

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РФ
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«ДАГЕСТАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
Химический факультет

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
СОХРАНЕНИЕ ОРБИТАЛЬНОЙ СИММЕТРИИ В РЕАКЦИЯХ
ЦИКЛООБРАЗОВАНИЯ И ЦИКЛОПРИСОЕДИНЕНИЯ

Кафедра физической и органической химии
химического факультета

Образовательная программа
04.04.01 Химия

Профиль подготовки: «**Органическая химия**»

Уровень высшего образования: **магистратура**

Форма обучения: **Очная**

Статус дисциплины: **вариативная по выбору**

Махачкала, 2016 г.

Рабочая программа дисциплины **“Сохранение орбитальной симметрии в реакциях циклообразования и циклоприсоединения”** составлена в 2016 году в соответствии с требованиями ФГОС ВО по направлению подготовки 04.04.01 Химия (уровень магистратура) от «23» сентября 2015 г. № 1042.

Разработчик: кафедра физической и органической химии, Шабанов О.М., д.х.н., профессор

Рабочая программа дисциплины одобрена:
на заседании кафедры физической и органической химии
от «4» 09 2016г., протокол № I

Зав. кафедрой И.М. Абдулагатов проф. Абдулагатов И.М.
(подпись)

на заседании Методической комиссии Химического факультета от
«23» 09 2016г., протокол № I.

Председатель М.А. Бабуев Бабуев М.А.
(подпись)

Рабочая программа дисциплины согласована с учебно-методическим
управлением «23» 09 2016г. И.М. Абдулагатов
(подпись)

Дисциплина “Сохранение орбитальной симметрии в реакциях циклообразования и циклоприсоединения” входит в вариативную часть дисциплин по выбору образовательной программы *магистратуры* 04.04.01 Химия.

Дисциплина реализуется на химическом факультете кафедрой физической и органической.

Содержание дисциплины охватывает круг вопросов, связанных с подготовкой магистра химии по профилю органическая химия, свободно владеющего теоретическими и практическими основами органической химии и квантовой химии, в частности распределением электронной плотности на атомах и связях органических молекул, установлением симметрии молекулярных орбиталей (МО), позволяющих предсказать реакционную способность и механизмы реакций в решении научно-исследовательских задач.

Дисциплина нацелена на формирование следующих профессиональных компетенций выпускника: ПК-2, ПК-3.

Преподавание дисциплины предусматривает проведение следующих видов учебных занятий: *лекции, лабораторные занятия.*

Рабочая программа дисциплины предусматривает проведение следующих видов контроля успеваемости в форме *отчетов по лабораторным работам, контрольных работ и коллоквиумов, устный опрос, письменный опрос, тестирование* и промежуточный контроль в форме зачета и экзамена.

Объем дисциплины 4 зачетные единицы, в том числе в академических часах по видам учебных занятий:

Семестр	Учебные занятия в том числе						СРС, в том числе экзамен	Форма промежуточной аттестации (зачет, дифференцированный зачет, экзамен)
	Контактная работа обучающихся с преподавателем							
	Всего	из них						
Лекции		Лабораторные занятия	Практические занятия	КСР	Консульт			
4	144	10	20	-	-	-	78+36	экзамен

1. Цели освоения дисциплины

Целью изучения дисциплины “Сохранение орбитальной симметрии в

реакциях циклообразования и циклоприсоединения” является:

- сформировать у студентов навыки квантово-химических расчетов волновых функций МО;
- устанавливать симметрию МО исходных молекул и продуктов реакций;
- умение рассчитывать электронные плотности атомов и связей и индексы свободной валентности атомов;
- механизмы электроциклических и перициклических реакций при термическом и фотохимическом инициировании;
- механизмы перициклических реакций при термическом и фотохимическом инициировании;

2. Место дисциплины в структуре ООП магистратуры

Дисциплина “Сохранение орбитальной симметрии в реакциях циклообразования и циклоприсоединения” входит в вариативную часть дисциплин по выбору образовательной программы *магистратуры* 04.04.01 Химия.

Курс “Сохранение орбитальной симметрии в реакциях внутримолекулярной циклизации и циклоприсоединения” предусматривает применение обучающимися студентами квантово-химических методов определения электронного строения молекул, симметрии молекул и МО, распределения электронов по атомам и связям для предсказания и объяснения механизмов реакций в различных условиях. Курс предполагает успешное освоение предыдущих курсов «Органическая химия», «Квантовая механика и квантовая химия», «Теория симметрии и ее применение в химии».

3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины (перечень планируемых результатов обучения) .

Компетенции	Формулировка компетенции из ФГОС ВО	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций)
ПК-2	владение теорией и навыками практической работы в избранной области химии	Имеет четкое, целостное представление об общих закономерностях смежных с химией естественнонаучных дисциплин и способах их использования при решении профессиональных задач в области химии и материаловедения
ПК-3	готовность использовать современную аппаратуру при проведении научных исследований	В полном объеме владеет навыками многостадийного синтеза, основными методами диагностики веществ (материалов) и методами обработки результатов эксперимента

4. Объем, структура и содержание дисциплины.

4.1. Объем дисциплины составляет 4 зачетных единиц, 144 академических часа.

4.2. Структура дисциплины.

№ п/п	Разделы и темы дисциплины	се-местр	Не-деля семестра	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу студентов и трудоемкость (в часах)				Само-стоя-тель-ная ра-бота	Формы текущего контроля успеваемости (по неделям семестра) Форма промежуточной аттестации (по семестрам)
				Лек.	Практ. зан.	Лаб. занятия			
Модуль 1. Симметрия молекул и молекулярных орбиталей									
1	Симметрия МО линейных полиенов и циклоалкенов и их МО	3	2	2		4		30	Устный опрос, письменный опрос, тестирование
	<i>Итого по модулю 1:</i>	36		2		4		30	коллоквиум
Модуль 2. Сохранение орбитальной симметрии в перициклических реакциях									
2	Сохранение орбитальной симметрии в реакциях циклоприсоединения $4q$ и $4q+2$	3	5	2		4			Устный опрос, письменный опрос, тестирование
3	Разрешенные реакции в зависимости от числа π -электронов	3	6	2		4			Устный опрос, письменный опрос, тестирование
	<i>Итого по модулю 2:</i>	36		4		8		24	коллоквиум
Модуль 3. Сохранение орбитальной симметрии в электроциклических реакциях									
4	Сохранение орбитальной симметрии в электроциклических реакциях $4q$ и $4q+2$	3	7	2		4		16	Устный опрос, письменный опрос, тестирование
5	Разрешенные реакции в зависимости от числа π -электронов	3	8	2		4		14	Устный опрос, письменный опрос, тестирование
	<i>Итого по модулю 3:</i>	36		4		8		24	коллоквиум
6	Модуль 4. Подготовка к экзамену							36	Экзамен
	<i>Итого по модулю 4:</i>	36				-		36	
	<i>Итого:</i>	144		10		20		78+36	Экзамен

4.3. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам).

Модуль 1. Симметрия молекул и молекулярных орбиталей

Тема 1. Симметрия МО линейных полиенов и циклоалкенов и их МО

Модуль 2. Сохранение орбитальной симметрии в перициклических реакциях

Тема 2. Сохранение орбитальной симметрии в реакциях циклоприсоединения $4q$ и $4q+2$

Тема 3. Разрешенные реакции в зависимости от числа π -электронов

Модуль 4. Сохранение орбитальной симметрии в электроциклических реакциях

Модуль 3. Сохранение орбитальной симметрии в электроциклических реакциях

Тема 5. Сохранение орбитальной симметрии в электроциклических реакциях $4q$ и $4q+2$

Тема 6. Разрешенные реакции в зависимости от числа π -электронов

Лабораторные работы

Целью лабораторных занятий является:

- освоение методов построения МО симметрии линейных и циклических полиенов и их замещенных молекул;
- установление симметрии молекул и молекулярных орбиталей исходных молекул и продуктов реакций;
- сохранение орбитальной симметрии в перициклических и электроциклических реакциях
- разрешенные по орбитальной симметрии реакции циклоприсоединения в зависимости от общего числа π -электронов;
- разрешенные по орбитальной симметрии электроциклические в зависимости от общего числа π -электронов.

№ и названия разделов и тем	Цель и содержание лабораторной работы	Результаты лабораторной работы
Лабораторная работа № 1. Симметрия молекул и молекулярных орбиталей		
Модуль 1. Симметрия МО линейных полиенов и циклоалкенов и их МО Тема 1. Симметрия МО линейных полиенов, циклоалкенов и их МО	Элементы симметрии и операции и линейных полиенов $C_n H_{n+2}$, циклоалкенов $C_n H_{3n-2}$ и их молекулярных орбиталей	Симметрия линейных полиенов, циклоалкенов и циклоалкадиенов и их МО
Лабораторная работа № 2. Симметрия молекул и их орбиталей		
Модуль 2. Сохранение орбитальной симметрии в перициклических реакциях Тема 1. Сохранение орбитальной симметрии в реакциях циклоприсоединения	Сохранение орбитальной симметрии в реакциях циклоприсоединения циклоприсоединения с π -электронами $4q$	Разрешенные термические и фотохимические реакции циклоприсоединения $4q$

$4q$		
Лабораторная работа № 3. Сохранение орбитальной симметрии в реакциях циклоприсоединения $4q + 2$		
Модуль 2. Сохранение орбитальной симметрии в перициклических реакциях Тема 2. Сохранение орбитальной симметрии в реакциях циклоприсоединения $4q + 2$	Сохранение орбитальной симметрии в реакциях циклоприсоединения с π -электронами $4q + 2$	Разрешенные термические и фотохимические реакции циклоприсоединения $4q + 2$
Лабораторная работа № 4. Сохранение орбитальной симметрии в электроциклических реакциях с π -электронами $4q$		
Модуль 3. Сохранение орбитальной симметрии в электроциклических реакциях Тема 1. Сохранение орбитальной симметрии в электроциклических реакциях $4q$	Сохранение орбитальной симметрии в реакциях внутримолекулярной циклизации с π -электронами $4q$	Разрешенные термические и фотохимические реакции внутримолекулярной циклизации $4q$
Лабораторная работа № 5. Сохранение орбитальной симметрии в электроциклических реакциях с π -электронами $4q + 2$		
Модуль 2. Сохранение орбитальной симметрии в перициклических и электроциклических реакциях Тема 2. Сохранение орбитальной симметрии в реакциях внутримолекулярной циклизации полиенов $4q + 2$	Сохранение орбитальной симметрии в реакциях внутримолекулярной циклизации с π -электронами $4q + 2$	Установление разрешенных по симметрии реакций $4q + 2$ внутримолекулярной циклизации термически и фотохимически

5. Образовательные технологии

В курсе по направлению подготовки магистров широко используются в учебном процессе компьютерные программы, различные методики в сочетании с внеаудиторной работой с целью формирования и развития профессиональных навыков обучающихся. В соответствии с требованиями ФГОС предусматривается использование при проведении занятий следующих активных методов обучения:

- самостоятельное изучение теоретического материала с последующим разбором на семинарском занятии;
- подготовка к лабораторным работам;

- оформление результатов лабораторной работы;
- подготовка к промежуточному контролю;
- подготовка к экзамену.

6. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов

6.1. Виды и порядок выполнения самостоятельной работы

1. Изучение рекомендованной литературы.
2. Подготовка к отчетам по лабораторным работам.
3. Решение задач.
4. Подготовка к коллоквиуму.
5. Поиск в Интернете дополнительного материала.
6. Подготовка к экзамену.

№	Вид самостоятельной работы	Вид контроля	Учебно-методич. обеспечение
1.	Изучение рекомендованной литературы.	Устный опрос по разделам дисциплины.	См. разделы 7.3, 8, 9 данного документа.
2.	Подготовка к отчетам по лабораторным работам	Проверка выполнения расчетов, оформления работы в лабораторном журнале и проработки вопросов к текущей теме по рекомендованной литературе.	См. разделы 7.3, 8, 9 данного документа.
3.	Решение задач	Проверка домашних задач.	См. разделы 7.3, 8, 9 данного документа.
4.	Подготовка к коллоквиуму	Промежуточная аттестация в форме контрольной работы.	См. разделы 7.3, 8, 9 данного документа.
5.	Поиск в Интернете дополнительного материала	Прием реферата и выступление с докладом	См. разделы 6.2, 7.3, 8, 9 данного документа.
6.	Подготовка к экзамену	Устный опрос, либо компьютерное тестирование.	См. разделы 7.3, 8, 9 данного документа.

1. Текущий контроль: подготовка к отчетам по лабораторным работам.
2. Текущий контроль: решение задач.
3. Промежуточная аттестация в форме контрольной работы.

Текущий контроль успеваемости осуществляется непрерывно, на протяжении всего курса. Прежде всего, это устный опрос по ходу лабораторных занятий, выполняемый для оперативной активизации внимания студентов и оценки их уровня восприятия. Результаты устного опроса учитываются при выборе индивидуальных задач для решения. Каждую неделю осуществляется проверка выполнения расчетов, оформления работы в лабораторном журнале.

Промежуточный контроль проводится в форме контрольной работы, в которой содержатся теоретические вопросы и задачи.

Итоговый контроль проводится либо в виде устного экзамена, либо в форме тестирования.

Оценка “отлично” ставится за уверенное владение материалом курса.

Оценка “хорошо” ставится при полном выполнении требований к прохождению курса и умении ориентироваться в изученном материале.

Оценка “удовлетворительно” ставится при достаточном выполнении требований к прохождению курса и владении конкретными знаниями по программе курса.

Оценка “неудовлетворительно” ставится, если требования к прохождению курса не выполнены и студент не может показать владение материалом.

6.2. Примерные темы рефератов

1. Приближенные методы в квантовой химии.
2. Методы МО ЛКАО и расширенный метод Хюккеля (PMX).
3. Закономерности в энергии МО линейных полиенов, нейтральных аннуленов, циклоалкенов и циклоалкадиенов.
4. Симметрия молекул линейных полиенов, нейтральных аннуленов, циклоалкенов и циклоалкадиенов.
5. Симметрия молекулярных орбиталей линейных полиенов, нейтральных аннуленов, циклоалкенов и циклоалкадиенов.
6. Реакции Дильса-Алдера при различных количествах π -электронов.
7. Реакции внутримолекулярной циклизации линейных полиенов.
8. Истинные пути циклоприсоединения.
9. Истинные пути внутримолекулярной циклизации полиенов.
10. Механизм реакции циклоприсоединения в основном электронном состоянии.
11. Механизм фотохимических реакций циклоприсоединения при различных числах π -электронов.
12. Механизм внутримолекулярной циклизации в основном электронном состоянии.
11. Механизм внутримолекулярной циклизации фотохимических реакций при различных числах π -электронов.
12. Сохранение орбитальной симметрии в реакциях внутримолекулярной циклизации.
13. Сохранение орбитальной симметрии в реакциях циклоприсоединения.
14. Стереоспецифичность электроциклических реакций, протекающих термически или фотохимически при различных количествах π -электронов.
15. Стереоспецифичность перициклических реакций, протекающих термически или фотохимически при различных количествах π -электронов.
16. Роль граничных орбиталей (ВЗМО и НСМО) при протекании химических реакций.
17. Правило непересечения энергетических уровней.
18. Корреляционная диаграмма молекулярных орбиталей исходных молекул и продуктов реакции.

19. Конротаторная и дисротаторная циклизация.

20. Циклизация гексатриена.

7. Фонд оценочных средств для проведения текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины.

7.1. Перечень компетенций с указанием этапов их формирования в процессе освоения образовательной программы.

Перечень компетенций с указанием этапов их формирования приведен в описании образовательной программы.

Компетенция	Знания, умения, навыки	Процедура освоения
ПК-2	Знать: - основы квантовой механики, - обобщенные закономерности смежных с химией естественно-научных дисциплин и способах их использования при решении профессиональных задач в органической химии.	Устный опрос, письменный опрос, тестирование
	Уметь: - строить молекулярные молекулы в методах МО ЛКАО и МОХ, - устанавливать симметрию МО исходных веществ, переходного состояния и продуктов реакции.	Письменный опрос, коллоквиум
ПК-3	Владеть: - учебной, научной и справочной литературой в изучаемой области - владением теорией и навыками практической работы в избранной области химии	Круглый стол, деловая игра
	Знать: - теоретические основы органической, физической и квантовой химии, - современные квантово-химические методы оценки реакционной способности органических соединений	Устный опрос, письменный опрос, тестирование
	Уметь: - использовать современную теорию сохранения орбитальной симметрии в перициклических реакций при проведении научных исследований; - применять индексы реакционной способности молекул для предсказания и объяснения механизмов реакций.	Письменный опрос, коллоквиум
	Владеть: - в полном объеме теорией стереоспецифичности перициклических реакций.	Круглый стол, деловая игра

7.2. Описание показателей и критериев оценивания компетенций, описание шкал оценивания.

ПК-2 – “Владение теорией и навыками практической работы в избранной области химии”

Уровень	Показатели (что обучающийся должен продемонстрировать)	Оценочная шкала		
		Удовлетворительно	Хорошо	Отлично
пороговый	Знать: -приближенные методы квантовой химии, - решающее значение электронных параметров атомов и связей в установлении направления реакций.	Знать: - общие закономерности смежных с химией естественных дисциплин	Знать: - современные направления в области органической и квантовой химии органических соединений.	Знать: - современные направления в области органической и квантовой химии, - общие закономерности смежных с химией естественных дисциплин
	Уметь: - оценивать возможности квантовой химии в оценке реакционной способности органических соединений.	Уметь: - оценивать возможности получения индексов реакционной способности молекул	Уметь: - оценивать возможности современных методов теоретического анализа	Уметь: - оценивать возможности современных теоретических методов анализа реакционной способности молекул и механизмов реакций..
	Владеть: - учебной, научной и справочной литературой в изучаемой области - владением теорией и навыками практической работы в избранной области химии	Владеть: - учебной, научной и справочной литературой в изучаемой области	Владеть: - учебной, научной и справочной литературой в изучаемой области	Владеть: - учебной, научной и справочной литературой в изучаемой области - теорией и навыками практической работы
базовый	Знать: -приближенные методы квантовой химии, - решающее значение электронных параметров атомов и связей в установлении направления реакций.	Знать: - общие закономерности смежных с химией естественных дисциплин	Знать: - современные направления в области органической и квантовой химии органических соединений.	Знать: - современные направления в области органической и квантовой химии, - общие закономерности смежных с химией естественных дисциплин
	Уметь: - оценивать возможности квантовой химии в оценке реакционной способности органических соединений.	Уметь: - оценивать возможности получения индексов реакционной способности	Уметь: - оценивать возможности современных методов теоретического анализа	Уметь: - оценивать возможности современных теоретических методов анализа реакционной способности молекул и ме-

		молекул		ханизмов реак- ций..
	Владеть: - учебной, научной и справочной литературой в изучаемой области - владением теорией и навыками практической работы в избранной области химии	Владеть: - учебной, научной и справочной литературой в изучаемой области	Владеть: - учебной, научной и справочной литературой в изучаемой области	Владеть: - учебной, научной и справочной литературой в изучаемой области - теорией и навыками практической работы
про- двину тый	Знать: -приближенные методы квантовой химии, - решающее значение электронных параметров атомов и связей в установлении направления реакций.	Знать: - общие закономерности смежных с химией естественнонаучных дисциплин	Знать: - современные направления в области органической и квантовой химии органических соединений.	Знать: - современные направления в области органической и квантовой химии, - общие закономерности смежных с химией естественнонаучных дисциплин
	Уметь: - оценивать возможности квантовой химии в оценке реакционной способности органических соединений.	Уметь: - оценивать возможности получения индексов реакционной способности молекул	Уметь: - оценивать возможности современных методов теоретического анализа	Уметь: - оценивать возможности современных теоретических методов анализа реакционной способности молекул и механизмов реакций..
	Владеть: - учебной, научной и справочной литературой в изучаемой области - владением теорией и навыками практической работы в избранной области химии	Владеть: - учебной, научной и справочной литературой в изучаемой области	Владеть: - учебной, научной и справочной литературой в изучаемой области	Владеть: - учебной, научной и справочной литературой в изучаемой области - теорией и навыками практической работы

ПК-3 «Готовность использовать современную аппаратуру при проведении научных исследований».

Уро- вень	Показатели (что обучающийся должен продемонстрировать)	Оценочная шкала		
		Удовлетвори- тельно	Хорошо	Отлично
поро- говый	Знать: - теоретические основы органической и физической химии,	знает: - в значительном объеме основные за-	знает: - теоретические основы современной	знает: - теоретические основы органической и физиче-

	- современные квантово-химические методы оценки реакционной способности органических соединений	коны органической и физической химии,	органической, физической и квантовой химии в хорошем объеме	ской и химии, - современные квантовохимические методы оценки реакционной способности молекул
	Уметь: - использовать современную теорию сохранения орбитальной симметрии при проведении научных исследований; -проводить качественную и количественную оценку влияния различных факторов на механизмы химических реакций.	Уметь: - использовать современную теорию сохранения орбитальной симметрии при проведении научных исследований;	Уметь: - использовать современные теоретические методы; -проводить качественную оценку влияния различных факторов на механизмы реакций.	Уметь: - использовать современные теоретические методы при проведении научных исследований; -проводить качественную и количественную оценку влияния различных факторов на механизмы реакций
	Владеть: - в полном объеме владеет навыками многостадийного синтеза, основными методами диагностики веществ и методами обработки результатов расчетов и эксперимента	Владеть: -в переданном объеме навыками многостадийного синтеза желанных соединений	Владеть: - навыками многостадийного синтеза с учетом теоретических расчетов	Владеть: - в полном объеме владеет навыками многостадийного синтеза с учетом симметрии молекулярных орбиталей.
базовый	Знать: - теоретические основы органической и физической химии, - современные квантово-химические методы оценки реакционной способности органических соединений	знает: - в значительном объеме основные законы органической и физической химии,	знает: - теоретические основы современной органической, физической и квантовой химии в хорошем объеме	знает: - теоретические основы органической и физической химии, - современные квантовохимические методы оценки реакционной способности молекул
	Уметь: - использовать современную теорию сохранения орбитальной симметрии при проведении научных исследований;	Уметь: - использовать современную теорию сохранения орбиталь-	Уметь: - использовать современные теоретические методы;	Уметь: - использовать современные теоретические методы при проведении научных ис-

	-проводить качественную и количественную оценку влияния различных факторов на механизмы химических реакций.	ной симметрии при проведении научных исследований;	-проводить качественную оценку влияния различных факторов на механизмы реакций.	следований; -проводить качественную и количественную оценку влияния различных факторов на механизмы реакций
	Владеть: - в полном объеме владеет навыками многостадийного синтеза, основными методами диагностики веществ и методами обработки результатов расчетов и эксперимента	Владеть: - в переделенном объеме навыками многостадийного синтеза желанных соединений	Владеть: - навыками многостадийного синтеза с учетом теоретических расчетов	Владеть: - в полном объеме владеет навыками многостадийного синтеза с учетом симметрии молекулярных орбиталей.
продвинутый	Знать: - теоретические основы органической и физической химии, - современные квантово-химические методы оценки реакционной способности органических соединений	знает: - в значительном объеме основные законы органической и физической химии,	знает: - теоретические основы современной органической, физической и квантовой химии в хорошем объеме	знает: - теоретические основы органической и физической химии, - современные квантовохимические методы оценки реакционной способности молекул
	Уметь: - использовать современную теорию сохранения орбитальной симметрии при проведении научных исследований; -проводить качественную и количественную оценку влияния различных факторов на механизмы химических реакций.	Уметь: - использовать современную теорию сохранения орбитальной симметрии при проведении научных исследований;	Уметь: - использовать современные теоретические методы; -проводить качественную оценку влияния различных факторов на механизмы реакций.	Уметь: - использовать современные теоретические методы при проведении научных исследований; -проводить качественную и количественную оценку влияния различных факторов на механизмы реакций
	Владеть: - в полном объеме владеет навыками многостадийного синтеза, основными методами диагностики веществ и методами обработки результатов расчетов и эксперимента	Владеть: - в переделенном объеме навыками многостадийного синтеза желанных соединений	Владеть: - навыками многостадийного синтеза с учетом теоретических расчетов	Владеть: - в полном объеме владеет навыками многостадийного синтеза с учетом симметрии молекулярных орбиталей.

7.3. Типовые контрольные задания

Формы контроля и критерии оценок

Формы контроля: текущий контроль (систематический учет знаний и активность студентов на занятиях), промежуточный контроль по модулю (рубежная контрольная работа по пройденному блоку тем) и итоговой контроль (экзамен). Текущий контроль осуществляется в виде устного опроса, тестирования, проведения коллоквиума, обсуждения реферата, проверки домашнего задания.

Оценка текущего контроля включает 70 баллов:

- допуск к выполнению лабораторных работ (10 баллов);
- выполнение и сдача лабораторных работ (20 баллов);
- тестирование (10 баллов);
- выполнение контрольной работы (с включением задач) – 20 баллов.

Промежуточный контроль (в виде контрольной работы или коллоквиума) оценивается в 30 баллов.

Итоговый контроль (100 баллов) проводится в виде устного собеседования или в виде письменного теста, содержащего вопросы по всем разделам курса “Сохранение орбитальной симметрии в реакциях циклообразования и циклоприсоединения” изучавшим в процессе семестра. Среднее число баллов по всем модулям, которое дает право получения положительной оценки без итогового контроля знаний – 51 и выше.

Типовые тесты

1. Метод молекулярных орбиталей Хюккеля позволяет рассчитывать

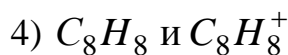
- 1) энергии молекулярных орбиталей
- 2) электронные плотности
- 3) геометрию молекулы
- 4) симметрию молекулы

2. Орбитальные энергии для метиленициклопропена в методе МОХ равны:
 $E_1 = \alpha + 2,17\beta$; $E_2 = \alpha + 0,311\beta$; $E_3 = \alpha - \beta$; $E_4 = \alpha - 1,481\beta$. Вычислите полную π -электронную энергию W

- 1) $W = 4\alpha + 4,962\beta$
- 2) $W = 2\alpha + 2,981\beta$
- 3) $W = 4\alpha - 4,962\beta$
- 4) $W = 2\alpha - 2,981\beta$

3. Какой нейтральный аннулен (C_nH_n) или ион при $6 < n < 12$ проявляют ароматичность?

- 1) $C_7H_7^+$ и $C_{10}H_{10}$
- 2) $C_7H_7^-$ и C_9H_9
- 3) C_7H_7 и $C_{10}H_{10}^-$



4. Для низшей МО бутадиена $\varphi_1 = 0,372\varphi_1 + 0,602\varphi_2 + 0,602\varphi_3 + 0,372\varphi_4$. На основании теорем об АУ напишите, чему равна φ_4

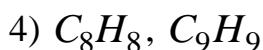
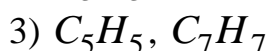
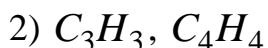
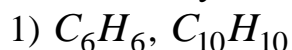
1) $\varphi_4 = 0,372\varphi_1 - 0,602\varphi_2 + 0,602\varphi_3 - 0,372\varphi_4$

2) $\varphi_4 = 0,372\varphi_1 + 0,602\varphi_2 - 0,602\varphi_3 - 0,372\varphi_4$

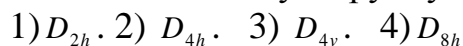
3) $\varphi_4 = 0,372\varphi_1 - 0,602\varphi_2 - 0,602\varphi_3 - 0,372\varphi_4$

4) $\varphi_4 = 0,372\varphi_1 + 0,602\varphi_2 + 0,602\varphi_3 + 0,372\varphi_4$

5. Какие аннулены по правилу Хюккеля являются ароматическими?



6. кажите точечную группу симметрии нафталина



7. При превращении бензола в пиридин сопровождается:

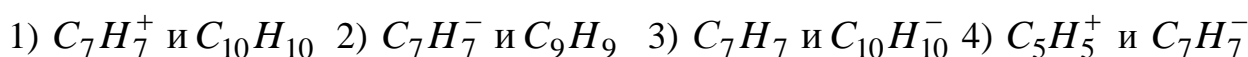
1) увеличением π -электронной плотности атомов 1, 3 и 5

2) уменьшением π -электронной плотности атомов 2, 4 и 6

3) увеличением π -электронной плотности атомов 2, 4 и 6

4) увеличением π -электронной плотности атомов 1, 3 и 5.

8. Какой нейтральный аннулен (C_nH_n) или ион при $6 < n < 12$ проявляют ароматичность?



9. При раскрытии определителя для линейного полиена в варианте простого метода Хюккеля получаются четыре корня:

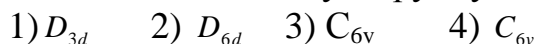
$x_1 = -1,618$; $x_2 = -0,618$; $x_3 = 0,618$; $x_4 = 1,618$. Чему равна полная π -электронная энергия молекулы?

1) $W = 4\alpha + 4,672\beta$ 2) $W = 9,344\beta$ 3) $W = 2\alpha + 2,336\beta$

10. Укажите точечную группу симметрии молекулы этилена.



11. Укажите точечную группу симметрии циклогексана



12. Почему нафталин подвергается галогенированию и нитрованию в α -положение?

1) Потому что в α -положении наибольший индекс свободной валентности.

2) Потому, что в α -положении наибольшая электронная плотность.

3) Потому, что в α -положении наименьшая электронная плотность.

4) Потому, что нафталин альтернантный углеводород.

13. Какой атом бутадиена (АУ) предпочтительный для нуклеофильной атаки.

- 1) 2-атом. 2) 3-атом. 3) 1-атом. 4) 4-атом
14. Укажите точечную группу симметрии циклогексена
- 1) C_i . 2) D_{6d} . 3) C_{6v} . 4) C_{6h}
15. Как можно охарактеризовать реакцию димеризации этилена?
- 1) Как возможную фотохимическую.
 2) Как возможную термически.
 3) Она разрешена в обоих условиях.
 4) Она не разрешена в обоих условиях.
16. Как можно охарактеризовать реакцию циклоприсоединения 1,3-бутадиена и этилена?
- 1) как разрешенную термически.
 2) Как разрешенную фотохимически
 3) Она разрешена в обоих условиях.
 4) Она не разрешена в обоих условиях
17. Как можно охарактеризовать реакцию циклизации бутадиена?
- 1) Как разрешенную термически
 2) Как разрешенную при конротаторном вращении.
 3) Как разрешенную фотохимически и
 4) при конротаторном вращении.
18. Как можно охарактеризовать реакцию циклизации гекстриена?
- 1) Как разрешенную термически
 2) при дисротаторном вращении.
 3) Как разрешенную при термически
 4) При конротаторном вращении.
19. Как можно охарактеризовать реакцию циклизации гекстриена?
- 1) Как разрешенную фотохимически
 2) Как разрешенную при конротаторном вращении.
 3) Как разрешенную при фотохимически и
 4) Как разрешенную при дисротаторном вращении.
20. Какие реакции относятся к перициклическим?
- 1) Реакции циклоприсоединения
 2) Реакции внутримолекулярной циклизации
 3) Реакции галогенирования.
 4) Реакции нитрования.

Контрольные вопросы к экзамену

1. Основные постулаты квантовой механики. Волновая функция. Средние значения наблюдаемых физических величин.
2. Вариационная теорема и вариационный принцип.
3. Метод МО ЛКАО. Простой и расширенный методы Хюккеля.
4. Метод МО. Энергии связывающей и разрыхляющей орбиталей – выразить через ϵ_{aa} , ϵ_{ab} и s_{ab}
5. Линейные полиены. Закономерности в МО и их энергиях.

6. Метод Хюккеля (МОХ) для молекул с гетероатомом. Сопоставить E_j для пар этилен- формальдегид, бутадиен- акролеин, метиленициклопропен - циклопропенон.
7. Электронные параметры атомов и связей в методе МОХ.
8. Теоремы об АУ (с иллюстрацией)
9. Поляризуемости атомов и связей. Расчет $\pi_{1,1}$ в молекуле бутадиена.
10. Индексы реакционной способности молекулы.
11. МО триметиленметана и вычисление индекса свободной валентности молекул.
12. Сохранение орбитальной симметрии в реакциях циклоприсоединения.
13. Сохранение орбитальной симметрии в реакциях внутримолекулярной циклизации.
14. Пути реакций внутримолекулярной циклизации.
15. Пути реакций циклоприсоединения.
16. Разрешенные по орбитальной симметрии термических реакций циклоприсоединения в зависимости от общего числа π -электронов.
17. Разрешенные по орбитальной симметрии фотохимических реакций циклоприсоединения в зависимости от общего числа π -электронов.
18. Разрешенные по орбитальной симметрии термических электроциклических реакций в зависимости от общего числа π -электронов.
19. Разрешенные по орбитальной симметрии фотохимических электроциклических реакций в зависимости от общего числа π -электронов.
20. Обобщенные правила отбора по симметрии для согласованных перициклических реакций.

8. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины.

а) основная литература

1. Я.Д. Самуилов, Е.Н. Черезова Реакционная способность органических соединений. Учебное пособие. Казань, 2003.
2. Шабанов О.М. Математические начала квантовой химии. - Махачкала, Изд-во «Эпоха», 2003.
3. Старостина Т.И., Зиновьева Т.И. Перициклические реакции и орбитальная симметрия. Новгород. 2010
4. О.М.Шабанов. Симметрия в органической химии. *ИПЦ ДГУ .2015.*

б) Дополнительная

1. Минкин В.И., Симкин Б.Я, Миняев Р.М. Теория строения молекул.- Изд-во «Феникс». Ростов-на-дону, 1997.
2. Хигаси К., Баба Х., Рембаум А. Квантовая органическая химия.- М: Мир, 1967.
3. Базилевский М. В. Метод молекулярных орбит и реакционная способность органических молекул. - М.: Химия, 1969.

4. Дьюар М. Теория молекулярных орбиталей в органической химии. - М.: Мир, 1972.
5. В. И. Минкин, Б.Я. Симкин, Р.М. Миняев. Квантовая химия органических соединений. Механизмы реакций. – М. : Химия. – 1986 – 246 с.

9. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины.

1. Электронные образовательные ресурсы образовательного сервера ДГУ elib.dgu.ru.
2. Зависимость реакционной способности органических соединений ... www.xumuk.ru/organika/36.html
3. Реакционная способность органических соединений - Справочник ... chem21.info/info/291920/
5. Строение и реакционная способность органических ... ido.tsu.ru/schools/chem/data/res/org/uchpos/text/1_1.html
6. www.chem.msu.su/rus/teaching/vorob'ev/2.html

10. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.

Методические указания студентам должны раскрывать рекомендуемый режим и характер учебной работы по изучению теоретического курса (или его раздела/части), практических и/или семинарских занятий, лабораторных работ (практикумов), и практическому применению изученного материала, по выполнению заданий для самостоятельной работы, по использованию информационных технологий и т.д. Методические указания должны мотивировать студента к самостоятельной работе и не подменять учебную литературу.

Указывается перечень учебно-методических изданий, рекомендуемых студентам для подготовки к занятиям и выполнения самостоятельной работы, а также методические материалы на бумажных и/или электронных носителях, выпущенные кафедрой своими силами и предоставляемые студентам во время занятий:

- рабочие тетради студентов;
- наглядные пособия;
- гlossарий (словарь терминов по тематике дисциплины);
- тезисы лекций,
- раздаточный материал и др.

Самостоятельная работа студентов, предусмотренная учебным планом в объеме не менее 50-70% общего количества часов, должна соответствовать более глубокому усвоению изучаемого курса, формировать навыки исследовательской работы и ориентировать студентов на умение применять теоретические знания на практике.

Задания для самостоятельной работы составляются по разделам и темам, по которым не предусмотрены аудиторские занятия, либо требуется дополнительно проработать и проанализировать рассматриваемый преподавателем материал в объеме запланированных часов.

Задания по самостоятельной работе могут быть оформлены в виде таблицы с указанием конкретного вида самостоятельной работы:

- конспектирование первоисточников и другой учебной литературы;
- проработка учебного материала (по конспектам лекций учебной и научной литературе) и подготовка докладов на семинарах и практических занятиях, к участию в тематических дискуссиях и деловых играх;
- работа с нормативными документами и законодательной базой;
- поиск и обзор научных публикаций и электронных источников информации, подготовка заключения по обзору;
- выполнение контрольных работ, творческих (проектных) заданий, курсовых работ (проектов);
- решение задач, упражнений;
- написание рефератов (эссе);
- работа с тестами и вопросами для самопроверки;
- выполнение переводов на иностранные языки/с иностранных языков;
- моделирование и/или анализ конкретных проблемных ситуаций ситуации;
- обработка статистических данных, нормативных материалов;
- анализ статистических и фактических материалов, составление выводов на основе проведенного анализа и т.д.

Самостоятельная работа должна носить систематический характер, быть интересной и привлекательной для студента.

Результаты самостоятельной работы контролируются преподавателем и учитываются при аттестации студента (зачет, экзамен). При этом проводятся: тестирование, экспресс-опрос на семинарских и практических занятиях, заслушивание докладов, проверка письменных работ и т.д.

Разделы и темы для самостоятельного изучения	Виды и содержание самостоятельной работы
Приближенные методы решения уравнения Шредингера. Метод МО ЛКАО. Метод МОХ. Построение молекулярных орбиталей линейных полиенов, аннуленов и их замещенных молекул. Расчеты электронных параметров атомов и связей. Молекулярные диаграммы индексов реакционной способности молекул.	Решить задачи по строению МО линейных полиенов, аннуленов. Учет симметрии молекул при построении МО симметрии в и их замещенных молекул.
Сохранение орбитальной симметрии в реакциях циклоприсоединения и в реакциях внутримолекулярной циклизации полиенов. Установление разрешенных реакций циклоприсоединения и циклизации полиенов в основном и электронно возбужденном состояниях.	Изучение условий и механизмов протекания реакций циклоприсоединения и в реакциях внутримолекулярной циклизации полиенов. Установления протекания этих реакций в основном и электронно возбужденном состояниях.

11. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине, включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем.

При осуществлении образовательного процесса по дисциплине наряду с традиционным чтением лекций используются информационно-коммуникационные технологии, аудитория оснащенная компьютером и видеопроектором, применяются презентации. Применяются методы активной и интерактивной форм обучения. Используется технология критического мышления, включающая знакомство с работами ведущих российских ученых, составлением конспектов, выполнением проблемного проекта. Представление проекта проходит в виде научной конференции на практическом занятии. Самостоятельная работа студентов заключается в написании рефератов с использованием современных публикаций и подготовке к экзамену.

12. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине.

Лаборатории кафедры оснащены установками для каталитического синтеза органических соединений, имеются лабораторные трансформаторы, бидистилляторы, рН- метр ЛП4-01, микроскопы, хроматограф - Хром -5, сушильные шкафы КС-65, реактивы, 3 компьютера и 2 узла Интернета, кондуктометры и спектрометры ИКС и КРС.

В соответствии с требованиями ГОС кафедра имеет специально оборудованные лаборатории для проведения лабораторных работ и учебные аудитории для проведения лекционных занятий по потокам студентов. Лекционные помещения укомплектованы техническими средствами обучения для проведения интерактивных занятий, в том числе и с доступом в интернет (экран настенный с электроприводом и дистанционным управлением, мультимедиа проектор с ноутбуком, проводной и дистанционный интернет). Обеспечение дисциплины осуществляется кафедрой физической и органической химии химического факультета и включает в себя приборы для физико-химического анализа (спектрофотометрия, кондуктометрия, газо-жидкостная хроматография и пр., вычислительная техника, химическое программное обеспечение (программы 3D Viever, MDL ISIS, 7.0 Origin, Hyper Chem 7.5, Gaussian 98, 03 и 09 и др). Научно-исследовательская работа проводится на кафедре физической и органической химии факультета, ее материальным техническим обеспечением является используемое кафедрой в процессе преподавания учебно-методическое обеспечение (компьютерный класс, видеопроекторы, учебное и лабораторное оборудование): Атомно-абсорбционный спектрометр, Contr AA-700, AnalytikJena, Германия; SPECORD 210 PlusBU, AnalytikJena, Германия; Система капиллярного электрофореза, Капель-105М, ЛЮМЕКС, Санкт-Петербург; Рентгеновский дифрактометр, EmpyreanSeries 2 Фирма Panalytical (Голландия); Дифференциальный сканирующий калориметр, NETZSCH STA 409 PC/PG, Германия; Лабораторная экстракционная система, SFE1000M1-2- FMC-50, Waters, США; Хромато-масс-спектрометр, 7820 Маэ-

стро, США, Россия; Высокоэффективный жидкостной хроматограф, Agilent 1220 Infinity, США. Для проведения качественных и количественных исследований кафедра так же пользуется центром коллективного пользования «Аналитическая спектроскопия» ДГУ.