



**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,



А.И. Вильмс
А.И. Вильмс
2021 г.

Рабочая программа дисциплины ФТД.04

Наименование дисциплины

ОСНОВЫ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ

Направление подготовки 04.03.01 – Химия

Направленность подготовки: Химия. Химия нефти и газа

Квалификация выпускника – бакалавр

Форма обучения *очная*

Согласовано с УМК химического факультета.

Протокол № 6 от «17» мая 2021 г.

Председатель *А.И. Вильмс*

Рекомендовано кафедрой общей и неорганической химии.

Протокол № 6 от «13» мая 2021 г.

Зав. кафедрой *А.Ю. Сафронов*

Иркутск 2021 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 _{опк-3.1} Предлагает интерпретацию результатов расчетно-теоретических работ с использованием теоретических основ традиционных и новых разделов химии	Знать: 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). Уметь: анализировать литературные и экспериментальные данные; применять основные законы химии при обсуждении полученных результатов. Владеть: навыками использования химического и физико-математического аппарата, необходимого для профессиональной деятельности; на-

		выками описания свойств веществ на основе закономерностей, вытекающих из периодического закона и Периодической системы химических элементов.
--	--	--

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

№ п/п	Раздел дисциплины/темы	Семестр	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу обучающихся и трудоемкость (в часах)				Самостоятельная работа	Формы текущего контроля успеваемости; Форма промежуточной аттестации <i>(по семестрам)</i>
			Контактная работа преподавателя с обучающимися			Консультации/ КСР		
			Лекции	Лабораторные занятия)				
				Всего часов	Из них практическая подготовка			
1.	Введение	2	2	Не предусмотрены		Не предусмотрены /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 2	Название раздела, темы	Самостоятельная работа обучающихся			Оценочное 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. Типы химических реакций	Подготовка отчета по ЛР, подготовка к устному опросу №2	Решение задач по теме. 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 (σ - и π -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 π -орбиталей в органических молекулах. π -приближение в теории МО. Делокализованные π -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 (ν) и кривизна потенциальной ямы («упругость» связи).

ЯМР (ядерного магнитного резонанса) — спектроскопия на ядрах ^{13}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 полумпирические модели при решении задач химической направленности	ИДК _{ОПК-3.1} 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 задачниках.

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>

<http://wasp.phys.msu.ru/forum/lofiversion/index.php?t51.html> <http://www.physic-s.ru/>

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 _{ОПК-3.1} Предлагает интерпретацию результатов расчетно-теоретических работ с использованием теоретических основ традиционных и новых разделов химии	Знать: 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). Уметь: анализировать литературные и экспериментальные данные; применять основные законы химии при обсуждении полученных результатов. Владеть: навыками использования химического и физико-математического аппарата, необходимого для профессиональной деятельности; навыками описания свойств веществ на основе закономерностей, выте-	См. вопросы для текущего контроля 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 УШ.

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»

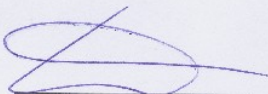
фрагментарное знание предмета, отсутствие умений и навыков применения методов и подходов изучаемой дисциплины при решении учебных задач (менее 50 баллов).

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
«13» мая 2021 г., протокол № 6.

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.