебных занятий, включая самостоятельную работу студентов, и их трудоемкость (в академических часах)						Место проведения занятий в форме практической подготовки
			Контактная работа					самостоятельная работа	
			лекции	практические	лабораторные	консультации	аттестационные испытания		
1	Общая классификация механизмов.				4				Факультет биологии и экологии ЯрГУ
2	Стадии изучения механизма реакций.				4				Факультет биологии и экологии ЯрГУ
3	Термодинамические параметры реакций.				4				Факультет биологии и экологии ЯрГУ
4	Индексы реакционной способности.				4				Факультет биологии и экологии ЯрГУ
5	Стерические эффекты.				8				Факультет биологии и экологии ЯрГУ
	ИТОГО				24				

Содержание разделов дисциплины

1. Общая классификация механизмов.

- 1.1. Основные типы органических реакций
- 1.2. Общая классификация механизмов.
- 1.3. Понятие о переходном состоянии.

ЛР № 1. Вычислительный анализ стереоспецифичности перегруппировки Коупа.

2. Стадии изучения механизма реакций.

- 2.1. Материальный баланс.
- 2.2. Идентификация всех продуктов, интермедиатов.
- 2.3. Кинетика.

ЛР № 2. Метанолиз ацеталя – исследование кинетики с использованием газовой хроматографии.

3. Термодинамические параметры реакций.

- 3.1. Энергия переходного состояния
- 3.2. Лимитирующая стадия
- 3.3. Кинетический и термодинамический контроль реакций.

ЛР № 3. Алкилирование хлорбензола: кинетический или термодинамический контроль реакции.

4. Индексы реакционной способности.

- 4.1. Уравнение Гаммета.
- 4.2. Индексы реакционной способности: индексы Фукуи, Клопмана и др.

ЛР № 4. Надежный «однокомпонентный» метод получения кинетических данных для графиков Гаммета, используемый для демонстрации эффектов заместителей в реакции ароматических этиловых эфиров.

5. Стерические эффекты.

5.1. Пространственные эффекты

5.2. Уравнение Тафта.

ЛР № 5. Скорость реакции альдольной конденсации – демонстрация стерических и электронных эффектов заместителей.

5. Образовательные технологии, в том числе технологии электронного обучения и дистанционные образовательные технологии, используемые при осуществлении образовательного процесса по дисциплине

В процессе обучения используются следующие образовательные технологии:

Вводная лекция – дает первое целостное представление о дисциплине и ориентирует студента в системе изучения данной дисциплины. Студенты знакомятся с назначением и задачами курса, его ролью и местом в системе учебных дисциплин и в системе подготовки в целом. Дается краткий обзор курса, история развития науки и практики, достижения в этой сфере, имена известных ученых, излагаются перспективные направления исследований. На этой лекции высказываются методические и организационные особенности работы в рамках данной дисциплины, а также дается анализ рекомендуемой учебно-методической литературы.

Академическая лекция – последовательное изложение учебного материала в виде монолога преподавателя с применением мультимедийных приложений. Возможно также общение со студентами при рассмотрении примеров и фактов, уже знакомых из смежных учебных дисциплин. Требования к академической лекции: современный научный уровень, информативность, убедительная аргументация, доступная и понятная речь, четкая структура и логика, наличие ярких примеров, научных доказательств, современных фактов.

Лабораторные занятия – выполнение лабораторной работы обеспечивает закрепление полученных теоретических знаний, обеспечивает освоение навыков самостоятельной лабораторной работы. Формулировка выводов по полученным результатам учит умению анализировать и обобщать полученные экспериментальные данные, развивает логическое мышление.

Консультации – групповые занятия, являющиеся одной из форм контроля самостоятельной работы студентов.

В процессе обучения будут задействованы аудитории, оборудованные для проведения лекций, лабораторных и практических занятий, консультаций, фонд библиотеки, синтетическое и аналитическое оборудование, компьютерная техника. Для обеспечения самостоятельной работы студентов по дисциплине преподавателями кафедры разработаны и изданы специальные методические указания, описания выполняемых лабораторных работ (см. перечень основной и дополнительной учебной литературы).

В процессе обучения используются следующие технологии электронного обучения и дистанционные образовательные технологии:

Электронный учебный курс в LMS Электронный университет Moodle ЯрГУ, в котором:

- представлены задания для самостоятельной работы обучающихся по темам дисциплины;
- осуществляется проведение отдельных мероприятий текущего контроля успеваемости студентов;
- представлены тексты лекций по отдельным темам дисциплины;
- представлены правила прохождения промежуточной аттестации по дисциплине;
- представлен список учебной литературы, рекомендуемой для освоения дисциплины;

- представлена информация о форме и времени проведения консультаций по дисциплине в режиме онлайн;
- посредством форума осуществляется синхронное и (или) асинхронное взаимодействие между обучающимися и преподавателем в рамках изучения дисциплины.

6. Перечень лицензионного и (или) свободно распространяемого программного обеспечения, используемого при осуществлении образовательного процесса по дисциплине

При осуществлении образовательного процесса используются:

- программы Microsoft Office;
- программа Adobe Acrobat Reader;
- браузеры Mozilla Firefox, Google Chrome.

7. Перечень современных профессиональных баз данных и информационных справочных систем, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (при необходимости)

При осуществлении образовательного процесса по дисциплине используются:

- автоматизированная библиотечно-информационная система «БУКИ-NEXT»
http://www.lib.uniyar.ac.ru/opac/bk_cat_find.php

8. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» (при необходимости), рекомендуемых для освоения дисциплины

а) основная литература

1. Реутов О.А. Органическая химия: учебник для вузов: в 4 ч / О.А. Реутов, А.Л. Курц, К.П. Бутин; М-во образования РФ. Ч. 1. – 3-е изд. – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2009. – 567 с.

http://www.lib.uniyar.ac.ru/opac/bk_cat_card.php?rec_id=642957&cat_cd=YARSU

2. Реутов О.А. Органическая химия: учебник для вузов: в 4 ч / О.А. Реутов, А.Л. Курц, К.П. Бутин; М-во образования РФ. Ч. 2. – 3-е изд., испр. – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2009. – 623 с.

http://www.lib.uniyar.ac.ru/opac/bk_cat_card.php?rec_id=643328&cat_cd=YARSU

3. Реутов О.А. Органическая химия: учебник для вузов: в 4 ч / О.А. Реутов, А.Л. Курц, К.П. Бутин; М-во образования РФ; МГУ. Ч. 3. – 2-е изд. – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2010. – 544 с.

http://www.lib.uniyar.ac.ru/opac/bk_cat_card.php?rec_id=680219&cat_cd=YARSU

4. Реутов О.А. Органическая химия: учебник для вузов: в 4 ч / О.А. Реутов, А.Л. Курц, К.П. Бутин; М-во образования РФ. Ч. 4. – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2009. – 726 с.

http://www.lib.uniyar.ac.ru/opac/bk_cat_card.php?rec_id=643384&cat_cd=YARSU

б) дополнительная литература

1. Артеменко А.И. Органическая химия: учеб. пособие для вузов. / А.И. Артеменко; М-во образования РФ – 2-е изд., перераб. – М.: Высшая школа, 2005. – 605 с.

http://www.lib.uniyar.ac.ru/opac/bk_cat_card.php?rec_id=357465&cat_cd=YARSU

2. Задачи по органической химии с решениями: учеб. пособие для вузов / А.Л. Курц и др.; совет по химии УМО по классическому университетскому образованию. – 4-е изд. – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2014. – 350 с.

http://lib.uniyar.ac.ru/opac/bk_cat_card.php?rec_id=356407&cat_cd=YARSU

9. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине

Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине включает в свой состав специальные помещения:

- учебные аудитории для проведения занятий лекционного типа;
- учебные аудитории для проведения лабораторных работ;
- учебные аудитории для проведения групповых и индивидуальных консультаций,
- учебные аудитории для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации;
- помещения для самостоятельной работы;
- помещения для хранения и профилактического обслуживания технических средств обучения.

Специальные помещения укомплектованы средствами обучения, служащими для представления учебной информации большой аудитории.

Для проведения занятий лекционного типа предлагаются наборы демонстрационного оборудования и учебно-наглядных пособий, хранящиеся на электронных носителях и обеспечивающие тематические иллюстрации, соответствующие рабочей программе дисциплины.

Помещения для самостоятельной работы обучающихся оснащены компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду организации.

Число посадочных мест в лекционной аудитории больше либо равно списочному составу потока, а в аудитории для практических занятий (семинаров), лабораторных – списочному составу группы обучающихся.

Автор:

Доцент института
фундаментальной и прикладной химии, к.х.н.

 Р.С. Бегунов

**Приложение №1 к рабочей программе дисциплины
«Методы исследования механизма органических реакций»**

**Фонд оценочных средств для проведения текущей и промежуточной аттестации
студентов по дисциплине**

**1. Типовые контрольные задания и иные материалы,
используемые в процессе текущего контроля успеваемости**

Задания для самостоятельной работы

Задания по теме № 1 «Общая классификация механизмов»

1. Раздел 1.1. Приведите классификацию типов органических реакций по характеру химических превращений
2. Раздел 1.2. Приведите классификацию типов органических реакций по механизмам.
3. Раздел 1.3. Какая область на кривой потенциальной энергии реакции нитрования бензола соответствует переходному состоянию?

Задания по теме № 2 «Стадии изучения механизма реакций»

1. Раздел 2.1. На каких стехиометрических законах основаны расчеты технологических процессов, в результате которых происходит химическое изменение вещества?
2. Раздел 2.2. Какие методы физико-химического анализа наиболее широко используются в органической химии для идентификации интермедиатов и продуктов реакции?
3. Раздел 2.3. Почему изменение свободной энергии (ΔG) не дает информации о скорости химического процесса?

Задания по теме № 3. «Термодинамические параметры реакций».

1. Раздел 3.1. Что необходимо сделать для перехода от динамики отдельного реакционного комплекса к кинетическим константам, описывающим ансамбль реагирующих частиц.
2. Раздел 3.2. В каких случаях понятия лимитирующая стадия и определяющая стадия не совпадают.
3. Раздел 3.3. Продукт А образуется быстрее, чем продукт В, потому что энергия активации для продукта А ниже, чем для продукта В, но продукт В более стабилен. Какое из веществ (А или В) является кинетическим продуктом и предпочтительнее образуется при кинетическом контроле, а какое является термодинамическим продуктом и предпочтительно при термодинамическом контроле?

Задания по теме № 4. «Индексы реакционной способности»

1. Раздел 4.1. Что характеризуют константы Гаммета?
2. Раздел 4.2. Примените принцип Фукуи для объяснения реакционной способности *орто*-, *мета*- и *пара*-галогеннитробензолов в реакции с анилином

Задания по теме № 5. «Стерические эффекты»

1. Раздел 5.1. Приведите примеры заместителей в феноле, увеличивающих его нуклеофильные свойства, но при этом препятствующих протеканию реакции S_NAr .
2. Раздел 5.2. Какие существуют ограничения применимости уравнения Тафта для стерического влияния заместителей?

Самостоятельная работа № 1

(проверка сформированности ПК-1-н, индикатор ПК-1-н.2.)

Примеры заданий:

- 1) Какие существуют подходы к классификации реакций?
- 2) Проиллюстрируйте любыми примерами следующие термины: электрофил, нуклеофил, карбен, радикал, анион-радикал, карбокатион, карбанион.
- 3) Укажите тип реакции – S_N2 , приведите конкретный пример, разберите по стадиям.
- 4) К какому типу реакций относится полимеризация?
- 5) Дайте определение понятиям: гомолитические (радикальные реакции) и гетеролитические (ионные реакции). Какими особенностями связи обусловлен ее распад по гомолитическому или гетеролитическому механизму?
- 6) Изобразите схемой и кратко изложите современные представления о механизме реакции нитрования бензола. В каком валентном состоянии (тип гибридизации) находится атом углерода в интермедиатах?
- 7) Рассмотрите механизм бромирования 2,2,5,5-тетраметилгексана. Укажите медленную стадию. Приведите ряд изменения реакционной способности галогенов в реакции с 2,2,5,5-тетраэтилгексаном. Дайте объяснения.
- 8) Как классифицируются органические реакции по характеру реагирующих частиц? Приведите примеры: а) нуклеофильного реагента и нуклеофильной реакции, б) электрофильного реагента и электрофильной реакции.

Правила выставления оценки по результатам самостоятельной работы:

Оценка по результатам самостоятельной работы считается в баллах по каждому заданию по следующему принципу:

0 баллов – выполнено правильно менее половины задания; 1 балл – задание правильно выполнено более чем на половину; 2 балла – полное выполнение задания.

Максимальное количество баллов за работу – 16.

Набранное количество баллов 15-16 соответствует оценке «отлично», 13-14 баллов – оценке «хорошо», 11-12 баллов – оценке «удовлетворительно», менее 11 баллов – оценке «неудовлетворительно» (умения и навыки на данном этапе освоения дисциплины не сформированы).

Самостоятельная работа № 2

(проверка сформированности ПК-7-н, индикатор ПК-7-н.1)

Примеры заданий:

- 1) Перечислите методы изучения механизмов органических реакций. Подтвердите примерами.
- 2) При сольволизе *трет*-бутилгалогенидов $(CH_3)_3CX$ в растворе спирта с массовой долей 80% при 25°C наблюдается следующая зависимость

X	Cl	Br	I
$k \times 10^5$	0,854	37,2	90,1

Дайте объяснение наблюдаемой зависимости.

- 3) Для реакции S_N2 напишите кинетическое уравнение
- 4) При нагревании 3,4-дихлорнитробензола с водным раствором гидроксида натрия замещается избирательно только один атом хлора. Рассмотрите механизм реакции, объясните влияние нитрогруппы на устойчивость промежуточного карбаниона.
- 5) Предложите методы для детектирования интермедиатов процесса нитрования аренов.
- 6) При смешении 1 моль уксусной кислоты и 1 моль этанола реакция протекает до установления равновесия, в котором в смеси находится 1/3 моль кислоты, 1/3 моль спирта,

2/3 моль эфира и 2/3 моль воды. Вычислите количество молей эфира, которое будет в реакционной смеси при достижении равновесия при реакции 1 моль кислоты и 2 моль спирта.

7) Простейший путь получения альдегида RCH^{18}O , меченного по карбонильному кислороду – оставить обычный альдегид в растворе H_2^{18}O в присутствии следов кислоты на некоторое время. Каков *механизм этого обмена* кислорода?

Правила выставления оценки по результатам самостоятельной работы:

Оценка по результатам самостоятельной работы считается в баллах по каждому заданию по следующему принципу:

0 баллов – выполнено правильно менее половины задания; 1 балл – задание правильно выполнено более чем на половину; 2 балла – полное выполнение задания.

Максимальное количество баллов за работу – 14.

Набранное количество баллов 12-14 соответствует оценке «отлично», 10-11 баллов – оценке «хорошо», 8-9 баллов – оценке «удовлетворительно», менее 5 баллов – оценке «неудовлетворительно» (умения и навыки на данном этапе освоения дисциплины не сформированы).

Самостоятельная работа № 3

(проверка сформированности ПК-7-н, индикатор ПК-7-н.1)

Примеры заданий:

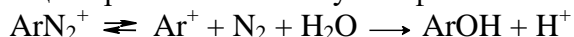
1) Какие соединения получатся при щелочном гидролизе: а) хлорбензола; б) о-нитрохлорбензола; в) 2,4,6-тринитрохлорбензола. Для какого соединения реакция гидролиза пройдет труднее и почему? Рассмотрите механизм этих реакций.

2) Приведите механизм и энергетическую диаграмму реакции сульфирования ацетанилида (механизм $\text{S}_{\text{E}}\text{Ar}$). Выберите эффективный способ ускорения этой реакции из следующих: воздействие облучением, катализатором, растворителем, нагреванием.

3) При каких значениях ΔG_{p} самопроизвольно идет процесс в заданном направлении?

4) Приведите энергетическую диаграмму реакции ароматического нуклеофильного замещения. Дайте пояснения.

5) Реакция ароматического нуклеофильного замещения $\text{S}_{\text{N}}\text{Ar1}$ протекает по схеме:



Какая стадия лимитирует процесс? Оцените знак энтропии активации ΔS^\ddagger .

6) Для реакции $\text{S}_{\text{N}}2$ приведите энергетическую диаграмму реакции, обозначьте энергию активации реакции.

7) Для реакции $\text{C}_2\text{H}_5\text{--O--C}_2\text{H}_5 + 6\text{O}_2 = 4\text{CO}_2 + 5\text{H}_2\text{O}$ укажите знаки ΔH , ΔS , ΔG .

8) Разница в стандартных энергиях Гиббса двух изомеров равна 65,5 кДж/моль. Во сколько раз равновесное количество одного вещества больше, чем его изомера при 400 К?

Правила выставления оценки по результатам самостоятельной работы:

Оценка по результатам самостоятельной работы считается в баллах по каждому заданию по следующему принципу:

0 баллов – выполнено правильно менее половины задания; 1 балл – задание правильно выполнено более чем на половину; 2 балла – полное выполнение задания.

Максимальное количество баллов за работу – 16.

Набранное количество баллов 15-16 соответствует оценке «отлично», 13-14 баллов – оценке «хорошо», 11-12 баллов – оценке «удовлетворительно», менее 11 баллов – оценке «неудовлетворительно» (умения и навыки на данном этапе освоения дисциплины не сформированы).

Самостоятельная работа № 4

(проверка сформированности ПК-б-н, индикатор ПК-б-н.3)

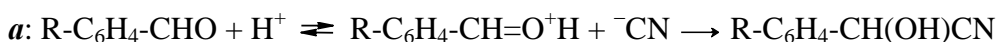
Примеры заданий:

- 1) Какой набор σ -констант (σ , σ^+ , σ^-) следует использовать для корреляции констант кислотности пиридиновых ионов 4-RC₅H₄N⁺H? Сделайте вывод о возможности прямого полярного сопряжения R с N⁺.
- 2) При бромировании метильной группы в *n*-замещенных толуолах формулы *n*-R-C₆H₄-CH₃ получены следующие значения относительных константы скорости накопления продукта *n*-R-C₆H₄-CH₂-Br:

R	MeO	Me	H	Cl	NO ₂
$k_{\text{отн.}}$	11.7	2.56	1.00	0.801	0.109

Рассчитайте значения ρ . С какими σ -константами (σ , σ^+ , σ^-) получена лучшая корреляция? Предложите механизм реакции.

- 3) Присоединение HCN к замещенным бензальдегидам можно представить двумя механизмами:



Установленное значение постоянной серии ρ 2.33. Сделайте выбор в пользу одного их механизмов: *a* или *b*.

- 4) В каких молекулярных системах – 2-диметиламинобензонитрил, 2-диметиламинометилбензонитрил, 2-диметиламино-3,5-диизопропилбензонитрил, 2-(2-диметиламиновинил)бензонитрил – возможно прямое полярное сопряжение?
- 5) Приведите уравнение Грюнвальда-Уинштейна.
- 6) Некоторая реакция характеризуется энергией активации 5 кДж/моль. Во сколько раз эта реакция протекает быстрее в межзвёздном (40 К), чем в межгалактическом пространстве (10 К)?
- 7) Какие продукты получаются при взаимодействии антрацена с малеиновым ангидридом? Напишите уравнение реакции. Рассмотрите ее механизм.

Правила выставления оценки по результатам самостоятельной работы:

Оценка по результатам самостоятельной работы считается в баллах по каждому заданию по следующему принципу:

0 баллов – выполнено правильно менее половины задания; 1 балл – задание правильно выполнено более чем на половину; 2 балла – полное выполнение задания.

Максимальное количество баллов за работу – 14.

Набранное количество баллов 12-14 соответствует оценке «отлично», 10-11 баллов – оценке «хорошо», 8-9 баллов – оценке «удовлетворительно», менее 5 баллов – оценке «неудовлетворительно» (умения и навыки на данном этапе освоения дисциплины не сформированы).

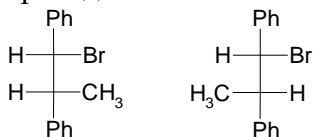
Самостоятельная работа № 5

(проверка сформированности ПК-б-н, индикатор ПК-б-н.1)

Примеры заданий:

- 1) Какие факторы кроме электронных эффектов заместителей влияют на реакционную способность аренов в реакциях нуклеофильного замещения?
- 2) Приведите примеры реакций, в которых пространственные эффекты заместителей уменьшают скорость процесса.
- 3) Как изменяется сила алифатических кислот с увеличением объема заместителя?
- 4) Приведите уравнение Тафта

- 5) Приведите примеры реакций, в которых пространственные эффекты заместителей увеличивают скорость процесса.
- 6) Гидролиз 4-хлорбутанола в воде протекает с высокой скоростью и приводит к тетрагидрофурану. 2-Хлорэтанол и 3-хлорбутанол дают в этих условиях диолы и реагируют медленнее. Дайте объяснение.
- 7) Предскажите стереохимический результат реакций элиминирования в условиях E1 и E2 приведенных ниже соединений



Правила выставления оценки по результатам самостоятельной работы:

Оценка по результатам самостоятельной работы считается в баллах по каждому заданию по следующему принципу:

0 баллов – выполнено правильно менее половины задания; 1 балл – задание правильно выполнено более чем на половину; 2 балла – полное выполнение задания.

Максимальное количество баллов за работу – 14.

Набранное количество баллов 12-14 соответствует оценке «отлично», 10-11 баллов – оценке «хорошо», 8-9 баллов – оценке «удовлетворительно», менее 5 баллов – оценке «неудовлетворительно» (умения и навыки на данном этапе освоения дисциплины не сформированы).

Правила выставления оценки по результатам лабораторной работы:

- *Отлично* выставляется, если обучающийся имеет глубокие знания учебного материала по теме лабораторной работы, показывает усвоение взаимосвязи основных понятий используемых в работе, смог ответить на все уточняющие и дополнительные вопросы, демонстрирует знания теоретического и практического материала по теме лабораторной работы, определяет взаимосвязи между показателями задачи, даёт правильный алгоритм решения, определяет междисциплинарные связи по условию задания.

- *Хорошо* выставляется, если обучающийся показал знание учебного материала, усвоил основную литературу, смог ответить почти полно на все заданные дополнительные и уточняющие вопросы. Обучающийся демонстрирует знания теоретического и практического материала по теме лабораторной работы, допуская незначительные неточности при решении задач, имея неполное понимание междисциплинарных связей при правильном выборе алгоритма решения задания.

- *Удовлетворительно* выставляется, если обучающийся в целом освоил материал лабораторной работы, ответил не на все уточняющие и дополнительные вопросы, обучающийся затрудняется с правильной оценкой предложенной задачи, даёт неполный ответ, требующий наводящих вопросов преподавателя, выбор алгоритма решения задачи возможен при наводящих вопросах преподавателя.

- *Неудовлетворительно* выставляется обучающемуся, если он имеет существенные пробелы в знаниях основного учебного материала лабораторной работы, который полностью не раскрыл

Фонды оценочных средств по дисциплине предусматривают проверку индикаторов достижения компетенций

2. Список вопросов и (или) заданий для проведения промежуточной аттестации

Список вопросов к зачету

1. Основные типы реакций органических соединений: перегруппировки, рекомбинация и диссоциация, бимолекулярное замещение, перенос электрона.
2. Деление реакций на нуклеофильные, электрофильные и гомолитические.
3. Общая классификация механизмов. Понятие о переходном состоянии.
4. Стадии изучения механизма реакций: материальный баланс, кинетика, стереохимические корреляции, изотопные и структурные метки, влияние заместителей, растворителя, катализаторов, поиск нестабильных интермедиатов.
5. Термодинамические параметры реакций. Величина энтропии активации для реакций разных типов.
6. Понятие о кинетическом и термодинамическом контроле реакций.
7. Уравнение Гаммета. Константы заместителей и константы реакций, их знак и абсолютная величина.
8. Стерические эффекты. Уравнение Тафта. Соотношение линейности свободных энергий в исследовании переходного состояния.
9. Классификация перициклических реакций. Их стереохимия.
10. Реакции замещения в алифатическом ряду.
11. Реакции замещения в ароматических соединениях.
12. Экспериментальные методы кинетического исследования.
13. Эффекты среды и механизмы реакций.
14. Использование изотопных эффектов при исследовании механизмов органических реакций.
15. Связь строения органических соединений с их реакционной способностью и её роль в установлении механизма реакции
16. Оценка относительной реакционной способности органических соединений методом конкурирующих реакций.
17. Квантовохимический подход к характеристике реакционной способности органических соединений

Зачет выставляется по результатам контрольной работы, включающей по два вопроса из каждой темы, при условии набора по итогам ее выполнения студентом с одной попытки не менее 6 баллов.

Правила выставления оценки по результатам итоговой контрольной:

Оценка по результатам итоговой контрольной считается в баллах по каждому заданию по следующему принципу:

0 баллов – выполнено правильно менее половины задания; 1 балл – задание правильно выполнено более чем на половину; 2 балла – полное выполнение задания.

Максимальное количество баллов за работу – 10.

Набранное количество баллов 10 соответствует оценке «отлично», 8-9 баллов – оценке «хорошо», 6-7 баллов – оценке «удовлетворительно», менее 6 баллов – оценке «неудовлетворительно».

Приложение №2 к рабочей программе дисциплины «Методы исследования механизма органических реакций»

Методические указания для студентов по освоению дисциплины

Основной формой изложения учебного материала по дисциплине «Методы исследования механизма органических реакций» являются лекции. По всем темам предусмотрены лабораторные занятия, на которых происходит закрепление лекционного материала путем применения его к конкретным химическим задачам и отработка навыков работы с химическими реактивами, проведения химических реакций и интерпретации их результатов.

Для успешного освоения дисциплины очень важно решение достаточно большого количества задач по механизмам химических реакций, как в аудитории, так и самостоятельно в качестве самостоятельных заданий. Примеры решения заданий разбираются на лекциях и лабораторных занятиях, при необходимости по наиболее трудным темам проводятся дополнительные консультации. Основная цель выполнения заданий – помочь усвоить фундаментальные понятия и основы теоретической органической химии. Для решения всех заданий необходимо знать и понимать лекционный материал. Поэтому в процессе изучения дисциплины рекомендуется регулярное повторение пройденного лекционного материала. Материал, законспектированный на лекциях, необходимо дома еще раз проработать и при необходимости дополнять информацией, полученной на консультациях, лабораторных занятиях или из учебной литературы.

Большое внимание должно быть уделено выполнению отчетов о выполненных лабораторных исследованиях. В качестве заданий для самостоятельной работы дома студентам предлагаются задания, аналогичные разобранным на лекциях и лабораторных занятиях или немного более сложные, которые являются результатом объединения нескольких базовых задач.

В конце изучения дисциплины студенты сдают зачет. Он принимается по результатам контрольной работы, включающей по три вопроса из каждой темы. На самостоятельную подготовку к зачету выделяется 3 дня.

Для подбора учебной литературы рекомендуется использовать ряд интернет-ресурсов:

1. http://www.lib.uni-yar.ac.ru/opac/bk_cat_find.php. Электронная библиотека учебных материалов ЯрГУ: более 3000 полных текстов учебных и учебно-методических материалов по основным изучаемым дисциплинам, изданных в университете.

2. <http://urait.ru>. Электронно-библиотечная система «Юрайт»: мультидисциплинарный ресурс (учебная, научная и художественная литература, периодика)

3. <http://window.edu.ru/catalog>. Информационная система "Единое окно доступа к образовательным ресурсам": свободный доступ к интегральному каталогу образовательных интернет-ресурсов и к электронной библиотеке учебно-методических материалов для общего и профессионального образования.