



МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования  
«ИРКУТСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»  
ФГБОУ ВО «ИГУ»  
Кафедра общей и неорганической химии



УТВЕРЖДАЮ

Декан химического факультета, доц.  
Химический факультет А.И. Вильмс

«20» мая 2020 г.

Рабочая программа дисциплины Б1.О.16

Наименование дисциплины **ОСНОВЫ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ**

Направление подготовки **04.03.01 – Химия**

Направленность подготовки: **Теоретическая и прикладная химия. Химия нефти и газа**

Квалификация выпускника – **БАКАЛАВР**

Форма обучения **очная**

Согласовано с УМК химического  
факультета

Протокол № 6 от «20» мая 2020 г.

Председатель \_\_\_\_\_  
Вильмс А.И.

Рекомендовано кафедрой общей и  
неорганической химии:

Протокол № 6 от «15» мая 2020 г.

Зав. кафедрой \_\_\_\_\_  
Сафронов А.Ю.

Иркутск 2020 г.

1. Цели и задачи дисциплины
2. Место дисциплины в структуре ОПОП.
3. Требования к результатам освоения дисциплины
4. Объем дисциплины и виды учебной работы
5. Содержание дисциплины
  - 5.1 Содержание разделов и тем дисциплины
  - 5.2 Разделы дисциплины и междисциплинарные связи с обеспечиваемыми (последующими) дисциплинами
  - 5.3 Разделы и темы дисциплин и виды занятий
6. Перечень семинарских, практических занятий, лабораторных работ, план самостоятельной работы студентов, методические указания по организации самостоятельной работы студентов
  - 6.1. План самостоятельной работы студентов
  - 6.2. Методические указания по организации самостоятельной работы студентов
7. Примерная тематика курсовых работ (проектов) (при наличии)
8. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины (модуля):
  - а) основная литература;
  - б) дополнительная литература;
  - в) программное обеспечение;
  - г) базы данных, поисково-справочные и информационные системы
9. Материально-техническое обеспечение дисциплины
10. Образовательные технологии
11. Оценочные средства (ОС)

## I. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ:

*Цель дисциплины* — Дать студентам — химикам знания в области современной теории химических реакций.

*Задачи курса* — Основная задача теоретического курса — освоение студентами взаимосвязи между строением молекул и их химическими свойствами.

## II. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОПОП ВО

2.1. Учебная дисциплина «Основы химических реакций» ФТД.04 относится к факультативной части учебного плана программы подготовки по направлению 04.03.01 Химия.

2.2. Для изучения данной учебной дисциплины необходимы знания, умения и навыки, формируемые предшествующими дисциплинами: «Общая и неорганическая химия», «Физика», «Математика».

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

Освоение дисциплины «Основы химических реакций» служит естественной базой для более глубокого усвоения таких дисциплин, как: «Органическая химия», «Химические основы биологических процессов», при выполнении квалификационных работ.

## III. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Процесс освоения дисциплины направлен на формирование элементов следующих компетенций в соответствии с ФГОС ВО по данному направлению подготовки 04.03.01 Химия.

**Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с индикаторами достижения компетенций**

| Компетенция                                                                                            | Индикаторы компетенций                                                                                                                                            | Результаты обучения                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| ОПК-3.1 Применяет теоретические и полужемпирические модели при решении задач химической направленности | ИДК <sub>ОПК-3.1</sub> Предлагает интерпретацию результатов расчетно-теоретических работ с использованием теоретических основ традиционных и новых разделов химии | <b>Знать:</b> фундаментальные разделы химии, необходимые для проведения исследований (состав, строение и химические свойства основных простых веществ и химических соединений, связь строения вещества и протекания химических процессов).<br><b>Уметь:</b> анализировать литературные и экспериментальные данные; применять основные законы химии при обсуждении полученных результатов.<br><b>Владеть:</b> навыками использования химического и физико-математического аппарата, необходимого для профессиональной деятельности; на- |

|  |  |                                                                                                                                                     |
|--|--|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
|  |  | <p>выками описания свойств веществ на основе закономерностей, вытекающих из периодического закона и Периодической системы химических элементов.</p> |
|--|--|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|

#### IV. СОДЕРЖАНИЕ И СТРУКТУРА ДИСЦИПЛИНЫ

Трудоемкость дисциплины составляет 1 зачетных единиц, 36 часа. Форма промежуточной аттестации: зачет.

**4.1** Содержание дисциплины, структурированное по темам, с указанием видов учебных занятий и отведенного на них количества академических часов

| №<br>п/п | Раздел дисциплины/темы              | Семестр | Виды учебной работы, включая самостоятельную работу обучающихся и трудоемкость (в часах) |                       |                                |                            |                        | Формы текущего контроля успеваемости;<br><br>Форма промежуточной аттестации<br><br>(по семестрам) |
|----------|-------------------------------------|---------|------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------|--------------------------------|----------------------------|------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------|
|          |                                     |         | Контактная работа преподавателя с обучающимися                                           |                       |                                |                            | Самостоятельная работа |                                                                                                   |
|          |                                     |         | Лекции                                                                                   | Лабораторные занятия) |                                | Консультации/<br><br>КСР   |                        |                                                                                                   |
|          |                                     |         |                                                                                          | Всего часов           | Из них практическая подготовка |                            |                        |                                                                                                   |
| 1.       | Введение                            | 2       | 2                                                                                        | Не предусмотрены      |                                | Не предусмотрены<br><br>/2 |                        |                                                                                                   |
| 2.       | Строение атома                      | 2       | 4                                                                                        |                       |                                |                            | 2                      |                                                                                                   |
| 3.       | Ковалентная химическая связь        | 2       | 4                                                                                        |                       |                                |                            | 4                      |                                                                                                   |
| 4.       | Реакции и реагенты                  | 2       | 4                                                                                        |                       |                                |                            | 6                      |                                                                                                   |
| 5.       | Алгоритм анализа химических свойств | 2       | 4                                                                                        |                       |                                |                            | 4                      |                                                                                                   |
|          | Зачёт                               | 2       |                                                                                          |                       |                                |                            |                        |                                                                                                   |
|          | Итого часов                         |         | 18                                                                                       |                       |                                | 0/2                        | 16                     |                                                                                                   |

#### 4.2 План внеаудиторной самостоятельной работы обучающихся по дисциплине

| Семестр<br>2                                                                                         | Название раздела, темы                         | Самостоятельная работа обучающихся                      |                                                   |                        | Оценочное<br>средство         | Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------|---------------------------------------------------------|---------------------------------------------------|------------------------|-------------------------------|--------------------------------------------------------|
|                                                                                                      |                                                | Вид самостоятельной работы                              | Задание                                           | Затраты времени (час.) |                               |                                                        |
|                                                                                                      | Строение атома                                 | Подготовка к самостоятельной работе                     | Составление электронных формул                    | 2                      | Самостоятельная работа №1     | См. список литературы №1, 2                            |
|                                                                                                      | Ковалентная химическая связь                   | Работа с литературой, материалом лекций                 | Решение задач по теме.                            | 4                      | Устный опрос №2, вопросы 1-8  | См. список литературы №1, 3                            |
|                                                                                                      | Реакции и реагенты.<br>Типы химических реакций | Подготовка отчета по ЛР, подготовка к устному опросу №2 | Решение задач по теме.<br>Написание отчетов по ЛР | 6                      | Устный опрос №2, вопросы 9-11 | См. список литературы №1, 2, 3                         |
|                                                                                                      | Алгоритм анализа химических свойств            | подготовка к устному опросу №1                          | Написание отчетов по ЛР                           | 4                      | Устный опрос №1, вопросы 4-6  | См. список литературы №2, 3                            |
| Общая трудоемкость самостоятельной работы по дисциплине (16 час)                                     |                                                |                                                         |                                                   |                        |                               |                                                        |
| Бюджет времени самостоятельной работы, предусмотренный учебным планом для данной дисциплины (16 час) |                                                |                                                         |                                                   |                        |                               |                                                        |

Контактная работа при проведении учебных занятий по дисциплине включает в себя:

занятия лекционного типа, индивидуальную работу обучающихся с преподавателем.

## 4.3 Содержание учебного материала

### Введение

#### Строение атома

Уравнение Шрёдингера. Полярные координаты. Атомные волновые функции и орбитали.

Электронное строение атомов элементов, исходя из результатов решения уравнения Шрёдингера. Связь строения атома и положения элемента в Периодической системе химических элементов Д.И.Менделеева. Связь «Строение – Положение в ПС – Свойства».

Потенциал ионизации и сродство к электрону, электроотрицательность атомов.

#### Химическая связь

Качественное описание ковалентной связи в рамках теории молекулярных орбиталей (МО ЛКАО). Эффективное перекрывание атомных орбиталей различной симметрии. Симметрия МО ( $\sigma$ - и  $\pi$ -связи).

Гибридизация — модель или физическое явление? Взаимное отталкивание электронов в атоме. Тетрагональная, тригональная и линейная гибридизация s- и p-орбиталей атома углерода.

Локализованная ковалентная связь. Связи углерод - углерод и углерод - гетероатом. Неподеленные электронные пары (НЭП). Несвязывающие орбитали. Полярность связи. Структура связывающих и разрыхляющих орбиталей (оценка вкладов атомных орбиталей в зависимости от их потенциала ионизации).

Распределение электронной плотности. Индуктивный эффект и эффект поля.

Делокализованная связь. Взаимодействие p- и  $\pi$ -орбиталей в органических молекулах.  $\pi$ -приближение в теории МО. Делокализованные  $\pi$ -МО и метод резонансных структур. Полярное и неполярное сопряжение. Прямое полярное сопряжение. Кросс-сопряжение.

Физические характеристики связи: длина, валентные углы, энергия, полярность, поляризуемость, дипольный момент.

Спектральные характеристики свойств химической связи:

ФЭС (фотоэлектронная) — спектроскопия. ПИ (потенциал ионизации) и энергия занятых орбиталей.

УФ (ультрафиолетовая) — спектроскопия. Максимум поглощения и энергия перехода ВЗМО — НСМО. Типы электронных переходов.

ИК (инфракрасная) — спектроскопия. Вращательные и колебательные спектры. Частота валентного колебания ( $\nu$ ) и кривизна потенциальной ямы («упругость» связи).

ЯМР (ядерного магнитного резонанса) — спектроскопия на ядрах  $^{13}\text{C}$ . Химический сдвиг и степень электронного экранирования углеродного ядра.

#### Реакции и реагенты. Типы химических реакций

Субстрат (реакционный центр), реагент, интермедиат, продукт. Реакции присоединения (A), замещения (S), отщепления (элиминирования, E), перегруппировки (R). Окислительно-восстановительные (Red-Ox) реакции (формальная степень окисления углеродного атома в органических молекулах). Полимеризация (P). Циклизация (C).

Гетеролитический и гомолитический разрыв связи. Гетеролитические (нуклеофильные и электрофильные) реакции.

Кислоты и основания, как реагенты в гетеролитических реакциях — электрофилы (E) и нуклеофилы (N). Качественная и количественная  $pK_a$  оценка кислотности и стабильности сопряженных оснований.

Незаряженные кислоты Бренстеда. X-H, O-H, S-H, N-H, и C-H — кислоты.

НЭП-основность.

Основания, сопряженные незаряженным кислотам Бренстеда.

Кислоты Льюиса. Протон ( $H^+$ ). Положительно заряженные X-, S-, N- и C- электрофилы и методы их генерирования.

Принцип ЖМКО (жесткие и мягкие кислоты и основания). Гомолитические (свободно-радикальные) реакции. Методы генерирования свободнорадикальных реагентов.

Кинетические и термодинамические аспекты органических реакций.

Константа скорости и энергия активации. Переходное состояние. Синхронные и стадийные реакции. Лимитирующая стадия. Порядок и молекулярность реакции. Сечение поверхности потенциальной энергии на координату реакции (СППЭ). Постулат Хэммонда.

#### **Алгоритм анализа химических свойств**

Анализ структурной формулы (отбор по типу реакции: A, S, E, Red-Ox, R, P, C).

Анализ распределения электронной плотности, электронные эффекты, структура граничных МО (Отбор по типу разрыва связи. Кислотность и основность).

Выбор реагентов.

#### **IV.3.1. Перечень практических занятий и лабораторных работ**

*Учебным планом не предусмотрены*



**4.3.2. Перечень тем (вопросов), выносимых на самостоятельное изучение самостоятельной работы студентов**

| № п/п | Тема                                        | Задание                                                                         | Формируемая компетенция                                                                                | ИДК                                                                                                                                                                  |
|-------|---------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 1     | Строение атома                              | Составление электронных формул элементов на основании их положения в ПС         | ОПК-3.1. Применяет теоретические и полуэмпирические модели при решении задач химической направленности | ИДК <sub>ОПК-3.1</sub><br>Предлагает интерпретацию результатов расчетно-теоретических работ с использованием теоретических основ традиционных и новых разделов химии |
| 2     | Химическая связь                            | Качественное описание ковалентной связи в рамках теории молекулярных орбиталей. | То же                                                                                                  | То же                                                                                                                                                                |
| 3     |                                             | Распределение электронной плотности. Индуктивный и мезомерный эффекты.          | То же                                                                                                  | То же                                                                                                                                                                |
| 4     | Реакции и реагенты. Типы химических реакций | Реакции присоединения, замещения, отщепления                                    | То же                                                                                                  | То же                                                                                                                                                                |
| 5     |                                             | Кислоты и основания. Электрофилы и нуклеофилы. Радикалы                         | То же                                                                                                  | То же                                                                                                                                                                |

|   |                                     |                                                                                                                     |       |       |
|---|-------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------|-------|
| 6 | Алгоритм анализа химических свойств | Анализ структурной формулы. Анализ распределения электронной плотности, электронные эффекты, структура граничных МО | То же | То же |
|---|-------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------|-------|

#### 4.4. Методические указания по организации самостоятельной работы студентов

Самостоятельная работа студентов, связанная с закреплением теоретического материала в виде решения заданий и подготовке к устному собеседованию, проводится во внеаудиторное время. Примеры решения типовых задач представлены в рекомендуемых учебных пособиях и задачаниках.

### V. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Электронная информационно-образовательная среда университета обеспечивает доступ к электронным учебным изданиям и электронным образовательным ресурсам, указанным в рабочей программе дисциплины.

При использовании в образовательном процессе печатных изданий библиотечный фонд укомплектован печатными изданиями из расчета не менее 0,25 экземпляра каждого из изданий, указанных в рабочей программе дисциплины, на одного обучающегося из числа лиц, одновременно осваивающих соответствующую дисциплину.

Обучающимся обеспечен доступ к современным профессиональным базам данных и информационным справочным системам.

#### 1. а) основная литература

1. Неорганическая химия. Химия элементов [Электронный ресурс] : учеб. для студ. вузов, обуч. по напр. 510500 "Химия" и спец. 011000 "Химия" / Ю. Д. Третьяков и др. - 2-е изд., перераб. и доп. - ЭВК. - М. : Изд-во МГУ : Академкнига, 2007. - Режим доступа: Электронный читальный зал "Библиотех". - ISBN 978-5-211-05330-4. - ISBN 978-5-94628-297-0.

Т. 1. - 545 с. - ISBN 978-5-211-05332-2. - ISBN 978-5-94628-298-7.

2. Основы неорганической химии / Коттон Ф, Уилкинсон Дж. 1979 – 680 с.

3. Химия. [Электронный ресурс] — Электрон. дан. — Кемерово: КемГУ, 2015. — 95 с. — Режим доступа: <http://e.lanbook.com/book/69987>



#### б) программное обеспечение, базы данных, информационно-справочные и поисковые системы

<https://isu.bibliotech.ru/>

<http://foroff.phys.msu.ru/phys/>

<http://www.gomulina.orc.ru/index1.html>

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

### **6.1. Учебно-лабораторное оборудование:**

Учебные аудитории №5, 6 оснащены мультимедийным оборудованием, имеются демонстрационные модели (шаро-стержневые, Бриглеба-Стюарта, объёмные) для наглядного представления о взаимном пространственном расположении атомных орбиталей, молекулярных структур.

## **VII. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ**

В процессе изучения дисциплины используются как традиционные так и инновационные технологии, активные и интерактивные методы и формы обучения: технология объяснительно-иллюстративного объяснения с элементами проблемного изложения, технология профессионально-ориентированного обучения, лекции, объяснительно-иллюстративный метод с элементами проблемного изложения, контрольные и самостоятельные работы, разбор конкретных ситуаций.

## **VIII. ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ**

### **Оценочные средства (ОС):**

11.1. Оценочные средства для входного контроля - нет.

11.2. Назначение оценочных средств текущего контроля - выявить сформированность составляющих частей компетенций ОПК 3.1. Формируются в соответствии с ЛНА университета в виде устных опросов, выполнения самостоятельных работ.

### **Задания для самостоятельной работы:**

1. Положение символа в периодической системе и орбитальное строение соответствующего атома.
2. Физический смысл номера столбца периодической системы.
3. Физический смысл номера строки периодической системы.
4. Физический смысл главного, орбитального и магнитного чисел атомной волновой функции.
5. Радиальные и аксиальные узлы волновой функции.
6. Форма и расположение атомных орбиталей с заданными наборами квантовых чисел.
7. Эффективное (связывающее или разрыхляющее) перекрывание волновых функций и соответствующие им молекулярные орбитали.
8. Неэффективное перекрывание. Эффективные и неэффективные столкновения атомов и молекул.

11.3. Оценочные средства для промежуточной аттестации (в форме зачёта).

## ПРИМЕРНЫЙ ПЕРЕЧЕНЬ ВОПРОСОВ К ЗАЧЁТУ.

### Вопросы для зачета

1. Потенциал ионизации, сродство к электрону, электроотрицательность атомов.
2. Типы химических связей. Ионная, ковалентная (полярная, неполярная).
3. Метод МО ЛКАО для ковалентной связи.
4. Связывающие, несвязывающие и разрыхляющие МО.
5. Структурные формулы и геометрия молекул.
6. Химическая реакция — процесс, сопровождающийся разрывом и (или) образованием химических связей. Реакционный центр. Субстрат, реагент, продукты
7. Синхронные и стадийные реакции.
8. Механизм реакции.
9. Энергетический профиль реакции — сечение поверхности потенциальной энергии реакции. Лимитирующая стадия.
10. Типы химических реакций. Диссоциация, ассоциация, замещение, присоединение.
11. Кислоты и основания Бренстеда.
12. Кислоты и основания Льюиса.
13. Гомолитические и гетеролитические реакции.
14. Окислительно-восстановительные реакции.

### Планируемые результаты обучения для формирования компетенций

| Индикаторы достижения компетенции                                                                                                                                    | Результаты обучения (знать, уметь, владеть)                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                           | Процедура оценивания                                                   |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------|
| ИДК <sub>ОПК-3.1</sub><br>Предлагает интерпретацию результатов расчетно-теоретических работ с использованием теоретических основ традиционных и новых разделов химии | <b>Знать:</b> фундаментальные разделы химии, необходимые для проведения исследований (состав, строение и химические свойства основных простых веществ и химических соединений, связь строения вещества и протекания химических процессов).<br><b>Уметь:</b> анализировать литературные и экспериментальные данные; применять основные законы химии при обсуждении полученных результатов.<br><b>Владеть:</b> навыками использования химического и физико-математического аппарата, необходимого для профессиональной деятельности; навыками описания свойств веществ на основе закономерностей, выте- | См. вопросы для текущего контроля<br>Выполнение самостоятельных работ. |



|  |                                          |  |
|--|------------------------------------------|--|
|  | кающих из периодического закона и Перио- |  |
|--|------------------------------------------|--|

|  |                                        |  |
|--|----------------------------------------|--|
|  | дической системы химических элементов. |  |
|--|----------------------------------------|--|

Материалы для проведения текущего и промежуточного контроля знаний студентов представлены в разделе 4.3.2., главе УП.

**Критерии оценивания результатов обучения:**

1. Необходимо выполнить весь перечень самостоятельных работ (см. пункт 4.3.2.)  
Оценивается полнота и качество выполнения, оформление (максимум 60 баллов).

Для получения зачета по дисциплине необходимо выполнить самостоятельные работы, ответить на вопросы текущего контроля. Необходимо набрать минимум 50 баллов.

**Критерии оценивания ответов на зачёте:**

**Оценка «не зачтено»**

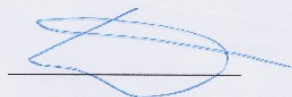
фрагментарное знание предмета, отсутствие умений и навыков применения методов и подходов изучаемой дисциплины при решении учебных задач (менее 50 баллов).

**Оценка «зачтено»**

в целом, сформированные, возможно, содержащие отдельные пробелы знания предмета, умение применять методы и подходы изучаемой дисциплины при решении учебных задач с минимальным количеством ошибок не принципиального характера, наличие навыков применения методов и подходов изучаемой дисциплины при решении учебных задач.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО по направлению подготовки 04.03.01 Химия.

**Разработчик:**



доцент Б.Н. Баженов

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО по направлению подготовки 04.03.01 Химия.

Программа рассмотрена на заседании кафедры общей и неорганической химии  
«10» июня 2019 г., протокол № 5.

Зав. кафедрой д.х.н., профессор



А.Ю.Сафронов

*Настоящая программа, не может быть воспроизведена ни в какой форме без предварительного письменного разрешения кафедры-разработчика программы.*

