

АННОТАЦИЯ РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ ДИСЦИПЛИНЫ

Б1.В.ДВ.7.1 Реакционная способность химических соединений

по направлению подготовки: 18.03.01 «Химическая технология»

по профилю: «Химическая технология природных энергоносителей и углеродных материалов»

Квалификация выпускника: БАКАЛАВР

Выпускающая кафедра: ХТПНГ

Кафедра-разработчик рабочей программы: кафедра органической химии

1. Цели освоения дисциплины

Целями освоения дисциплины *реакционная способность химических соединений* являются

а) формирование знаний о

- взаимосвязи природы химической связи с электронным строением и реакционной способностью химических соединений;
- механизмах химических реакций;
- регио- и стереоселективности реакций органических соединений;

б) раскрытие сущности процессов, происходящих при химических превращениях органических веществ.

2. Содержание дисциплины «Реакционная способность химических соединений»

Химическая связь и электронное строение химических соединений.

Электронная теория химической связи. Остов атома и валентные электроны. Ионная и ковалентная связи. Донорно-акцепторные связи и пути их образования. Семиполярная связь. Электроотрицательность элементов и полярность гетероядерной связи. Одинарные связи и их фундаментальные характеристики: длина, энергия, степень ионности, полярность

Химическая реакция и реакционная способность

Химическая реакция как процесс разрыва и образования новых связей или процесс меж- или внутримолекулярного перераспределения связей. Классификация реакций по направлению: присоединение (A), замещение (S), элиминирование (E), изомеризация и перегруппировки, циклоприсоединение и электроциклические реакции. Классификация по типу разрыва химических связей: реакции с гомолитическим разрывом связи – свободнорадикальные, с гетеролитическим разрывом связи – ионные реакции. Цепные реакции. Нуклеофилы и электрофилы. Классификация их по природе атомов, проявляющих электронодонорные или электроноакцепторные свойства. Амбидентные нуклеофилы и электрофилы.

Термодинамика и кинетика химических реакций.

Изменение свободной энергии Гиббса и ее связь с энтальпией, энтропией и константой равновесия. Возможность и пределы протекания реакции.

Формальная кинетика. Понятие о скорости реакции. Закон скорости и порядок реакции. Кинетические уравнения необратимых реакций первого и второго порядка. Скорость определяющая (лимитирующая) стадия и молекулярность реакции. Моно- и бимолекулярные реакции.

Теоретические представления химической кинетики: теория активных соударений; уравнение Аррениуса; физический смысл предэкспоненциального множителя. Приближение активированного комплекса или переходного состояния. Поверхность потенциальной энергии, координата реакции. Энергетические диаграммы одно- и двухстадийных реакций. Энергия активации (E_a), энтальпия ($\Delta H^\ddagger$), энтропия ($\Delta S^\ddagger$), активации и их взаимосвязь. Переходное состояние, интермедиат. Основные типы интермедиатов (свободные радикалы, карбокатионы, карбоанионы, карбены), их строение, относительная устойчивость, направления стабилизации. Структура переходного состояния, сопоставление его структуры со структурами исходных и конечных веществ и интермедиатов. Постулат Хэммонда. Кинетический и термодинамический контроль реакции. Кинетический изотопный эффект.

Органические соединения как кислоты и основания. Сопряженные основания и связь их устойчивости с силой кислоты. Константы кислотности и pK_a для важнейших классов органических соединений. Жесткие и мягкие кислоты и основания. Принцип ЖМКО Пирсона.

Основы корреляционного анализа. Принцип линейности свободных энергий (ЛСЭ). Уравнение Гаммета – классический пример этого принципа. Реакционная серия с переменными заместителями. Константы заместителей (σ) и множественность их значений. Стерические константы заместителей (E_s). Реакционная константа (ρ) и ее связь с механизмом реакции. σ, ρ - анализ в химии.

Механизмы реакций.

Методы исследования механизмов реакций: установление природы и соотношения продуктов реакции, выделение и установление строения интермедиатов химическими и физическими методами, изотопная метка, изотопные эффекты, кинетические (закон скорости и молекулярность реакций) и стереохимические (образование стереоизомеров и их соотношение) методы.

Замещение галогена у насыщенного углеродного атома. Особенности замещения гидроксила. Механизм ионизации замещение (S_N1). Кинетика, несогласованность процесса, интермедиаты, возможность их изомеризации и образования нетривиальных продуктов. Энергетическая диаграмма замещения. Влияние отдельных факторов на реакционную способность субстрата: его строение, характер уходящей группы (нуклеофуга), сила и концентрация нуклеофильного агента, природа растворителя. Стереохимический признак S_N1 процесса. Механизм прямого замещения (S_N2). Кинетика, согласованность процесса, переходное состояние. Энергетическая диаграмма замещения. Влияние стерических эффектов групп, природы растворителя, концентрации нуклеофила. Стереохимический признак S_N2 процесса, тыльная атака и полное обращение конфигурации.

Реакционная способность. Два механизма замещения: элиминирование – присоединение и присоединение – элиминирование. Влияние заместителей на тип механизма. Интермедиаты-дегидроарены, σ -комплексы.

Реакции дегидрогалогенирования и дегидратации. $E1$ и $E2$ процессы. Основные их признаки и энергетические диаграммы. Изомеризация интермедиатов и образование нетривиальных продуктов. Изотопный эффект. Проблемы регио- и стереоселективности (анти-элиминирование).

Скорость определяющая стадия, электронные эффекты, ориентирующее влияние заместителей и проблемы региоселективности.

Содержание дисциплины «Реакционная способность химических соединений»

Электронная теория химической связи. Химическая реакция как процесс разрыва и образования новых связей или процесс меж- или внутримолекулярного перераспределения связей. Классификация реакций по направлению: присоединение (A),

замещение (S), элиминирование (E), изомеризация и перегруппировки, циклоприсоединение и электроциклические реакции.

Термодинамика химических реакций. Изменение свободной энергии Гиббса и ее связь с энтальпией, энтропией и константой равновесия. Возможность и пределы протекания реакции.

Формальная кинетика. Понятие о скорости реакции. Закон скорости и порядок реакции. Кинетические уравнения необратимых реакций первого и второго порядка.

Теория кислот и оснований Бренстеда и Льюиса. Органические соединения как кислоты и основания. Сопряженные основания и связь их устойчивости с силой кислоты. Константы кислотности и pK_a для важнейших классов органических соединений. Жесткие и мягкие кислоты и основания. Принцип ЖМКО Пирсона.

Гетерогенный катализ. Высокая экономичность, обусловленная легкостью отделения целевого продукта от катализатора и простотой регенерации катализатора. Межфазный катализ. Катализ комплексами переходных металлов.

Определение понятия «механизм реакции». Методы исследования механизмов реакций. Нуклеофильное замещение у насыщенного атома углерода. Нуклеофильное замещение в ароматическом ядре. Элиминирование. Нуклеофильное присоединение по карбонильной группе альдегидов и кетонов. Электрофильное замещение в ароматическом ядре. Механизмы радикальных реакций.

В результате освоения дисциплины обучающийся должен:

- 1) Знать:
 - а) понятия химическая связь, электронная структура, тип реакции (электрофильный, нуклеофильный, радикальный, присоединения, замещения, элиминирования), механизм реакции;
 - б) типы химических связей и современные методы их описания;
 - в) электронную структуру химических соединений и ее взаимосвязь с реакционной способностью, механизмами основных типов реакций;
- 2) Уметь:
 - а) ориентироваться в системе знаний о химической связи, об электронном строении веществ;
 - б) прогнозировать реакционную способность веществ;
 - в) разбираться в механизмах главных типов реакций;
- 3) Владеть:
 - а) экспериментальными методами изучения реакционной способности органических соединений;

Зав.кафедрой ХТПНГ



Н.Ю. Башкирцева