

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ
УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«РЯЗАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ С.А. ЕСЕНИНА»

Утверждаю:
Декан естественно-географического
факультета



С.В. Жеглов

«29» июня 2017 г

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Строение и реакционная способность органических соединений

Уровень основной профессиональной образовательной программы
Магистратура

Направление подготовки 04.04.01 Химия

Направленность (профиль) подготовки Органическая химия

Форма обучения очная

Сроки освоения ОПОП нормативный, 2 года

Факультет (институт) естественно-географический

Кафедра химии

Рязань, 2017

ВВОДНАЯ ЧАСТЬ

1. ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Целями освоения учебной дисциплины «Строение и реакционная способность органических соединений» являются формирование у обучающихся знаний основных физико-химических закономерностей протекания органических реакций, их механизмов, взаимосвязи структуры, свойств и реакционной способности органических веществ и формирование компетенций, необходимых для управления химическим процессом.

2. МЕСТО УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОПОП ВУЗА

2.1. Учебная дисциплина Методы и реагенты органического синтеза относится к вариативной части Блока 1.

2.2. Для изучения данной учебной дисциплины необходимы следующие предшествующие дисциплины:

- Органическая химия направления подготовки 04.03.01 Химия

2.3. Перечень последующих учебных дисциплин, для которых необходимы знания, умения и навыки, формируемые данной учебной дисциплиной:

- Научно-исследовательская работа
- Подготовка и защита ВКР

2.4 Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения основной профессиональной образовательной программы

Изучение данной учебной дисциплины направлено на формирование у обучающихся профессиональных (ПК) компетенций:

№ п/п	Номер/индекс компетенции	Содержание компетенции (или ее части)	Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине В результате изучения учебной дисциплины обучающиеся должны:		
			Знать	Уметь	Владеть (навыками)
1	2	3	4	5	6
1.	ПК-2	Владение теорией и навыками практической работы в избранной области химии	- классические структурные модели органических молекул и характеристики их реакционной способности	- прогнозировать реакционную способность органических молекул по классическим структурным моделям	- научными понятиями и терминологией в области строения и реакционной способности органических молекул

2.5 Карта компетенций дисциплины.

КАРТА КОМПЕТЕНЦИЙ ДИСЦИПЛИНЫ					
НАИМЕНОВАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ Строение и реакционная способность органических соединений					
Цель дисциплины		формирование у обучающихся знаний основных физико-химических закономерностей протекания органических реакций, их механизмов, взаимосвязи структуры, свойств и реакционной способности органических веществ и формирование компетенций, необходимых для управления химическим процессом.			
В процессе освоения данной дисциплины студент формирует и демонстрирует следующие компетенции					
КОМПЕТЕНЦИИ		Перечень компонентов	Технологии формирования	Форма оценочного средства	Уровни освоения компетенции
ИНДЕКС	ФОРМУЛИРОВКА				
ПК-2	Владение теорией и навыками практической работы в избранной области химии	Знать классические структурные модели органических молекул и характеристики их	Лекция Лаб. Работа Самостоятельная работа с литературой	Подготовка к собеседованию Экзамен	ПОРОГОВЫЙ Демонстрирует частичные умения, владения, знания без грубых ошибок ПОВЫШЕННЫЙ Демонстрирует высокий уровень

		реакционной способности Уметь прогнозировать реакционную способность органических молекул по классическим структурным моделям Владеть научными понятиями и терминологией в области строения и реакционной способности органических молекул			знаний, умений и владений.
--	--	--	--	--	----------------------------

ОСНОВНАЯ ЧАСТЬ

1. ОБЪЕМ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ) И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Вид учебной работы	Всего часов	Семестры			
		3 часов			
1	2	3			
1. Контактная работа обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) (всего)	-	48			
В том числе:					
Лекции (Л)		16			
Практические занятия (ПЗ), Семинары (С)					
Лабораторные работы (ЛР)		32			
2. Самостоятельная работа студента (всего)		60			
В том числе	-				
<i>СРС в семестре:</i>					
Курсовая работа	КП				
	КР				
Подготовка к собеседованию		60			
...					
...					
...					
...					
<i>СРС в период сессии</i>					
Подготовка к экзамену		36			
Вид промежуточной аттестации	зачет (З),		Э		
	экзамен (Э)				
ИТОГО: Общая трудоемкость					
	часов		144		
	зач. ед.		4		

2. СОДЕРЖАНИЕ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

2.1. Содержание разделов учебной дисциплины (модуля)

№ семестра	№ раздела	Наименование раздела учебной дисциплины (модуля)	Содержание раздела в дидактических единицах
		3	4
3	1.	Классическая теория строения молекул	Проблема реакционной способности молекул. Содержание понятия «реакционная способность»: качественный и количественный, равновесный и кинетический аспекты. Эмпирические, полуэмпирические и теоретические методы оценки реакционной способности. Внутренние и внешние эффекты: реакционная способность и строение молекулы, реакционная способность и внешние условия (в т.ч. влияние растворителя и катализатора). Принципы построения структурных моделей: структурный (физические методы исследования) и динамический (поведение молекул в химических реакциях). Динамический подход. Трансферабельные структурные фрагменты молекул - функции и радикалы. Классификация химических соединений. Структурный подход. Аддитивные схемы. Атомные и связевые инкременты. Поправки на взаимное влияние атомов и связей. Геометрия молекулы: валентные углы, длины связей, форма и симметрия молекулы. Структурно-нежесткие молекулы.
	2.	Электронные теории строения молекул	Квазиклассическая теория Льюиса. Электронная оболочка и ее строение: поделенные и неподеленные пары, лакуны, неспаренные электроны. Реакционные центры молекул: нуклеофильные, электрофильные и радикальные. Распределение электрического заряда в молекуле. Индуктивный и мезомерный эффекты с классической точки зрения.
	3.	Квантово-механические теории строения молекул	Одноэлектронное приближение и орбитальная модель. Метод ВС и его приближенные варианты — метод резонанса и др. Метод МО и его варианты — КМО, ЛМО и ДЛМО. Молекулярные орбитали и их характеристики. Орбитальные энергии. Количественные параметры молекулы: коэффициенты МО, орбитальные энергии, остовные и резонансные интегралы, поляризуемости. Симметрия МО и электронных состояний, способы ее рассмотрения и описания. Узловая структура МО. Заселенности МО и электронная конфигурация молекулы. Конфигурационное взаимодействие. Методы расчета характеристик молекул: атомные электронные плотности и атомные заряды, порядки связей, атомные и связевые поляризуемости, индексы различного типа. КМ-модель индуктивного и мезомерного эффектов. Сверхсопряжение (гиперконъюгация). Расчет энергий сопряжения, ионизации, возбуждения, локализации. Межмолекулярные взаимодействия: индуктомерный и электромерный эффект, факторы, влияющие на их передачу. Ядерный остов молекул. ППЭ и ее характеристики. Колебания и вращения молекул. Статистические суммы.
	4.	Количественное описание химических реакций	Стехиометрия. Пространство состояний химической системы. Стехиометрические траектории. Макроскопический и микроскопический подход. Понятие механизма реакции. Энергетические эффекты химических превращений.

		<p>Потенциальная энергия системы и потенциальные силы. Работа в химических процессах. Свободная энергия и химическое сродство. Поверхности потенциальной энергии химических систем и молекул.</p> <p>Кинетика реакций. Типы кинетических уравнений и моделей. Численные параметры кинетических моделей: константы скоростей, времена релаксации, амплитуды и вероятности переходов. Влияние условий и среды на протекание химических реакций. Катализ.</p>
5.	Эмпирические корреляции между строением и реакционной способностью на макроуровне	<p>Качественные корреляции. Реакционные центры и их сила. Нуклеофильные реакции. Типы механизмов. Нуклеофилы, их получение, устойчивость (влияние электроотрицательности атомов, эффектов сопряжения, геометрии молекулы, растворителя).</p> <p>Субстраты нуклеофильных реакций. Электрофильные реакции. Типы механизмов. Электрофилы, их получение, устойчивость (влияние электроотрицательности атомов, эффектов сопряжения, геометрии молекулы, растворителя).</p> <p>Субстраты электрофильных реакций. Радикальные реакции. Типы механизмов. Свободные радикалы, их получение, устойчивость (влияние эффектов сопряжения). Субстраты радикальных реакций.</p> <p>Синхронные реакции. Качественные правила отбора. Количественные корреляции. Методологическая основа эксперимента. Реакционные серии. Линейные соотношения между константами равновесия и константами скоростей.</p> <p>Уравнения Гаммета, Тафта и аналогичные им. Константы заместителей, методы их экспериментального измерения. Оценка индуктивных, резонансных (мезомерных) и пространственных (стерических) эффектов. Изакинетические зависимости. Влияние растворителя. Ионная сила, солевые эффекты, процессы сольватации.</p>
6.	Методы, основанные на модели поверхности потенциальной энергии	<p>Теории абсолютных скоростей. Механическая модель элементарного химического акта.</p> <p>Структура ППЭ: химические формы, потенциальные барьеры, активированный комплекс, переходное состояние. Методы расчета констант скоростей: активационные параметры, стерический множитель, трансмиссионный коэффициент.</p> <p>Область применимости теорий абсолютных скоростей.</p> <p>Индексы реакционной способности. Связь квантовомеханических расчетных характеристик молекулы с ее химическим поведением в реакциях различного типа: радикальных, нуклеофильных и электрофильных. Методы оценки реакционной способности молекул. Постулат Хэммонда. Приближение локализации и приближение изолированной молекулы. Индексы реакционной способности для различных типов реакций.</p> <p>Правила отбора в синхронных реакциях. Синхронные (согласованные) процессы. Адиабатические и неадиабатические процессы. Законы сохранения. Принцип сохранения</p>

		орбитальной симметрии. Разрешенные и запрещенные реакции. Правила отбора. Методы корреляционных диаграмм, граничных орбиталей и переходного состояния.
--	--	--

2.2. Разделы учебной дисциплины (модуля), виды учебной деятельности и формы контроля

№ семестра	№ раздела	Наименование раздела учебной дисциплины	Виды учебной деятельности, включая самостоятельную работу студентов (в часах)					Формы текущего контроля успеваемости (по неделям семестрам)
			Л	ЛР	ПЗ/С	СРС	всего	
1	2	3	4	5	6	7	8	9
3	1.	Классическая теория строения молекул	2	4		10	16	1-2 Собеседование
	2.	Электронные теории строения молекул	2	4		10	16	3-4 Собеседование
	3.	Квантово-механические теории строения молекул	4	8		10	22	5-8 Собеседование
	4.	Количественное описание химических реакций	2	4		10	16	9-10 Собеседование
	5.	Эмпирические корреляции между строением и реакционной способностью на макроуровне	4	8		10	22	11-14 Собеседование
	6.	Методы, основанные на модели поверхности потенциальной энергии	2	2		10	16	15-16 Собеседование
		ИТОГО за семестр	16	32		60	108	ПрАт Экзамен
		ИТОГО						144

2.3 . Лабораторный практикум

Не предусмотрен

2.3.Примерная тематика курсовых работ.

Не предусмотрены

3. САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА СТУДЕНТА

3.1. Виды СРС

№ семестра	№ раздела	Наименование раздела учебной дисциплины (модуля)	Виды СРС	Всего часов
	1.	Классическая теория строения молекул	Подготовка к собеседованию Подготовка к экзамену	10
	2.	Электронные теории строения молекул	Подготовка к собеседованию Подготовка к экзамену	10
	3.	Квантово-механические теории строения молекул	Подготовка к собеседованию Подготовка к экзамену	10
	4.	Количественное описание химических реакций	Подготовка к собеседованию Подготовка к экзамену	10
	5.	Эмпирические корреляции между строением и реакционной способностью на макроуровне	Подготовка к собеседованию Подготовка к экзамену	10
	6.	Методы, основанные на модели поверхности потенциальной энергии	Подготовка к собеседованию Подготовка к экзамену	10
ИТОГО в семестре:				60

3.2. График работы студента Семестр № 3

Форма оценочного средства*	Условное обозначение	Номер недели																					
		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16						
Собеседование	Сб		+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+						

3.3. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю)

Виды самостоятельной работы: в домашних условиях, в библиотеке, на компьютерах с доступом к базам данных и ресурсам Интернет, в лабораториях с доступом к лабораторному оборудованию и приборам. Самостоятельная работа подкрепляется учебно-методическим и информационным обеспечением, включающим учебники, учебно-методические пособия, конспекты лекций, учебное и научное программное обеспечение. В ходе самостоятельной работы проводится анализ литературных данных, составление подборки статей из научных журналов по применению методов органического синтеза для получения органических соединений.

3.3.1. Контрольные работы/рефераты

4. ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА ДЛЯ КОНТРОЛЯ УСПЕВАЕМОСТИ И РЕЗУЛЬТАТОВ ОСВОЕНИЯ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ (см. Фонд оценочных средств)

4.2. Рейтинговая система оценки знаний обучающихся по учебной дисциплине

5. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

5.1. Основная литература

№ п/п	Автор (ы), наименование, место издания и издательство, год	Используется при изучении разделов	Семестр	Количество экземпляров	
				В библиотеке	На кафедре
1	2	3	4	5	6
1.	Реутов О. А. Органическая химия Ч. 1-4. [учебник для вузов по направлению и специальности “Химия”]. / О.А. Реутов, А.А. Курц, К.П. Бутин. – М.: БИНОМ. Лаб. знаний. 2007-2014.	1-4	3	40	
2.	Шабаров, Ю.С. Органическая химия [Электронный ресурс] : учеб. — Электрон. дан. — Санкт-Петербург : Лань, 2011. — 848 с. — Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/4037 . — Загл. с экрана.	1-4	3	ЭБС	

5.2. Дополнительная литература

№ п/п	Автор (ы), наименование, место издания и издательство, год	Используется при изучении разделов	Семестр	Количество экземпляров	
				В библиотеке	На кафедре
1	2	3	4	5	6
1	Резников, В.А. Сборник задач и упражнений по органической химии [Электронный ресурс] : учеб. пособие — Электрон. дан. — Санкт-Петербург : Лань, 2014. — 288 с. — Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/44763 . — Загл. с экрана.	1-4	3	ЭБС	
2	Сборник задач по органической химии [Электронный ресурс] : учеб. пособие / В.Я. Денисов [и др.]. — Электрон. дан. — Санкт-Петербург : Лань, 2014. — 544 с. — Режим доступа: https://e.lanbook.com/book/45971 . — Загл. с экрана.	1-4	3	ЭБС	
3	Гаршин, А. П. Органическая химия в рисунках, таблицах, схемах : учебное пособие для прикладного бакалавриата / А. П. Гаршин. — 3-е изд., испр. и доп. — М. : Издательство Юрайт, 2017. — 240 с. — (Серия : Бакалавр. Прикладной курс). — ISBN 978-5-534-04808-7. — Режим доступа : www.biblio-online.ru/book/DCA14520-52AD-4DFB-872E-8BFF777DB699 .	1-4	3	ЭБС	

5.3. Базы данных, информационно-справочные и поисковые системы:

1. eLIBRARY.RU [Электронный ресурс] : научная электронная библиотека. – Доступ зарегистрированным пользователям по паролю. – Режим доступа: <http://elibrary.ru/defaultx.asp> (дата обращения: 15.10.2016).
2. Лань [Электронный ресурс] : электронная библиотека. – Доступ к полным текстам по паролю. – Режим доступа: <https://e.lanbook.com> (дата обращения: 01.03.2016).
3. Научная библиотека РГУ имени С. А. Есенина [Электронный ресурс] : сайт. – Режим доступа: <http://library.rsu.edu.ru>, свободный (дата обращения: 15.10.2016).
4. Университетская библиотека ONLINE [Электронный ресурс] : электронная библиотека. – Доступ к полным текстам по паролю. – Режим доступа: http://biblioclub.ru/index.php?page=main_ub_red (дата обращения: 15.10.2016).
5. Юрайт [Электронный ресурс] : электронная библиотека. – Доступ к полным текстам по паролю. – Режим доступа: <https://www.biblio-online.ru> (дата обращения: 20.04.2017).
6. Springer (платформа SpringerLink) SpringerLink [Электронный ресурс]: полнотекстовая база данных научных журналов, Режим доступа: <http://www.springerlink.com> (дата обращения: 20.04.2017).
7. Royal Society of Chemistry (RSC) [Электронный ресурс]: Открытый доступ [к архивам всех журналов](#), изданных Royal Society of Chemistry с 1841 по 2007 годы. Архив охватывает такие предметные области, как биология, нанонаука и нанотехнология, физика, химия. Режим доступа: <http://pubs.rsc.org/en/journals?key=title&value=archive> (дата обращения: 01.05.2017).

5.4. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» (далее – сеть «Интернет»), необходимых для освоения дисциплины (модуля)*

1. ChemNet. Россия [Электронный ресурс] : химическая информационная сеть. – Режим доступа: www.chemnet.ru, свободный (дата обращения: 15.10.2016).
2. ChemPort.Ru [Электронный ресурс] : портал. – Режим доступа: www.chemport.ru, свободный (дата обращения: 15.10.2016).
3. <http://www.xumuk.ru/> [Электронный ресурс] : портал. – Режим доступа: www.xumuk.ru, свободный (дата обращения: 15.10.2016).
4. Аналитическая химия и химический анализ [Электронный ресурс] : Портал химиков-аналитиков – Режим доступа: ANCHEM.RU, свободный (дата обращения: 15.10.2016).
5. [ABC Chemistry](http://ABC-Chemistry.org) [Электронный ресурс] : бесплатный полнотекстовый каталог журналов по химии. – Режим доступа: <http://abc-chemistry.org/index.html>, свободный (дата обращения: 15.10.2016).
6. [ChemSpider](http://www.chemspider.com/) [Электронный ресурс] : база данных химических соединений и смесей, принадлежащая королевскому химическому обществу Великобритании. – Режим доступа: <http://www.chemspider.com/>, свободный (дата обращения: 15.10.2016).
7. И.Э.Нифантьев, П.В.Ивченко Практикум по органической химии. [Электронный ресурс]: практикум. – Режим доступа: http://www.chem.msu.su/rus/teaching/nifantev/2006_praktikum.pdf, свободный (дата обращения: 15.10.2016).
8. Н.Н. Быкова, А.П. Кузьмин Органический синтез. [Электронный ресурс] : практикум. – Режим доступа: <http://www.tstu.ru/education/elib/pdf/2007/bikova-r.pdf>, свободный (дата обращения: 15.10.2016).

6. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

6.1. Требования к аудиториям (помещениям, местам) для проведения занятий:

Стандартно оборудованные лекционные аудитории

Аудитории, оборудованные мультимедийными проекторами, системными блоками, интерактивная доска используемые в учебном процессе.

6.2. Требования к оборудованию рабочих мест преподавателя и обучающихся: стандартное оборудование для учебной аудитории.

6.3. Требования к специализированному оборудованию:

Не требуется

7. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

8. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)

Вид учебных занятий	Организация деятельности студента
Лекция	Написание конспекта лекций: кратко, схематично, последовательно фиксировать основные положения, выводы, формулировки, обобщения; помечать важные мысли, выделять ключевые слова, термины. Проверка терминов, понятий с помощью энциклопедий, словарей, справочников с выписыванием толкований в тетрадь. Обозначить вопросы, термины, материал, который вызывает трудности, пометить и попытаться найти ответ в рекомендуемой литературе. Если самостоятельно не удастся разобраться в материале, необходимо сформулировать вопрос и задать преподавателю на консультации, на практическом занятии.
Практические занятия	Проработка рабочей программы дисциплины, уделяя особое внимание целям и задачам, структуре и содержанию дисциплины. Конспектирование источников. Работа с конспектом лекций, подготовка ответов к контрольным вопросам, просмотр рекомендуемой литературы, работа с текстом, прослушивание аудио- и видеозаписей по заданной теме, решение расчетно-графических заданий, решений задач по алгоритму и др.
Подготовка к экзамену	При подготовке к экзамену необходимо ориентироваться на конспекты лекций, рекомендуемую литературу и др.

9. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине, включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем (*при необходимости*)

10. Требования к программному обеспечению учебного процесса (указывается при наличии).

Название ПО	№ лицензии
MS Office 2007 russian acdmc open	45472941
MS Windows Professional Russian	47628906

Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине

Паспорт фонда оценочных средств по дисциплине для промежуточного контроля успеваемости

№ п/п	Контролируемые разделы (темы) дисциплины (результаты по разделам)	Код контролируемой компетенции) или её части)	Наименование оценочного средства
1.	Классическая теория строения молекул	ПК-2	Экзамен
2.	Электронные теории строения молекул		
3.	Квантово-механические теории строения молекул		
4.	Количественное описание		
5.	Эмпирические корреляции между строением и реакционной способностью		
6.	Методы, основанные на модели поверхности потенциальной энергии		

ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОБУЧЕНИЯ ПО УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЕ

Индекс компетенции	Содержание компетенции	Элементы компетенции	Индекс элемента
ПК-2	Владение теорией и навыками практической работы в избранной области химии	Знать классические структурные модели органических молекул и характеристики их реакционной способности	ПК-2 З1
		Уметь прогнозировать реакционную способность органических молекул по классическим структурным моделям	ПК-2 У1
		Владеть научными понятиями и терминологией в области строения и реакционной способности органических молекул	ПК-2 В1

КОМПЛЕКТ ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ (ЭКЗАМЕН)

№	Содержание оценочного средства	Индекс оцениваемой компетенции и ее элементов
1	Проблема реакционной способности молекул. Содержание понятия «реакционная способность»: качественный и количественный, равновесный и кинетический аспекты.	ПК-2 З1 ПК-2 У1 ПК-2 В1
2	Эмпирические, полумпирические и теоретические методы оценки реакционной способности.	
3	Внутренние и внешние эффекты: реакционная способность и строение молекулы, реакционная способность и внешние	

	условия (в т.ч. влияние растворителя и катализатора).
4	Принципы построения структурных моделей: структурный (физические методы исследования) .
5	Принципы построения структурных моделей: динамический (поведение молекул в химических реакциях).
6	Динамический подход. Трансферабельные структурные фрагменты молекул — функции и радикалы. Классификация химических соединений.
7	Структурный подход. Аддитивные схемы. Атомные и связевые инкременты. Поправки на взаимное влияние атомов и связей.
8	Геометрия молекулы: валентные углы, длины связей, форма и симметрия молекулы. Структурно-нежесткие молекулы.
9	Квазиклассическая теория Льюиса. Электронная оболочка и ее строение. Реакционные центры молекул.
10	Распределение электрического заряда в молекуле. Индуктивный и мезомерный эффекты с классической точки зрения.
11	Молекулярные орбитали и их характеристики. Орбитальные энергии.
12	Количественные параметры молекулы: коэффициенты МО, орбитальные энергии, основные и резонансные интегралы, поляризуемости.
13	Симметрия МО и электронных состояний, способы ее рассмотрения и описания. Узловая структура МО.
14	Заселенности МО и электронная конфигурация молекулы.
15	Методы расчета характеристик молекул: атомные электронные плотности и атомные заряды, порядки связей
16	Методы расчета характеристик молекул: атомные и связевые поляризуемости, индексы различного типа.
17	Ядерный остов молекул. ППЭ и ее характеристики. Колебания и вращения молекул.
18	Стехиометрия. Пространство состояний химической системы. Стехиометрические траектории.
19	Энергетические эффекты химических превращений. Свободная энергия и химическое сродство.
20	Поверхности потенциальной энергии химических систем и молекул.
21	Кинетика реакций. Численные параметры кинетических моделей: константы скоростей, времена релаксации, амплитуды и вероятности переходов.
22	Качественные корреляции. Реакционные центры и их "сила".
23	Нуклеофильные реакции. Типы механизмов.
24	Нуклеофилы, их получение, устойчивость (влияние электроотрицательности атомов, эффектов сопряжения, геометрии молекулы, растворителя).
25	Электрофильные реакции. Типы механизмов
26	Электрофилы, их получение, устойчивость (влияние электроотрицательности атомов, эффектов сопряжения, геометрии молекулы, растворителя).
27	Субстраты электрофильных и нуклеофильных реакций.
28	Радикальные реакции. Типы механизмов.
29	Свободные радикалы, их получение, устойчивость (влияние эффектов сопряжения).
30	Субстраты радикальных реакций.
31	Синхронные реакции. Качественные правила отбора.

32	Реакционные серии. Линейные соотношения между константами равновесия и константами скоростей.	
33	Оценка индуктивных эффектов. Влияние растворителя.	
34	Оценка резонансных (мезомерных) эффектов. Влияние растворителя.	
35	Оценка пространственных (стерических) эффектов. Влияние растворителя.	
36	Механическая модель элементарного химического акта.	
37	Структура ППЭ: химические формы, потенциальные барьеры, активированный комплекс, переходное состояние.	
38	Индексы реакционной способности.	
39	Связь квантовомеханических расчетных характеристик молекулы с ее химическим поведением в реакциях различного типа: радикальных, нуклеофильных и электрофильных.	
40	Методы оценки реакционной способности молекул. Постулат Хэммонда.	
41	Приближение локализации и приближение изолированной молекулы.	
42	Индексы реакционной способности для различных типов реакций.	
43	Правила отбора в синхронных реакциях. Принцип сохранения орбитальной симметрии.	
44	Разрешенные и запрещенные реакции. Правила отбора.	
45	Методы корреляционных диаграмм, граничных орбиталей и переходного состояния.	
46	Пространственные эффекты. Стерические затруднения.	
47	Напряжение и его виды. Эффекты сближения.	
48	Растворители и их роль в химических процессах.	
49	Типы межмолекулярных взаимодействий в растворах.	
50	Классификация растворителей. Влияние растворителей на скорость гомогенных реакций.	

ПОКАЗАТЕЛИ И КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ КОМПЕТЕНЦИЙ (Шкалы оценивания)

Результаты выполнения обучающимся заданий на экзамене оцениваются по шкале - по пятибалльной шкале.

В основе оценивания лежат критерии порогового и повышенного уровня характеристик компетенций или их составляющих частей, формируемых на учебных занятиях (Таблица 2.5 рабочей программы дисциплины).

«Отлично» (5) / «зачтено» – оценка соответствует повышенному уровню и выставляется обучающемуся, если он глубоко и прочно усвоил программный материал, исчерпывающе, последовательно, четко и логически стройно его излагает, умеет тесно увязывать теорию с практикой, свободно справляется с задачами, вопросами и другими видами применения знаний, причем не затрудняется с ответом при видоизменении заданий, использует в ответе материал монографической литературы, правильно обосновывает принятое решение, владеет разносторонними навыками и приемами выполнения практических задач.

«Хорошо» (4) / «зачтено» - оценка соответствует повышенному уровню и выставляется обучающемуся, если он твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, не допуская существенных неточностей в ответе на вопрос или выполнении заданий, правильно применяет теоретические положения при решении практических вопросов и задач, владеет необходимыми навыками и приемами их выполнения.

«Удовлетворительно» (3) / «зачтено» - оценка соответствует пороговому уровню и выставляется обучающемуся, если он имеет знания только основного материала, но не усвоил его деталей, допускает неточности, демонстрирует недостаточно правильные формулировки, нарушения логической последовательности в изложении программного материала, испытывает затруднения при выполнении практических работ.

«Неудовлетворительно» (2) / «не зачтено» - оценка выставляется обучающемуся, который не достигает порогового уровня, демонстрирует непонимание проблемы, не знает значительной части программного материала, допускает существенные ошибки, неуверенно, с большими затруднениями выполняет практические работы.