

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ВОРОНЕЖСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
(ФГБОУ ВО «ВГУ»)

Заведующий кафедрой
органической химии



Х.С. Шихалиев
01.07.2021 г

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ
Б1.В.ДВ.03.02 Метод молекулярных орбиталей в органической химии

Код и наименование дисциплины в соответствии с учебным планом

1. Код и наименование направления подготовки/специальности:

04.04.01 Химия

2. Профиль подготовки/специализация: органическая химия

3. Квалификация выпускника: магистр

4. Форма обучения: очная

5. Кафедра, отвечающая за реализацию дисциплины: органической химии

6. Составители программы: Ковыгин Юрий Александрович. к.х.н.

(ФИО, ученая степень, ученое звание)

7. Рекомендована: Научно-методическим советом химического факультета, №5 от 17.06.2021

(наименование рекомендующей структуры, дата, номер протокола,

отметки о продлении вносятся вручную)

8. Учебный год: 2022-2023

Семестр(ы): 3

9. Цели и задачи учебной дисциплины

Цель изучения дисциплины – изучение основных современных методов количественной оценки реакционной способности органических соединений

Задачи дисциплины – приобретение знаний и умений в области физической органической химии для подготовки к научно-исследовательской работе

10. Место учебной дисциплины в структуре ООП:

Вариативная часть блока Б1.

Дисциплина относится к циклу математических, естественнонаучных и медико-биологических дисциплин. Дисциплина по выбору.

Для изучения курса необходимы знания и умения, полученные при прохождении курсов общей, физической и органической химии, квантовой механики и строения вещества.

11. Планируемые результаты обучения по дисциплине/модулю (знания, умения, навыки), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями) и индикаторами их достижения:

Код	Название компетенции	Код(ы)	Индикатор(ы)	Планируемые результаты обучения
ПКВ -1	<i>Способен проводить сбор, систематизацию и критический анализ научной, технической и патентной информации, необходимой для решения исследовательских задач химической направленности</i>	ПКВ -1.1	<i>Обеспечивает сбор научной, технической и патентной информации, необходимой для решения исследовательских задач</i>	Знать: основные понятия ММО и метода Хюккеля, механизмы органических реакций. Уметь: строить схемы МО органических соединений Владеть: качественным методом оценки распределения электронной плотности.
		ПКВ -1.2	<i>Составляет аналитический обзор собранной научной, технической и патентной информации по тематике исследовательского проекта</i>	Знать: принципы прогнозирования реакционной способности органических молекул. Уметь: предсказывать региохимию взаимодействия сложных молекул. Владеть: концепцией электрофильно-нуклеофильного рассматривания химических процессов.
ПКВ -2	<i>Способен планировать работу и выбирать адекватные методы решения научно-исследовательских задач в области органической и химии</i>	ПКВ -2.1	<i>Составляет общий план исследования и детальные планы отдельных стадий</i>	Знать: принципы и методы тонкого органического синтеза. Уметь: разрабатывать стратегии синтеза с учётом электронного строения реагентов. Владеть: базовыми методами построения сложных молекул.
		ПКВ -2.2	<i>Выбирает экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи, исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов</i>	Знать: свойства основных растворителей и сореагентов. Уметь: предсказывать протекание реакций в различных системах. Владеть: навыками перспективного планирования эксперимента.

12. Объем дисциплины в зачетных единицах/час.(в соответствии с учебным планом) — 4 / 144.

Форма промежуточной аттестации(зачет/экзамен) Зачёт с оценкой

13. Трудоемкость по видам учебной работы

Вид учебной работы		Трудоемкость			
		Всего	По семестрам		
			3		
Контактная работа		56	56		
в том числе:	лекции	18	18		
	практические	38	38		
	лабораторные	-	-		
	курсовая работа	-	-		
Самостоятельная работа		88	88		
Промежуточная аттестация		-	-		
Итого:		144	144		

13.1. Содержание дисциплины

п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела дисциплины	Реализация раздела дисциплины с помощью онлайн-курса, ЭУМК
1. Лекции			
1.1	Общие понятия.	Химическая связь. Гибридизация. Электронные эффекты. Сопряжение. Волновая функция. Орбиталь. Узловые поверхности.	Метод молекулярных орбиталей в органической химии: https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=19671
1.2	Атомные и молекулярные орбитали.	Расщепление орбиталей. Электроотрицательность, сродство к электрону, потенциал ионизации. Параметр расщепления, связывающие, несвязывающие, разрыхляющие орбитали.	Метод молекулярных орбиталей в органической химии: https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=19671
1.3	Нуклеофилы и электрофилы	ВЗМО и НСМО. Орбитальный и зарядовый контроль реакции. Жёсткие и мягкие реагенты. Селективность.	Метод молекулярных орбиталей в органической химии: https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=19671
1.4	Одноуглеродные частицы.	Энергия орбиталей. Предпочтительные конфигурации. Изоэлектронные частицы. Боран, аммиак, метан, метильные частицы.	Метод молекулярных орбиталей в органической химии: https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=19671
1.5	Реакции замещения	Нуклеофильное замещение галогена. Атака σ -орбиталей. Стабильность промежуточных соединений. Интермедиат и переходное состояние.	Метод молекулярных орбиталей в органической химии: https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=19671
1.6	Ненасыщенные системы.	Алкены, карбонильная группа, цианид-ион.	Метод молекулярных орбиталей в органической химии: https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=19671
1.7	Сопряжённые молекулы.	Системы аллильного типа. Аллил, нитрогруппа, карбоксилат-ион, амиды. Диеновая система. Еноны. 1,2- и 1,4-присоединение.	Метод молекулярных орбиталей в органической химии: https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=19671
1.8	Ароматические	Ароматизация. Круг Фроста. Небензоидные	Метод молекулярных

	системы.	системы. Реакции ароматического замещения.	орбиталей в органической химии: https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=19671
2. Практические занятия			
2.1	Общие понятия.	Химическая связь. Гибридизация. Электронные эффекты. Сопряжение. Волновая функция. Орбиталь. Узловые поверхности.	Метод молекулярных орбиталей в органической химии: https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=19671
2.2	Атомные и молекулярные орбитали.	Расщепление орбиталей. Электроотрицательность, сродство к электрону, потенциал ионизации. Параметр расщепления, связывающие, несвязывающие, разрыхляющие орбитали.	Метод молекулярных орбиталей в органической химии: https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=19671
2.3	Нуклеофилы и электрофилы	ВЗМО и НСМО. Орбитальный и зарядовый контроль реакции. Жёсткие и мягкие реагенты. Селективность.	Метод молекулярных орбиталей в органической химии: https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=19671
2.4	Одноуглеродные частицы.	Энергия орбиталей. Предпочтительные конфигурации. Изозлектронные частицы. Боран, аммиак, метан, метильные частицы.	Метод молекулярных орбиталей в органической химии: https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=19671
2.5	Реакции замещения	Нуклеофильное замещение галогена. Атака σ -орбиталей. Стабильность промежуточных соединений. Интермедиат и переходное состояние.	Метод молекулярных орбиталей в органической химии: https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=19671
2.6	Ненасыщенные системы.	Алкены, карбонильная группа, цианид-ион.	Метод молекулярных орбиталей в органической химии: https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=19671
2.7	Сопряжённые молекулы.	Системы аллильного типа. Аллил, нитрогруппа, карбоксилат-ион, амиды. Диеновая система. Еноны. 1,2- и 1,4-присоединение.	Метод молекулярных орбиталей в органической химии: https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=19671
2.8	Ароматические системы.	Ароматизация. Круг Фроста. Небензоидные системы. Реакции ароматического замещения.	Метод молекулярных орбиталей в органической химии: https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=19671

13.2. Темы (разделы) дисциплины и виды занятий

№ п/п	Наименование темы (раздела) дисциплины	Виды занятий (количество часов)				
		Лекции	Практические	Лабораторные	Самостоятельная работа	Всего
1	Общие понятия.	2	2	-	10	14
2	Атомные и молекулярные орбитали.	2	4	-	10	16
3	Нуклеофилы и электрофилы	2	4	-	10	16
4	Одноуглеродные частицы.	2	4	-	10	16
5	Реакции замещения	2	4	-	12	18
6	Ненасыщенные	4	8	-	12	24

	системы.					
7	Сопряжённые молекулы.	2	6	-	12	20
8	Ароматические системы.	2	6	-	12	20
	Итого:	18	38	-	88	144

14. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

Организация изучения дисциплины предполагает:

- изучение основных и дополнительных литературных источников;
- выполнение практического задания;
- текущий контроль успеваемости в форме устного опроса по основным разделам дисциплины.

15. Перечень основной и дополнительной литературы, ресурсов интернет, необходимых для освоения дисциплины (список литературы оформляется в соответствии с требованиями ГОСТ и используется общая сквозная нумерация для всех видов источников)

а) основная литература:

№ п/п	Источник
1	Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Теория строения молекул. 2-е изд., перераб. и доп. – Ростов-на-Дону: Феникс, 1997.
2	Реутов О.А., Курц А.Л., Бутин К.П. Органическая химия. В 4 томах. Лаборатория знаний., 2017 г.

б) дополнительная литература:

№ п/п	Источник
3	Травень В.Ф. Органическая химия. Учебное пособие в 3-х томах., Лаборатория знаний., 2019 г.
4	Клейден Дж., Гривс Н., Уоррен С., Уоррен П. Органическая химия. В 3 томах. – 2009.

в) информационные электронно-образовательные ресурсы (официальные ресурсы интернет)*:

№ п/п	Ресурс
5	Базы данных ЗНБ ВГУ www.lib.vsu.ru
6	Химия во всех проявлениях – химический портал. Chem.Port.ru http://www.chem.port.ru

16. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы (учебно-методические рекомендации, пособия, задачки, методические указания по выполнению практических (контрольных), курсовых работ и др.)

№ п/п	Источник
7	Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Теория строения молекул. 2-е изд., перераб. и доп. – Ростов-на-Дону: Феникс, 1997.
8	Клейден Дж., Гривс Н., Уоррен С., Уоррен П. Органическая химия. В 3 томах. – 2009.

17. Образовательные технологии, используемые при реализации учебной дисциплины, включая дистанционные образовательные технологии (ДОТ), электронное обучение (ЭО), смешанное обучение):

Для достижения цели освоения учебной дисциплины, повышения качества образования и формирования компетенций используются аудиторные и внеаудиторные/интерактивные формы обучения.

К аудиторным занятиям относятся лекции и практические занятия, внеаудиторным – самостоятельная работа студентов. Лекции включают в себя последовательное изложение материала преподавателем в том числе с использованием мультимедийного оборудования для

демонстрации схем, рисунков, фотографий и др. Практические работы позволяют объединить теоретические знания с практическими умениями и навыками студентов в едином процессе учебно-исследовательского характера.

В ходе практических занятий студенты вырабатывают умения планирования научного поиска, обработки литературных данных, умения делать выводы и обобщения. Формируются практические профессиональные навыки реферирования, компиляции, последовательного изложения материала, полемики и аргументации. К внеаудиторной работе студентов относится работа в глобальной сети (использование Интернет-технологий), поиск научной и методической информации.

18. Материально-техническое обеспечение дисциплины:

Персональные компьютеры с доступом в Интернет; мультимедийный проектор, экран, ноутбук.

19. Оценочные средства для проведения текущей и промежуточной аттестаций

Порядок оценки освоения обучающимися учебного материала определяется содержанием следующих разделов дисциплины:

№ п/п	Наименование раздела дисциплины (модуля)	Компетенция(и)	Индикатор(ы) достижения компетенции	Оценочные средства
1	Общие понятия.	ПКВ-1	ПКВ-1.1	<i>Ситуационная задача</i>
2	Атомные и молекулярные орбитали.	ПКВ-1	ПКВ-1.1 ПКВ-1.2	<i>Ситуационная задача</i>
3	Нуклеофилы и электрофилы	ПКВ- 1 ПКВ-2	ПКВ-1.1 ПКВ-1.2 ПКВ-2.1 ПКВ-2.2	<i>Ситуационная задача</i>
4	Одноуглеродные частицы.	ПКВ- 1 ПКВ-2	ПКВ-1.1 ПКВ-1.2 ПКВ-2.1 ПКВ-2.2	<i>Ситуационная задача</i>
5	Реакции замещения	ПКВ- 1 ПКВ-2	ПКВ-1.1 ПКВ-1.2 ПКВ-2.1 ПКВ-2.2	<i>Ситуационная задача</i>
6	Ненасыщенные системы.	ПКВ- 1 ПКВ-2	ПКВ-1.1 ПКВ-1.2 ПКВ-2.1 ПКВ-2.2	<i>Ситуационная задача</i>
7	Сопряжённые молекулы.	ПКВ-1 ПКВ-2	ПКВ-1.1 ПКВ-1.2 ПКВ-2.1 ПКВ-2.2	<i>Ситуационная задача</i>
8	Ароматические системы.	ПКВ- 1 ПКВ-2	ПКВ-1.1 ПКВ-1.2 ПКВ-2.1 ПКВ-2.2	<i>Ситуационная задача</i>
Промежуточная аттестация форма контроля – экзамен				<i>Перечень вопросов</i>

20 Типовые оценочные средства и методические материалы, определяющие процедуры оценивания

20.1 Текущий контроль успеваемости

Контроль успеваемости по дисциплине осуществляется с помощью следующих оценочных средств:
Устный опрос
Ситуационная задача

Текущая аттестация проводится в соответствии с Положением о текущей аттестации обучающихся по программам высшего образования Воронежского государственного университета. Текущая аттестация проводится в форме устного опроса.

20.2 Промежуточная аттестация

Промежуточная аттестация по дисциплине осуществляется с помощью следующих оценочных средств:
Собеседование по билетам к экзамену.

Перечень вопросов к зачёту.

1. Химическая связь. Гибридизация.
2. Электроотрицательность, сродство к электрону, потенциал ионизации.
3. Электронные эффекты. Сопряжение.
4. Волновая функция. Орбиталь. Узловые поверхности.
5. Параметр расщепления, связывающие, несвязывающие, разрыхляющие орбитали.
6. ВЗМО и НСМО. Жёсткие и мягкие реагенты.
7. Орбитальный и зарядовый контроль реакции. Селективность.
8. Энергия орбиталей. Предпочтительные конфигурации.
9. Изоэлектронные частицы. Боран, аммиак, метан, метильные частицы.
10. Нуклеофильное замещение галогена. Атака σ -орбиталей.
11. Стабильность промежуточных соединений. Интермедиат и переходное состояние.
12. Алкены, карбонильная группа, цианид-ион.
13. Системы аллильного типа. Аллил, нитрогруппа, карбоксилат-ион, амиды.
14. Диеновая система. Еноны. 1,2- и 1,4-присоединение.
15. Ароматизация. Круг Фроста.
16. Небензоидные системы.
17. Реакции ароматического замещения.

Описание технологии проведения

Экзамен проводится в письменной форме. Студент обязан максимально подробно и с примерами изложить суть каждого вопроса. Преподаватель имеет право на уточняющие и дополнительные вопросы в пределах теоретической части и проделанных лабораторных работ данной дисциплины.

Для оценивания результатов обучения на зачете используются следующие показатели:

- 1) знание учебного материала и владение понятийным аппаратом метода молекулярных орбиталей;
- 2) умение связывать теорию с практикой;
- 3) умение иллюстрировать ответ примерами, данными расчётов и построений;
- 4) умение применять теоретические знания, решать практические задачи;
- 5) прогнозирование направления и скорости реакций.

Контрольно-измерительные материалы промежуточной аттестации включают в себя теоретические вопросы, позволяющие оценить уровень полученных знаний. При оценивании используются качественные шкалы оценок. Критерии оценивания приведены ниже.

Критерии оценивания компетенций	Уровень сформированности компетенции	Шкала оценок
Полное соответствие ответа всем перечисленным	Повышенный	«Отлично»

критериям. Продemonстрировано знание учебного материала и владение понятийным аппаратом, теоретическими основами супрамолекулярной химии, способность иллюстрировать ответ примерами, данными научных исследований.	уровень	
<p>Ответ на контрольно-измерительный материал не соответствует одному (двум) из перечисленных показателей, но обучающийся даёт правильные ответы на дополнительные вопросы.</p> <p>Недостаточно продемонстрирована связь теории с практикой, или содержатся отдельные пробелы в знании вопросов теории.</p>	Базовый уровень	«Хорошо»
<p>Ответ на контрольно-измерительный материал не соответствует любым двум(трём) из перечисленных показателей, обучающийся даёт неполные ответы на дополнительные вопросы.</p> <p>Демонстрирует частичные знания теории, или не умеет иллюстрировать ответ примерами.</p>	Пороговый уровень	«Удовлетворительно»
<p>Ответ на контрольно-измерительный материал не соответствует любым трём(четырёх) из перечисленных показателей. Обучающийся демонстрирует обрывочные, фрагментарные знания, допускает грубые ошибки.</p>	-	«Неудовлетворительно»