

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего
образования
«ИРКУТСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ»

Структурное подразделение «Химической технологии им. Н.И. Ярополова»

УТВЕРЖДЕНА:
на заседании кафедры
Протокол №7 от 14 мая 2025 г.

Рабочая программа дисциплины

«ТЕОРИЯ ТРАНСФОРМАЦИИ МОЛЕКУЛЯРНЫХ СИСТЕМ»

Направление: 18.03.01 Химическая технология

Химическая технология природных энергоносителей и углеродных материалов

Квалификация: Бакалавр

Форма обучения: очная

Документ подписан простой
электронной подписью
Составитель программы:
Дьячкова Светлана
Георгиевна
Дата подписания: 17.06.2025

Документ подписан простой
электронной подписью
Утвердил: Боженков Георгий
Викторович
Дата подписания: 17.06.2025

Документ подписан простой
электронной подписью
Согласовал: Дьячкова
Светлана Георгиевна
Дата подписания: 17.06.2025

Год набора – 2025

Иркутск, 2025 г.

1 Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесённых с планируемыми результатами освоения образовательной программы

1.1 Дисциплина «Теория трансформации молекулярных систем» обеспечивает формирование следующих компетенций с учётом индикаторов их достижения

Код, наименование компетенции	Код индикатора компетенции
ОПК ОС-3 Способен изучать, анализировать, использовать механизмы химических реакций, происходящих в технологических процессах и окружающем мире, основываясь на знаниях о строении вещества, природе химической связи и свойствах различных классов химических элементов, соединений, веществ и материалов	ОПК ОС-3.4

1.2 В результате освоения дисциплины у обучающихся должны быть сформированы

Код индикатора	Содержание индикатора	Результат обучения
ОПК ОС-3.4	Знает основные характеристики открытых и закрытых молекулярных систем. Умеет использовать теорию МО для описания трансформации молекулярных систем. Владеет навыками построения молекулярных диаграмм и объяснения превращений в изолированных молекулярных системах	Знать Знает основные характеристики открытых и закрытых молекулярных систем Уметь Умеет использовать теорию МО для описания трансформации молекулярных систем Владеть Владеет навыками построения молекулярных диаграмм и объяснения превращений в изолированных молекулярных системах

2 Место дисциплины в структуре ООП

Изучение дисциплины «Теория трансформации молекулярных систем» базируется на результатах освоения следующих дисциплин/практик: «Органическая химия», «Основы общей и неорганической химии», «Физика»

Дисциплина является предшествующей для дисциплин/практик: «Производственная практика: преддипломная практика»

3 Объем дисциплины

Объем дисциплины составляет – 3 ЗЕТ

Вид учебной работы	Трудоемкость в академических часах (Один академический час соответствует 45 минутам астрономического часа)	
	Всего	Семестр № 3
Общая трудоемкость дисциплины	108	108
Аудиторные занятия, в том числе:	32	32
лекции	16	16
лабораторные работы	0	0
практические/семинарские занятия	16	16

Самостоятельная работа (в т.ч. курсовое проектирование)	40	40
Трудоемкость промежуточной аттестации	36	36
Вид промежуточной аттестации (итогового контроля по дисциплине)	Экзамен	Экзамен

4 Структура и содержание дисциплины

4.1 Сводные данные по содержанию дисциплины

Семестр № 3

№ п/п	Наименование раздела и темы дисциплины	Виды контактной работы						СРС		Форма текущего контроля
		Лекции		ЛР		ПЗ(СЕМ)				
		№	Кол. Час.	№	Кол. Час.	№	Кол. Час.	№	Кол. Час.	
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
1	Классификация и общие понятия и свойства изолированных и неизолированных молекулярных систем	1	2			1	4	1, 2	8	Устный опрос
2	Основы теории молекулярных орбиталей применительно к изолированным системам	2	4			2	4	1, 2	8	Устный опрос
3	Перициклические реакции с точки зрения теории МО на базе построения молекулярных диаграмм	3	4			3	4	1, 1, 2	10	Устный опрос
4	Стереохимия молекулярных систем	4	2			5	2	1, 2	6	Устный опрос
5	Применение теории МО для объяснения трансформации молекулярных систем в условиях гомолитических и гетеролитических процессов	5	4			4	2	1, 2	8	Устный опрос
	Промежуточная аттестация								36	Экзамен
	Всего		16				16		76	

4.2 Краткое содержание разделов и тем занятий

Семестр № 3

№	Тема	Краткое содержание
1	Классификация и общие понятия и свойства изолированных и неизолированных молекулярных систем	Классификация и общие понятия о молекулярных системах. Общие свойства неизолированных молекулярных систем..Стехиометрия молекулярных систем. Операции симметрии, элементы симметрии. Кооперативные молекулярные системы.. Понятие, принцип образования Изолированных молекулярные системы
2	Основы теории молекулярных орбиталей применительно к изолированным системам	Принцип образования молекулярных орбиталей.. Построение молекулярных диаграмм
3	Перициклические реакции с точки зрения теории МО на базе построения молекулярных диаграмм	Рассмотрение и объяснение на базе построения молекулярных диаграмм перициклических реакций: Объяснение перициклических реакций с точки зрения теории МО. (разрешенные и запрещенные по симметрии превращения молекулярных систем)
4	Стереохимия молекулярных систем	В данной теме рассматриваются основные виды стереохимии, наблюдаемые с МС: оптическая изомерия, геометрическая и конформационная. Даны основы применения стереохимии при построении и трансформации изолированных и неизолированных молекулярных систем
5	Применение теории МО для объяснения трансформации молекулярных систем в условиях гомолитических и гетеролитических процессов	На базе основных понятий и приближений теории МО описываются и объясняются превращения различных классов соединений в реакциях нуклеофильного, радикального и электрофильного замещения и присоединения, катионотропных и анионотропных перегруппировок с привлечением данных стехиометрии и трансформации интермедиатов

4.3 Перечень лабораторных работ

Лабораторных работ не предусмотрено

4.4 Перечень практических занятий

Семестр № 3

№	Темы практических (семинарских) занятий	Кол-во академических часов
1	Классификация и свойства молекулярных систем	4
2	Теория молекулярных орбиталей	4
3	Применение теории МО для объяснения трансформации молекулярных систем в перициклических процессах	4

4	Применение теории МО для объяснения трансформации молекулярных систем	2
5	Оптическая, геометрическая, конформационная изомерия	2

4.5 Самостоятельная работа

Семестр № 3

№	Вид СРС	Кол-во академических часов
1	Подготовка к практическим занятиям	20
2	Подготовка к экзамену	20

В ходе проведения занятий по дисциплине используются следующие интерактивные методы обучения: нет

5 Перечень учебно-методического обеспечения дисциплины

5.1 Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

5.1.1 Методические указания для обучающихся по практическим занятиям

Дьячкова С. Г. Методические указания по практическим работам и выполнению СРС по дисциплине «Теория трансформации молекулярных систем» / С. Г. Дьячкова, эл.издание, Иркутск, 2019

5.1.2 Методические указания для обучающихся по самостоятельной работе:

Дьячкова С. Г. Методические указания по практическим работам и выполнению СРС по дисциплине «Теория трансформации молекулярных систем» / С. Г. Дьячкова, эл.издание, Иркутск, 2019

6 Фонд оценочных средств для контроля текущей успеваемости и проведения промежуточной аттестации по дисциплине

6.1 Оценочные средства для проведения текущего контроля

6.1.1 семестр 3 | Устный опрос

Описание процедуры.

На экзамен выносятся материал практических и лекционных занятий, предусмотренных рабочими программами учебных дисциплин, в объемах, позволяющих объективно оценить степень усвоения обучающимися учебного материала.

Экзамен проводится в устной форме. Обучающимся предъявляются на выбор билеты для проведения промежуточной аттестации по дисциплине, включающие 2 задания.

Обучающемуся дается 15-20 минут на подготовку, после чего он приступает к ответу.

Обучающиеся, имеющие неудовлетворительные оценки по отдельным занятиям, отвечают, кроме основных вопросов, еще по дополнительному вопросу. Прием экзаменов оценивается на «отлично», «хорошо», «удовлетворительно» и «неудовлетворительно».

Отметка объявляется обучающемуся преподавателем непосредственно после сдачи экзамена.

Критерии оценивания.

Отлично- 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, не затрудняется с ответом при видоизменении задания, владеет разносторонними навыками и приёмами выполнения практических задач.

Хорошо - Твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его. Не допускает существенных неточностей в ответе на вопрос, правильно применяет теоретические положения при решении практических вопросов и задач, владеет необходимыми навыками и приёмами их выполнения.

Удовлетворительно - Имеет знания только основного материала, но не усвоил его деталей, допускает неточности, недостаточно правильные формулировки, нарушение логической последовательности в изложении программного материала, испытывает затруднения при выполнении практических заданий.

Неудовлетворительно - Не знает значительной части программного материала, допускает существенные ошибки, неуверенно, с большими затруднениями выполняет практические задания.

6.2 Оценочные средства для проведения промежуточной аттестации

6.2.1 Критерии и средства (методы) оценивания индикаторов достижения компетенции в рамках промежуточной аттестации

Индикатор достижения компетенции	Критерии оценивания	Средства (методы) оценивания промежуточной аттестации
ОПК ОС-3.4	Исчерпывающе, последовательно, четко и логически стройно излагает теоретический материал, использует в ответе материал научной литературы, свободно справляется с задачами, не затрудняется с ответом при видоизменении заданий, правильно обосновывает принятое решение	Устный опрос

6.2.2 Типовые оценочные средства промежуточной аттестации

6.2.2.1 Семестр 3, Типовые оценочные средства для проведения экзамена по дисциплине

6.2.2.1.1 Описание процедуры

1. Классификация и общие понятия о молекулярных системах. Неизолированные и изолированные молекулярные системы
2. Общие свойства неизолированных молекулярных систем

3. Стехиометрия неизолированных молекулярных систем. Операции симметрии, элементы симметрии.
4. Кооперативные молекулярные системы. Примеры.
5. Изолированные молекулярные системы. Понятие, принцип образования
6. Основы теории молекулярных орбиталей применительно к изолированным системам.
7. Принцип образования молекулярных орбиталей. Связывающие и разрыхляющие МО
8. Приложение теории молекулярных орбиталей к сопряженным изолированным молекулярным системам. Метод Хюккеля
9. Молекулярная диаграмма бутадиена.
10. Понятие химической связи с точки зрения теории молекулярных орбиталей, гибридизация, сопряжение, делокализация
11. Конформационная изомерия изолированных молекулярных систем на примере алкано и циклоалканов.
12. Влияние пространственных и электростатических взаимодействий на устойчивость конформеров.
13. Циклодимеризация этилена (2+2 циклоприсоединение). Правило Вудворда-Гофмана. Объяснение реакции с точки зрения теории молекулярных орбиталей. Реакции разрешенные и запрещенные по симметрии
14. Оптическая изомерия изолированных молекулярных систем. (Хиральность. Энантиомеры. Абсолютная конфигурация. Диастереомеры. Рацемическая смесь)
15. E- и Z- изомерия изолированных молекулярных систем.
16. Пространственные эффекты и реакционная способность органических соединений
17. Гиперконъюгация, Полярный эффект (P). Эффект прямого полярного сопряжения.
18. Эффект Натана – Беккера. Полярный эффект (P). Эффект прямого полярного сопряжения (C)
19. Теория молекулярных орбиталей в приложении к сопряженным изолированным молекулярным системам на примере построение молекулярной диаграммы бензола).
20. Теория молекулярных орбиталей в приложении к сопряженным изолированным молекулярным системам на примере построение молекулярной диаграммы бутадиена.
21. Реакции 4+2 циклоприсоединения. (Правило Вудворда-Гофмана. Объяснение с точки зрения метода молекулярных орбиталей для изолированных молекулярных систем).
22. Циклодимеризация этилена, 2+2 циклоприсоединение (Объяснение с точки зрения метода молекулярных орбиталей для изолированных молекулярных систем. Взаимодействия разрешенные и запрещенные по симметрии)
23. Циклизация бутадиена(Объяснение с точки зрения метода молекулярных орбиталей для изолированных молекулярных систем. Взаимодействия разрешенные и запрещенные по симметрии)
24. Перегруппировки без изменения углеродного скелета. Катиотропные.
25. Перегруппировки без изменения углеродного скелета. Аниотропные
26. Перегруппировки с изменением углеродного скелета. Электрофильные.
27. Перегруппировки с изменением углеродного скелета. Нуклеофильные
28. Электроциклические взаимодействия изолированных молекулярных систем на примере циклизации бутадиена с точки зрения теории МО
29. Изолированные молекулярные системы в нуклеофильном замещении на примере алканов. (Строение и устойчивость карбокатионов, стереохимия продуктов замещения).
30. Изолированные молекулярные системы в нуклеофильном замещении на примере соединений с sp^2 гибридизованным атомом углерода. (Строение и устойчивость карбокатионов, стереохимия продуктов замещения).

31. Изолированные молекулярные системы в нуклеофильном замещении в на примере соединений ароматического ряда (S_NAr)
32. Изолированные молекулярные системы в электрофильном замещении у различных классов органических соединений. Лимитирующая стадия. Электрофильные агенты. Карбанион. Стереохимия электрофильного замещения

Пример задания:

Билет №5\Пример задания:

1. Основы теории молекулярных орбиталей применительно к изолированным системам.
2. Циклодимеризация этилена (2+2 циклоприсоединение) Правило Вудворда-Гофмана. Объяснение реакции с точки зрения метода МО. Реакции разрешенные и запрещенные по симметрии
3. Оптическая изомерия. Хиральность. Энантиомеры. Абсолютная конфигурация. Диастереомеры. Рацемическая смесь.

6.2.2.1.2 Критерии оценивания

Отлично	Хорошо	Удовлетворительн о	Неудовлетворительно
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, не затрудняется с ответом при видоизменении задания, владеет разносторонними навыками и приемами выполнения практических задач.	Твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его. Не допускает существенных неточностей в ответе на вопрос, правильно применяет теоретические положения при решении практических вопросов и задач, владеет необходимыми навыками и приемами их выполнения	Имеет знания только основного материала, но не усвоил его деталей, допускает неточности, недостаточно правильные формулировки, нарушение логической последовательности в изложении программного материала, испытывает затруднения при выполнении практических заданий	Не знает значительной части программного материала, допускает существенные ошибки, неуверенно, с большими затруднениями выполняет практические задания

7 Основная учебная литература

1. Барышок В. П. Механизмы органических реакций : учебное пособие / В. П. Барышок, 2013. - 123.
2. Ермаков А. И. Квантовая механика и квантовая химия : учебное пособие для вузов по специальности ВПО 020101.65 "Химия" / А. И. Ермаков, 2015. - 555.
3. Цирельсон В. Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела [Электронный ресурс] : учебное пособие для вузов / В. Г. Цирельсон, 2017. - 522 с.

8 Дополнительная учебная литература и справочная

1. Сайкс П. Механизмы реакций в органической химии: Ввод. курс: [Перевод] / П. Сайкс, 2000. - 169 с. https://e.lanbook.com/book/94104#book_name
2. Механизмы органических реакций : учеб. пособие / Под. ред. А. П. Сахарова, С. А. Матасовой, 1990. - 126.
3. Потапов Виктор Михайлович. Стереохимия : учеб. пособие для хим. спец. ун-тов / Виктор Михайлович Потапов, 1988. - 463.
4. Сайкс П. Механизмы реакций в органической химии: Ввод. курс: [Перевод] / П. Сайкс, 2000. - 169.
5. Племенков В. В. Молекулярные орбитали органических функциональных групп : учебное пособие / В. В. Племенков, 1984. - 65.
6. Гельман Г. Г. А. Квантовая химия : научное издание / Г. Гельман, 2011. - 533.
7. Шиврин Г. Н. Прикладная квантовая химия : научные труды / Г. Н. Шиврин, 2009. - 313.

9 Ресурсы сети Интернет

1. <http://library.istu.edu/>
2. <https://e.lanbook.com/>

10 Профессиональные базы данных

1. <http://new.fips.ru/>
2. <http://www1.fips.ru/>

11 Перечень информационных технологий, лицензионных и свободно распространяемых специализированных программных средств, информационных справочных систем

1. Свободно распространяемое программное обеспечение Microsoft Windows (Подписка DreamSpark Premium Electronic Software Delivery (3 years). Сублицензионный договор №14527/МОС2957 от 18.08.16г.) 2. Microsoft Office

12 Материально-техническое обеспечение дисциплины

1. . Доска магнитно-маркерная INDEX настенная ,размер 1x1.8 м

2. Проектор Acer P1383W (3D.DLP.1280*800.)