

## **РАБОЧАЯ УЧЕБНАЯ ПРОГРАММА**

**по дисциплине: Реакционная способность молекул**

**Трудоёмкость в зач. ед.: вариативная часть – 3 зач. ед.;**

**в т.ч.:**

**лекции: вариативная часть – 34 час.,**

**практические (семинарские) занятия: нет**

**лабораторные занятия: нет.**

**мастер классы, индивид. и групповые консультации: нет**

**самостоятельная работа: вариативная часть – 32 час.**

**курсовые работы: нет**

**подготовка к экзамену: вариативная часть – 1 зач.ед.**

**ВСЕГО АУДИТОРНЫХ ЧАСОВ 82**

**Программу составил: д.х.н., проф. Шестаков А.Ф.**

## ОБЪЁМ УЧЕБНОЙ НАГРУЗКИ И ВИДЫ ОТЧЁТНОСТИ.

<b>Вариативная часть, в т.ч. :</b>	<u>  2  </u> зач. ед.
Лекции	<u>  34  </u> часа
Практические занятия	<u>  нет  </u>
Лабораторные работы	<u>  нет  </u>
Индивидуальные занятия с преподавателем	<u>  нет  </u>
Самостоятельные занятия, включая подготовку курсовой работы	<u>  8  </u> часов
Мастер-классы, индивидуальные и групповые Консультации	<u>  нет  </u>
Подготовка к экзамену	1 зач. ед.
<b>Итоговая аттестация</b>	Экзамен: 9 семестр
<b>ВСЕГО</b>	72 часа (2 зач. ед.)

### 1. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ

**Цель курса** – освоение студентами фундаментальных знаний в области теоретические основ реакционной способности молекул, обеспечивающих понимание связи структурной организации молекул с их реакционной способностью, изучение способов управления реакционной способностью, включая использование катализаторов.

**Задачами данного курса являются:**

- формирование базовых знаний в области прикладной теоретической химии, как дисциплины, интегрирующей знания в области квантовой химии, гомогенного и ферментативного катализа и химии комплексных соединений для решения комплексных задач по управлению скоростями химических реакций.
- Выявление структурных, термодинамических, орбитальных и спиновых факторов, определяющих эффективность взаимодействия молекул, приводящего к их химической трансформации.
- формирование подходов к выполнению студентами исследований в области молекулярной и химической физики биосистем в рамках выпускных работ на степень магистра.

### 2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ООП БАКАЛАВРИАТА

Дисциплина «Реакционная способность молекул» включает в себя разделы, которые могут быть отнесены к базовой и вариативным частям профессионального цикла М.2.

Дисциплина «Реакционная способность молекул» базируется на курсах математики, физики, химии и физической химии.

### 3. КОМПЕТЕНЦИИ ОБУЧАЮЩЕГОСЯ, ФОРМИРУЕМЫЕ В РЕЗУЛЬТАТЕ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Освоение дисциплины «Реакционная способность молекул» направлено на формирование следующих общекультурных и общепрофессиональных интегральных компетенций магистра:

#### а) общекультурные (ОК):

- способность использовать на практике фундаментальные знания для понимания сущностных явлений окружающего мира (ОК-1);
- способность активно и целенаправленно применять полученные знания, навыки и умения для выбора тематики выполнения индивидуальной научно-исследовательской работы (ОК-2);
- способность самостоятельно приобретать с помощью информационных технологий и использовать на практике новые знания и умения, способность интегрировать новую информацию в уже имеющуюся систему знаний и применять её, в том числе в новых областях знаний, непосредственно не связанных со сферой деятельности (ОК-3);
- способность к системному мышлению и анализу, к аналитической оценке событий и процессов в природе, технике и обществе (ОК-4);

#### б) профессиональные (ПК):

- готовность использовать основные законы управляющие реакционную способность молекул в последующей профессиональной деятельности в качестве научных сотрудников, преподавателей вузов, инженеров, технологов;
- готовность к решению практических задач по исследованию механизмов химических процессов;
- готовность выявить естественнонаучную сущность проблем, возникающих в ходе профессиональной деятельности в области кинетики и механизма сложных химических процессов, в том числе и в каталитических системах;
- готовность к творческому подходу в реализации научно-технических задач, основанному на систематическом обновлении полученных знаний, навыков и умений и использовании последних достижений в областях области химической физики элементарных химических процессов;
- способность к созданию физико-химических моделей исследуемых процессов, явлений и объектов, относящихся к профессиональной сфере;
- способность применять на практике умения и навыки в организации исследовательских и проектных работ, в управлении коллективом, способность самостоятельно оптимально организовывать и проводить научные исследования в качестве члена или руководителя малого коллектива и внедрять их результаты (ПК-9).

### 4. КОНКРЕТНЫЕ ЗНАНИЯ, УМЕНИЯ И НАВЫКИ, ФОРМИРУЕМЫЕ В РЕЗУЛЬТАТЕ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

#### 1. Знать:

- место и роль общих вопросов науки в научных исследованиях;
- современные проблемы физики, химии, биологии, математики;
- теоретические модели фундаментальных процессов и явлений в химии и ее приложениях;
- новейшие открытия естествознания;
- постановку проблем физико-химического моделирования;
- о взаимосвязях и фундаментальном единстве естественных наук.

**2. Уметь:**

- эффективно использовать на практике теоретические компоненты науки: понятия, суждения, умозаключения, законы;
- представить панораму универсальных методов и законов современного естествознания;
- работать на современном экспериментальном оборудовании;
- абстрагироваться от несущественных влияний при моделировании реальных физических ситуаций;
- планировать оптимальное проведение эксперимента.

**3. Владеть:**

- планированием, постановкой и обработкой результатов химического эксперимента;
- научной картиной мира;
- навыками самостоятельной работы в лаборатории с использованием современных вычислительных программ;
- математическим моделированием физико-химических задач.

**5. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ****Структура преподавания дисциплины**

**Перечень разделов дисциплины и распределение времени по темам.**

№ темы и название	Количество часов
<b>1 Введение в реакционную способность молекул</b>	4
<b>2 Вычислительная химия</b>	10
<b>3 Квантово-химические подходы к изучению реакционной способности</b>	8
<b>4 Правила сохранения орбитальной симметрии</b>	8
<b>5 Спиновые запреты</b>	4
<b>6 Межмолекулярные взаимодействия</b>	4
<b>7 Реакции электронного переноса</b>	4
<b>8 Корреляционные соотношения для реакционной способности</b>	4
<b>9 Современная концепция единства гомогенного, гетерогенного и ферментативного катализа</b>	4
<b>10 Общая характеристика особенности электронной структуры соединений переходных металлов, обуславливающих их высокую каталитическую активность</b>	4
<b>11 Редокс катализ</b>	5
<b>12 Супрамолекулярный катализ</b>	7
<b>ВСЕГО( зач. ед.(часов))</b>	<b>66 часов (2 зач. ед.)</b>

**ВИД ЗАНЯТИЙ**

**Лекции**

№ п.п.	Темы	Трудоёмкость в зач. ед. (количество часов)
--------	------	---

1	<b>Введение в реакционную способность молекул</b>	2
2	<b>Вычислительная химия</b>	6
3	<b>Квантово-химические подходы к изучению реакционной способности</b>	4
4	<b>Правила сохранения орбитальной симметрии</b>	4
5	<b>Спиновые запреты</b>	2
6	<b>Межмолекулярные взаимодействия</b>	2
7	<b>Реакции электронного переноса</b>	2
8	<b>Корреляционные соотношения для реакционной способности</b>	2
9	<b>Современная концепция единства гомогенного, гетерогенного и ферментативного катализа</b>	2
10	<b>Общая характеристика особенности электронной структуры соединений переходных металлов, обуславливающих их высокую каталитическую активность</b>	2
11	<b>Редокс катализ</b>	2
12	<b>Супрамолекулярный катализ</b>	4
ВСЕГО ( зач. ед.(часов))		34 часа (1 зач. ед.)

### Содержание дисциплины

#### Развёрнутые темы и вопросы по разделам

№ п/п	Название модулей	Разделы и темы лекционных занятий	Содержание	Объем	
				Аудиторная работа (зачетные единицы/часы)	Самостоятельная работа (зачетные единицы/часы)
1		<b>Введение в реакционную способность молекул</b>	Уравнение Аррениуса. Теория активированного комплекса. Способы интенсификации химических процессов. Понятие о гомогенном, гетерогенном и гомогенном и ферментативном катализе. Биомиметика.	2	2
2		<b>Вычислительная химия</b>	Введение в полуэмпирические и неэмпирические методы расчета структуры, свойств и реакционной способности молекул. Базисные наборы в квантовой химии. Слейтеровский детерминант и наборы сгруппированных	6	4

			<p>базисных функций. Понятие о методе псевдопотенциала и методе функционала плотности.</p> <p>Электронная корреляция. Метод конфигурационного взаимодействия.</p> <p>Многочастичная теория возмущений. Метод связанных кластеров.</p> <p>Точность квантово-химических расчетов химических свойств молекул.</p>		
3		<b>Квантово-химические подходы к изучению реакционной способности</b>	<p>Значение неэмпирических расчетов для понимания природы реакционной способности молекул. Метод индексов реакционной способности. Применение теории возмущения для описания реакционной способности. Зарядовый и орбитальный контроль.</p> <p>Концепция жестких и мягких кислот и оснований.</p>	4	4
4		<b>Правила сохранения орбитальной симметрии</b>	<p>Симметрия и свойства молекул. Точечные группы симметрии, представления и таблицы характеров.</p> <p>Симметрия молекулярных орбиталей.</p> <p>Принцип сохранения орбитальной симметрии в синхронных реакциях.</p> <p>Корреляции по симметрии вдоль пути реакции.</p> <p>Правило Вудворда-Хоффмана.</p> <p>Конротаторные и дисротаторные повороты и конфигурации молекул.</p> <p>Закономерности для реакций циклоприсоединения и циклизации.</p>	4	4
5		<b>Спиновые запреты в химии</b>	<p>Модель радикальных пар.</p> <p>Влияние магнитных полей на химические реакции.</p> <p>Магнитный изотопный эффект в радикальных реакциях.</p> <p>Парамагнитный катализ.</p> <p>Эффекты спиновой когерентности в химических реакциях.</p>	2	2
6		<b>Межмолекулярн</b>	Классификация	2	2

		<b>ые взаимодействия</b>	межмолекулярных взаимодействий. Влияние межмолекулярных сил на строение и свойства молекул и их реакционную способность. Подходы к описанию молекул в среде. Специфические и неспецифические взаимодействия. Энергия сольватации. Определение редокс-потенциалов.		
7		<b>Реакции электронного переноса</b>	Постулаты теории Маркуса. Формула Маркуса для энергии активации. Энергия реорганизации при переносе электрона от донора к акцептору в модели проникающих сфер .	2	2
8		<b>Корреляционные соотношения для реакционной способности</b>	Линейные корреляции в радикальной химии. Соотношение Поляни-Семенова. Обобщенное соотношение Поляни-Семенова. Модель пересекающихся парабол Радикальные реакции отрыва H атома.	2	2
9		<b>Современная концепция единства гомогенного, гетерогенного и ферментативного катализа</b>	Понятие об активном центре. Каталитический цикл. Причины возникновения каталитических эффектов. Формы промежуточных химических взаимодействий при катализе. Явление химической активации молекул. Проблемы фиксации азота и активации C-H связей алканов.	2	2
10		<b>Общая характеристика особенности электронной структуры соединений переходных металлов, обуславливающие их высокую каталитическую активность</b>	Многовариантность электронных состояний d-атома. Оптимальное энергетическое и геометрическое соответствие. Направленная модификация электронной структуры субстрата при его координации. Снятие запретов по спине и по симметрии в поле металлокомплексного центра.	2	2
11		<b>Редокс катализ</b>	Электронная емкость кластеров. Особенности распределения электронов по	2	3

			d-уровням. Изменение редокс характеристик при переходе от моноядерных комплексов к полиядерным. Многоэлектронные процессы и проблема некомплементарности окислителей и восстановителей		
12		<b>Супрамолекулярный катализ</b>	Комплементарность активного центра и субстрата. Кибернетическая функция катализатора и организованные молекулярные системы. Строение и механизмы действия наиболее важных ферментов. Активные центра нитрогеназы, цитохрома P-450, метанмонооксигеназы. Химическое моделирование ферментов.	4	3

#### 6. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ (используемые для преподавания)

№ п/п	Вид занятия	Форма проведения занятий	Цель
1	лекция	Изложение теоретического материала	Получение теоретических знаний по дисциплине
2	лекция	Изложение теоретического материала с помощью презентаций	Повышение степени понимания материала
3	лекция	Разбор конкретных примеров влияние эффектов структурной и надструктурной организации активных центров на их реакционную способность.	Осознание связей между теорией и практикой, а также взаимозависимостей разных дисциплин
4	Самостоятельная работа студента	Решение задач	Повышение степени понимания материала

#### 7. ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА ДЛЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ УСПЕВАЕМОСТИ, ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ПО ИТОГАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ И УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ СТУДЕНТОВ

##### Контрольно-измерительные материалы

Перечень контрольных вопросов по теме лекций для сдачи экзамена в 9-ом семестре;

1. Уравнение Аррениуса и его обоснование.
2. Теория активированного комплекса.
3. Линейные и нелинейные корреляционные соотношения в химической кинетике.

4. Обобщенное соотношение Поляни-Семенова. Модель пересекающихся парабол
5. Основные вычислительные методы квантовой химии
6. Роль корреляционных эффектов в процессах разрыва и перераспределения связей. Методы учета электронной корреляции
7. Возможности методов квантовой химии для предсказания структуры и реакционной способности молекул
8. Роль структурной организации для интенсификации химических процессов. Биомиметика.
9. Симметрия молекулярных орбиталей.
10. Использование симметрии граничных орбиталей для предсказания реакционной способности молекул.
11. Применение правил сохранения орбитальной симметрии для реакций циклоприсоединения и циклизации.
12. Эффекты сохранения спина, влияющие на реакционную способность молекул.
13. Влияние магнитного поля на химические реакции
14. Комплементарность активного центра и субстрата. Кибернетическая функция катализатора и организованные молекулярные системы.
15. Направленная модификация электронной структуры субстрата при его координации.
16. Снятие запретов по спину и по симметрии в поле металлокомплексного центра.
17. Многоэлектронные процессы и проблема некомплементарности окислителей и восстановителей
18. Электронная емкость кластеров. Редокс-процессы с участием кластеров
19. Применение теории Маркуса для реакций электронного переноса.
20. Способы оценки энергии реорганизации
21. Строение и механизмы действия наиболее важных ферментов
22. Принципы бимиметического катализа.
23. Влияние межмолекулярных сил на строение и свойства молекул и их реакционную способность.
24. Основные теоретические модели реакционной способности молекул

## **8. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ**

**Необходимое оборудование для лекций и практических занятий:** компьютер и мультимедийное оборудование (проектор, звуковая система)

## **9. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ**

### **Основная литература**

1. Н.Ф.Степанов. Квантовая механика и квантовая химия. Москва, 2001. 519 с.
2. Заградник Р., Полак Р. Основы квантовой химии, М.: Мир. 1979. 504 с.
3. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Квантовая химия органических соединений. Механизмы реакций. М.:Химия.1986.248.с.
4. Краснов К.С., Молекулы и химическая связь. М. Высшая школа, 1977. 280 с.
5. Берсукер И.Б. Электронное строение и свойства координационных соединений: введение в теорию, Л.Химия,1986. 288с.
6. Пирсон. Р. Правила симметрии в химических реакциях. М.Мир. 1979. 592 с.

### **Дополнительная литература**

1. Степанов Н.Ф., Пупышев В.И. Квантовая механика молекул и квантовая химия. М.: Изд-во Моск. ун-та, 1991. 384 с.
2. Фудзинага С., Метод молекулярных орбиталей, М.Мир. 1983. 461с.
3. Абаренков И.В., Братцев В.Ф., Тулуб А.В. Начала квантовой химии. М.: Высш.шк., 1989. 303 с.
4. Кларк Т. Компьютерная химия. М.Мир.1990. 381с.
5. Болотин А.Б., Степанов Н.Ф. Теория групп и ее применение в квантовой механике молекул. М.:Изд-во Моск.ун-та, 1973. 227 с.
6. Кукушкин А.К. Задачи по квантовой химии и строению молекул. Изд-во Моск. ун-та. 1987. 155 с.
7. Хохштрассер Р. Молекулярные аспекты симметрии. М.: Мир.1968. 384с.
8. Харгиттаи И., Харгиттаи М. Симметрия глазами химика. М.: Мир. 1989. 494 с.
9. Симкин Б.Я., Клецкий М.Е., Глуховцев М.Н. Задачи по теории строения молекул. Ростов-на-Дону: Изд-во Феникс. 1997. 272 с.
10. Дьюар М., Догерти Р. Теория возмущений молекулярных орбиталей в органической химии. М.: Мир. 1977.
11. Жидомиров Г.М., Багатурьянц А.А., Абронин И.А., Прикладная квантовая химия. М.: Химия, 1979. 295 с.

Программу составил

\_\_\_\_\_ (Шестаков А.Ф., проф. д.х.н.)