

Министерство образования и науки Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Казанский национальный исследовательский технологический
университет»
(ФГБОУ ВО «КНИТУ»)

УТВЕРЖДАЮ
Проректор по УР
Бурмистров А.В.

(подпись)
« 17 » 10 2017 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА
по дисциплине: Б1.В.ДВ.7.1 «Реакционная способность химических соединений»

Направление: 18.03.01 «Химическая технология».

Профиль: Технология и переработка полимеров.

Квалификация: бакалавр.

Программа подготовки: академический бакалавриат.

Форма обучения: очная.

Институт, факультет: Институт полимеров, факультет технологии и переработки каучуков и эластомеров.

Кафедра-разработчик рабочей программы: Кафедра технологии синтетического каучука.

3 Курс, 5 семестр.

	Часы	Зачетные единицы
Лекции	18	0.50
Практические занятия	-	-
Семинарские занятия	-	-
Лабораторные занятия	36	1.00
Самостоятельная работа	54	1.50
Форма аттестации	зачет	
Всего	108	3

Казань, 2017 г.

Рабочая программа составлена с учетом требований Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования № 1005 от 11 августа 2016 года по направлению 18.03.01 «Химическая технология» по программе подготовки «Технология и переработка полимеров», на основании учебного плана набора обучающихся в 2014, 2015, 2016, 2017 г.г. Примерной программы по дисциплине нет.

Разработчик программы,
профессор

Самуилов

Самуилов Я.Д.

Рабочая программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры ТСК протокол от 12 октября 2017 г. № 7.

И.о. зав. кафедрой

Зенитова

Зенитова Л.А..

УТВЕРЖДЕНО

Протокол заседания методической комиссии ФТПКЭ
От 16 октября 2017 г. № 2.

Председатель комиссии,
профессор

Ярошевская

Ярошевская Х.М.

Начальник УМЦ

Китаева

Китаева Л.А.

1. Цели освоения дисциплины

Целями освоения дисциплины Б1.В.ДВ.7.1 «Реакционная способность химических соединений» являются:

- а) формирование у студентов целостной картины влияния различных электронных и стерических факторов на реакционную способность химических веществ в различных превращениях (ионных, ион-радикальных, радикальных, молекулярных реакциях);
- б) обучения способам управления активности химических соединений за счет целенаправленного управления структурными эффектами, природой растворителя, использования явления катализа;
- в) целенаправленное использование полученных знаний в разработке технологий промышленного органического синтеза, нефтехимии, синтетических каучуков, переработки полимерных материалов.

2. Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы

Дисциплина «Реакционная способность химических соединений» относится к дисциплине по выбору части ОП и формирует у бакалавров по направлению подготовки 18.03.01 «Химическая технология» по профилю «Технология и переработка полимеров» набор знаний, умений, навыков и компетенций.

Для успешного освоения дисциплины «Реакционная способность химических соединений» бакалавр по направлению подготовки 18.03.01 «Химическая технология» должен освоить материал предшествующих дисциплин:

- а) Б1.Б.10 Общая и неорганическая химия;
- б) Б2.Б5. Органическая химия;
- в) Б.1.Б.12. Физическая химия;
- г) Б.1.Б.6. Математика.

Дисциплина «Реакционная способность химических соединений» является предшествующей и необходима для успешного усвоения последующих дисциплин:

- а) Б.1.Б.19. Общая химическая технология;
- б) Б.1.Б.21. Моделирование химико-технологических процессов;
- в) Б.1.ОД.14. Переработка полимеров;
- г) Б.1.В. ДВ.9.1. Технология производства синтетического каучука;
- д) Б.1.В.ДВ. 10. Промышленная органическая химия.

Знания, полученные при изучении дисциплины «Реакционная способность химических соединений» могут быть использованы при прохождении учебной, научной, производственной практик, и выполнении выпускной квалификационной работы. Они могут быть использованы в производственно-технологической и экспериментально-исследовательской деятельности по направлению подготовки 18.03.01 «Химическая технология» по профилю подготовки «Технология и переработка полимеров»

3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины:

ОПК-3: готовность использовать знания о строении вещества, природе химической связи в различных классах химических соединений для понимания свойств материалов и механизма химических процессов, протекающих в окружающем мире;

ПК-16: способность планировать и проводить физические и химические эксперименты, проводить обработку их результатов и оценивать погрешности, выдвигать гипотезы и устанавливать границы их применения, применять методы математического анализа и моделирования, теоретического и экспериментального исследования

В результате освоения дисциплины обучающийся должен:

1) Знать:

- а) теоретические представления, описывающие переход системы реагентов в продукты реакций в ходе химических реакций;
- б) количественные параметры, характеризующие реакционную способность соединений в химических реакциях;
- в) методы описания механизмов химических реакций;
- г) представления о кулоновских взаимодействиях и их влиянии на реакционную способность, количественное описание этих взаимодействий;
- д) принципы влияния орбитальных донорно-акцепторных межмолекулярных взаимодействий на реакционную способность, влияние структурных факторов на энергетические орбитальные характеристики органических соединений;
- е) причины влияния среды на скорости химических реакций, методы описания этого влияния.

2) Уметь:

- а) Находить оптимальные пути осуществления химических процессов;
- б) Понимать сущность технологических решений при реализации той или иной схемы превращения.
- в) Целенаправленно изменять структуру химических соединений для достижения оптимальной активности химических соединений;
- г) Подбирать растворители для достижения заданной реакционной способности.

3) Владеть:

- а) Принципами управления реакционной способностью в различных химических превращениях;
- б) Методами изменения структуры химических соединений для целенаправленного изменения их активности;
- в) Методами изменения реакционной способности за счет изменения свойств среды.

4. Структура и содержание дисциплины «Реакционная способность химических соединений»

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетных единиц, 108 часов.

№ п /п	Раздел дисциплин ы	Семестр	Виды учебной работы (в часах)				Оценочные средства для проведения промежуточной аттестации по разделам
			Лекции	Практические занятия	Лаборат орные работы	CPC	
1	Тема 1. Введение в дисциплину. Количествен	5	4	-	12	10	Тесты, коллоквиум, реферат.

	ные критерии реакционной способности							
2	Тема 2. Электростатические взаимодействия в переходном состоянии	5	4	-	6	10	<i>Тесты, коллоквиум, реферат.</i>	
3	Тема 3. Орбитальные донорно-акцепторные межмолекулярные взаимодействия	5	4	-	6	10	<i>Тесты, коллоквиум, реферат.</i>	
4	Тема 4. Разрушение системы старых связей в переходном состоянии как фактор, определяющий реакционную способность.	5	4	-	6	10	<i>Тесты, коллоквиум, реферат.</i>	
5	Тема 5. Роль среды в элементарном акте химической реакции.	5	2	-	6	14	<i>Тесты, коллоквиум, реферат.</i>	
			18	-	36	54		
<i>Форма аттестации - зачет</i>								

5. Содержание лекционных занятий по темам с указанием формируемых компетенций

№ п/п	Раздел дисциплины	Часы	Тема лекционного занятия	Краткое содержание	Формируемые компетенции
1	Тема 1. Введение в дисциплину.	4	Введение в дисциплину.	Понятие о реакционной способности. Кинетические	ОПК-3, ПК-16.

	Количественные критерии реакционной способности		Количественные критерии реакционной способности	кривые. Скорости химических реакций. Кинетические уравнения. Константы скорости химических реакций. Частные и общие порядки реакций. Дифференциальные и интегральные методы определения порядков реакций. Температурная зависимость констант скоростей химических реакций. Уравнение Аррениуса. Энергия активации. Физический смысл предэкспоненциального множителя в рамках теории двойных столкновений. Недостатки теории двойных столкновений. Теория активированного комплекса. Энталпии и энтропии активации. Тип химических превращений и энтропии активации. Понятие о механизме химических реакций. Простые и сложные реакции. Лимитирующая стадия сложного процесса. Молекулярность реакции. Электронные процессы в переходном состоянии.	
2	Тема 2. Электростатические взаимодействия в переходном состоянии.	4	Электростатические взаимодействия в переходном состоянии.	Кулоновские взаимодействия между реакционными центрами как фактор, определяющий реакционную способность. Распределение электронной плотности в молекулах. Концепция электроотрицательности. Влияние заместителей на величины зарядов на реакционных центрах. Механизмы передачи эффектов заместителей на реакционный центр. Химические реакции как взаимодействие электрофильных и нуклеофильных центров молекул. Количественная характеристика эффектов заместителей: индукционные константы заместителей, константы Гамметта. Уравнение Гамметта. Реакционная константа и механизм превращений.	ОПК-3, ПК-16.
3	Тема 3. Орбитальные донорно-акцепторные	4	Орбитальные донорно-акцепторные	Недостаточность подхода к интерпретации реакционной способности с	ОПК-3, ПК-16.

	акцепторные межмолекулярные взаимодействия		межмолекулярные взаимодействия	позиций зарядовых взаимодействий. Образование новых химических связей как результат орбитальных донорно-акцепторных взаимодействий. Качественная характеристика орбитальных взаимодействий. Метод энергий стабилизации. Приближение граничных орбиталей. Потенциалы ионизации и средство к электрону молекул. Экспериментальные методы определения этих характеристик. Влияние структурных факторов на орбитальные энергетические свойства органических молекул. Характер взаимодействия граничных орбиталей в нуклеофильных, электрофильных и радикальных реакциях. Взаимодействие граничных орбиталей в реакциях 2+2- и 2+4-циклоприсоединении. Согласованные и несогласованные процессы.	
4	Тема 4. Разрушение системы старых связей в переходном состоянии как фактор, определяющий реакционную способность.	4	Разрушение системы старых связей в переходном состоянии как фактор, определяющий реакционную способность.	Подход к интерпретации реакционной способности с позиций энергий локализации. Энергии катионной и анионной, радикальной локализации. Энергии орто- и пара-локализации. Энергии локализации и тепловой эффект элементарной стадии химической реакции. Влияние эффектов локализации на положение переходного состояния на координате реакции. Постулат Хэммонда. Расширенное толкование постулата Хэммонда.	ОПК-3, ПК-16.
5	Тема 5. Роль среды в элементарном акте химической реакции.	2	Роль среды в элементарном акте химической реакции	Качественные отличия в протекании химических реакций в газовой и жидкой фазах. Сольватация реагентов и переходного состояния. Диффузионные явления, клеточный эффект. Электростатические представления в описании влияния растворителей на скорость реакций. Реакции между ионами, диполями. Диэлектрическая проницаемость	ОПК-3, ПК-16.

				растворителей. Изменение свойств реагентов под влиянием среды. Эмпирические шкалы растворителей. Ионизирующая сила растворителей, шкалы растворителей Димрота и Косовера. Донорные и акцепторные числа растворителей.	
--	--	--	--	---	--

6. Содержание практических занятий

Практические занятия учебным планом не предусмотрены.

7. Содержание лабораторных занятий

Цель проведения лабораторных занятий – освоение лекционного материала, касающегося проблем реакционной способности химических соединений, а также выработка студентами определенных умений, связанных с интерпретацией полученных результатов в ходе выполнения лабораторных работ, и навыков, связанных с владением методик получения углеводородов и определения их физических свойств. Перед каждой лабораторной работой с бакалаврами проводится коллоквиум, в ходе которого дополнительно ведется их тестирование.

Лабораторные работы проводятся в учебной лаборатории кафедры технологии синтетического каучука без использования специального оборудования.

№ п/п	Раздел дисциплины	Часы	Наименование лабораторной работы	Формируемые компетенции
1	Тема 1. Введение в дисциплину. Количественные критерии реакционной способности	12	1. Правила работы в лаборатории органического практикума. 2. Определение порядков химических реакций интегральным методом.	ОПК-3, ПК-16.
2	Тема 2. Электростатические взаимодействия в переходном состоянии.	6	3. Электростатические взаимодействия в реакциях нуклеофильного замещения у насыщенного атома углерода. Синтез бромистого этила.	ОПК-3, ПК-16.
3	Тема 3. Орбитальные донорно-акцепторные межмолекулярные взаимодействия.	6	4. Орбитальные донорно-акцепторные межмолекулярные взаимодействия в реакциях электрофильного замещения в ароматических соединениях. Получение нитробензола.	ОПК-3, ПК-16.
4	Тема 4. Разрушение системы старых связей в переходном состоянии как фактор, определяющий реакционную	6	5. Энергии разрушения систем старых связей как фактор определяющий реакционную способность. Сравнительная реакционная способность бензола, нафталина и	ОПК-3, ПК-16.

	способность.		антрацена в реакциях бромирования.	
5.	Тема 5. Роль среды в элементарном акте химической реакции.	6	6. Роль полярных свойств среды на протекание ионных реакций. Зависимость скоростей бромирования стирола от диэлектрической проницаемости растворителя.	ОПК-3, ПК-16.

8. Самостоятельная работа бакалавра

№ п/п	Темы, выносимые на самостоятельную работу	Часы	Форма СРС	Формируемые компетенции
1	Количественные критерии реакционной способности	10	Подготовка к лекциям, коллоквиумам и лабораторным занятиям. Написание реферата. Подготовка к выполнению тестов.	ОПК-3, ПК-16.
2	Электростатические взаимодействия в переходном состоянии.	10		ОПК-3, ПК-16.
3	Орбитальные донорно-акцепторные межмолекулярные взаимодействия	10		ОПК-3, ПК-16.
4	Разрушение системы старых связей в переходном состоянии как фактор, определяющий реакционную способность.	10		ОПК-3, ПК-16.
5	Роль среды в элементарном акте химической реакции.	14		ОПК-3, ПК-16.

9. Использование рейтинговой системы оценки знаний.

При оценке результатов деятельности, обучающихся в рамках дисциплины «Реакционная способность химических соединений» используется рейтинговая система. Максимальное и минимальное количество баллов по различным видам учебной работы описано в положении о рейтинговой системе «Положение о балльно-рейтинговой системе оценки знаний.

Оценочные средства	Кол-во	Min, баллов	Max, баллов
Ответы на вопросы на коллоквиуме	10	20	40
Тесты	10	10	20
Реферат	1	30	40
Итого:		60	100

10. Информационно-методическое обеспечение дисциплины

10.1. Основная литература

При изучении дисциплины «Реакционная способность химических соединений» в качестве основных источников информации рекомендуется использовать следующую литературу.

Основные источники информации	Количество экземпляров
Илиел Э. Основы органической стереохимии [Электронный ресурс] / Э. Илиел, С. Вайлен, М. Дойл ; пер. с англ. — 2-е изд. (эл.). — Электрон. текстовые данные— М. : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2014. — 706 с. ISBN 978-5-9963-2308-1.	ЭБС «Znanium. Com» https://http://znanium.com/bookread2.php?book=545351 доступ из любой точки интернета после регистрации с IP-адресов КНИТУ
Булидорова, Г.В. Формальная кинетика [Учебники] : учеб. пособие / Г.В. Булидорова, Ю.Г. Гаяметдинов, Х.М. Ярошевская ; Казан. нац. исслед. технол. ун-т .— Казань, 2014 .— 112 с. ISBN 978-5-7882-1699-7.	70 экз. В УНИЦ
Буданов, В.В. Химическая кинетика [Электронный ресурс] : учеб. пособие / В.В. Буданов, Т.Н. Ломова, В.В. Рыбкин. — Электрон. дан. — Санкт-Петербург : Лань, 2014. — 288 с. ISBN: 978-5-8114-1542-7.	ЭБС «Лань» https://e.lanbook.com/book/42196 доступ из любой точки интернета после регистрации с IP-адресов КНИТУ Лань»
Булидорова Г.В. Определение порядка, константы скорости и энергии активации элементарных реакций [Учебники] : учеб. пособие / Г.В. Булидорова [и др.] ; Казан. нац. исслед. технол. ун-т .— Казань : Изд-во КНИТУ, 2015 .— 83 с. ISBN 978-5-7882-1681-2.	70 экз. В УНИЦ

10.2 Дополнительная литература

Дополнительные источники информации	Количество экземпляров

Булидорова, Г.В. Основы химической термодинамики (к курсу физической химии [Учебники] : учеб. пособие / Г.В. Булидорова [и др.] ; Казан. нац. исслед. ун-т .— Казань, 2011 .— 220 с. ISBN 978-5-7882-1151-0.	160 экз. в УНИЦ
Гринвуд, Н. Химия элементов: в 2 т. (комплект) [Электронный ресурс] : справ. / Н. Гринвуд, Эрншо А.. — Электрон. дан. — Москва : Издательство "Лаборатория знаний", 2017. — 1348 с.	ЭБС «Лань» https://e.lanbook.com/book/94157 доступ из любой точки интернета после регистрации с IP-адресов КНИТУ
Самуилов Я.Д. Реакционная способность органических соединений [Учебники] : учеб. пособие / Я.Д. Самуилов, Е.Н. Черезова ; Казан. гос. технол. ун-т .— Казань, 2010 .— 418 с. ISBN 978-5-7882-0941-8.	69 экз. в УНИЦ

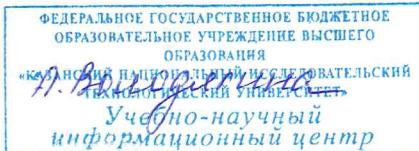
10.3 Электронные источники информации

При изучении дисциплины «Реакционная способность химических соединений» рекомендуется использование электронных источников информации:

1. Электронный каталог УНИЦ КНИТУ – режим доступа <http://ruslan.kstu.ru/>
2. Научная электронная библиотека (НЭБ) – режим доступа <http://elibrary.ru/>
3. ЭБС «Лань» – режим доступа <http://e.lanbook.com/>
4. ЭБС «КнигаФонд» – режим доступа <http://www.knigafund.ru/>
5. ЭБС «Библиотех» – режим доступа <https://knitu.bibliotech.ru/>
6. ЭБС «IPRbook» – режим доступа <http://www.iprbookshop.ru/>
7. ЭБС «Znanium.com» – режим доступа <http://znanium.com/>

Согласовано:

Зав.сектором ОКУФ



Володягина А.А.

11. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины

Оценочные средства для проведения текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации бакалавров и итоговой аттестации разработаны согласно «Положению о фондах оценочных средств», и оформлены отдельным документом.

12. Материально-техническое обеспечение дисциплины «Реакционная способность химических соединений»:

1. Лекционные занятия:

- а) комплект электронных презентаций/слайдов,
- б) аудитория, оснащенная презентационной техникой (проектор, экран, компьютер/ноутбук, и т.д.),
- в) раздаточные и демонстрационные материалы.

2. Лабораторные занятия:

Лабораторные занятия проводятся в учебной лаборатории Б-213 кафедры ТСК, площадью 140 м² и имеющая 40 посадочных мест. Лаборатория оснащена приборами, используемыми в ходе выполнения лабораторных работ:

Муфельная печь;

Весы электронные CAS CUX420H);

Весы аналитические HTR-120CE Shinko Oenshi;

Весы ВСП-0,5/0,1-1 2 шт;

Цифровая магнитная мешалка с подогревом MSH-1LT;

Низкотемпературная лабораторная электропечь сопротивления SNOL20/300;

Микроскоп Альтами БИО 8;

Перемешивающие устройства:

Meidollph RZR 202 2 шт., LS-110(Loip), ES-8300 5 шт., Wisd HS-120A;

Рефрактометр ИРФ-454Б2М -2шт;

pH-метр 150МИ 2 шт;

Колбообогреватели ЛТ-25- 8 шт.;

Электроплитки 6 шт;

Микроволновая печь, модернизированная С.Т.Р. V1716NR;

Универсальный лабораторный регулятор температуры УРТА 2 шт.;

Термошкаф вакуумный;

Столик подъемный ЛТ-150 5 шт.

Доска аудиторная.

Лаборатория оснащена стеклянной посудой и реактивами для проведения лабораторных работ.

13. Образовательные технологии

В процессе преподавания дисциплины «Реакционная способность химических соединений» используются следующие образовательные технологии:

- традиционные образовательные технологии;
- методы проблемного обучения;
- анализ конкретных ситуаций;
- интерактивные технологии.

В ходе использования метода проблемного обучения на примере какого-либо конкретного производства анализируется проблемная ситуация. Затем коллективно выясняются:

- причины возникновения проблемной ситуации;

- пути решения проблемной ситуации;
- аргументация верности решения проблемы;
- проверка верности принятия решения.

Интерактивные технологии возможно использовать на лекционных и лабораторных занятиях, когда студенты могут с ходе обсуждения анализируют причины наблюдаемых тех или иных явлений. Для подготовки к занятиям и написания реферата можно использовать ресурсы сети Интернет. Объем времени интерактивного обучения – 36 часов.

Лист переутверждения рабочей программы

Рабочая программа по дисциплине «Реакционная способность химических соединений» пересмотрена на заседании кафедры технологии синтетического каучука

п/п	Дата переутверждения РП (протокол заседания кафедры №____ от _____. _____. 20____)	Наличие изменений	Наличие изменений в списке литературы	Подпись разработчика РП	Подпись заведующего кафедрой	Подпись начальника УМЦ/ОМГ/ ОАиД
	Протокол заседания кафедры ТСК №1 от 03.09.2018 г.	Нет	Нет	<i>С.А.Соев</i>	<i>З.М.</i>	<i>И.И.Шевцов</i>