

Міністерство освіти і науки України
Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна
Кафедра прикладної хімії

“ЗАТВЕРДЖУЮ”

Перший проректор

“ _____ ” _____ 20__ р.

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Механізми реакцій

За напрямом підготовки 040101 "хімія"
для спеціальностей 7. 04010101 "хімія" та 8. 04010101 "хімія"

Хімічного факультету

Кредитно-модульна система
організації навчального процесу

Робоча програма навчальної дисципліни «Механізми реакцій» для студентів заочного відділення за напрямом підготовки 040101 "хімія" для спеціальностей 7. 04010101 "хімія" та 8. 04010101 "хімія".

Розробники: кандидат хімічних наук, доцент кафедри прикладної хімії Комихов Сергій Олександрович.

Робоча програма затверджена на засіданні кафедри прикладної хімії

Протокол № 8 від “ 24 ” 04 _____ 2014 р.

Завідувач кафедри _____ В.А. Чебанов

“ 24 ” 04 _____ 2014 р

Схвалено методичною комісією хімічного факультету

Протокол № 10 від “ 14 ” 05 _____ 2014 р.

“ 14 ” _____ 05 _____ 2014 р.

Голова _____

Юрченко О.І.

Опис навчальної дисципліни

Найменування показників	Галузь знань, напрям підготовки, освітньо-кваліфікаційний рівень	Характеристика навчальної дисципліни
Кількість кредитів – 3	Галузь знань 0401 «Природничі науки»	Заочна форма навчання дисципліна вільного вибору студента
Модулів – 3	Напрямок підготовки 040101 "хімія" Спеціальність 7. 04010101 "хімія" та 8. 04010101 "хімія"	Рік підготовки: V -й
Загальна кількість годин – 107		Семестр 9 -й
		Лекції 10 год.
		Лабораторні 10 год.
		Самостійна робота 87 год.
	Освітньо-кваліфікаційний рівень: магістр, спеціаліст	Вид контролю: залік

1. Мета та завдання навчальної дисципліни

Мета: навчити студента пропонувати механізм реакцій, спираючись на загальнотеоретичні уяви та дані експерименту.

У результаті вивчення даного курсу студент повинен:

знати: закономірності електронного впливу у молекулах, класифікацію реакцій за характером розриву та утворення зв'язків, основні типи реагуючих частинок та шляхи їх перетворень, мати уявлення про основні механізми реакцій.

вміти: використовувати метод резонанса та теорію електронних ефектів для характеристики електронної будови сполук та інтермедіатів, обґрунтовано пропонувати механізм хімічного перетворення.

3. Програма навчальної дисципліни

Модуль 1. Електронна будова органічних сполук.

Тема 1. Октетна теорія Льюїса, типи зв'язків: іонний, ковалентний, координаційний, дативний. Двох-, трьох- та багатоцентрові зв'язки. σ -Комплекси. Комплекси з переносом заряду. Гідрогенний зв'язок. Залежність властивостей органічних сполук від характеру зв'язку.

Тема 2. Поняття про електронегативність. Теорія електронних зміщень та ефектів: індуктивний та резонансний, статичний і динамічний. Ефект поля. Розкладання сумарних властивостей на властивості окремих зв'язків по адитивним схемам: енергії зв'язків,

полярність зв'язків та груп. Експериментальні характеристики зв'язків. Енергія дисоціації, валентні кути, довжини, полярність, поляризованість, дипольні моменти.

Тема 3. Фізична природа хімічних зв'язків. Квантовомеханічні уявлення про хімічний зв'язок. Поняття про атомні та молекулярні орбіталі, σ, π -наближення, квантовохімічні методи розрахунків. Правила взаємодії орбіталей (відповідність симетрії, інтеграл перекривання, розщеплення рівнів). Співвідношення класичної і квантової теорій. Ароматичність та антиароматичність.

Тема 4. Кислотно-основні властивості органічних сполук. визначання кислот і основ по Бренстеду та Льюїсу. Кислотно-основна рівновага. Рівняння Бренстеда. Загальний і специфічний кислотний та основний каталіз. Принцип ЖМКО та приклади його використання. Таутомерні протонні перетворення. Кето-енольна таутомерія та її механізм. Вплив структурних факторів на стан таутомерної рівноваги.

Модуль 2. Основні типи проміжних частинок.

Тема 5. Основні типи проміжних частинок. Гетеролітична дисоціація зв'язків. Карбокатиони та карбаніони, їх стабільність та фактори, що її визначають (просторові та електронні ефекти, ефект середовища). Будова. Основні методи генерації. Хімічні перетворення карбокатионів та карбаніонів.

Тема 6. Гомолітична дисоціація. Вільні радикали, причини їх утворення та стійкості. Електронна будова. Методи визначення стабільності вільних радикалів. Ароматичні та аліфатичні вільні радикали. Методи їх отримання, хімічні властивості. Бірадикали, карбени, арини. Іон-радикали.

Модуль 3. Механізми реакцій органічних сполук.

Тема 7. Загальні принципи реакційної здатності. Класифікація реакцій: за типом розриву зв'язків, за характером перетворень, за типом реагуючої частинки. Принцип структурної відповідності інтермедіату (постулат Хемонда). Теорія перехідного стану. Гіперповерхня енергії. Координата реакції та зміни енергії вздовж неї. Вільна енергія активації, ентальпія та ентропія реакції.

Тема 8. Емпіричний підхід до оцінки реакційної здатності. Кореляційні рівняння, принцип лінійності вільних енергій. Рівняння Гаммета і Тафта.

Тема 9. Реакції заміщення. Нуклеофільне заміщення у насиченого атома Карбону. Стереохімія заміщення. Електрофільне заміщення у насиченого атома Карбону.

Тема 10. Реакції приєднання та елімінування. Направленість реакцій приєднання, їх стереохімія. Правило Марковникова та перекисний ефект. Механізми реакцій елімінування та їх стереохімія. Реакції перегрупувань.

4. Структура навчальної дисципліни

Модулі і теми	Кількість годин					
	Денна форма					
	Усього	у тому числі				
л		п	лаб	інд	ср	
1	2	3	4	5	6	7
Модуль 1						
Тема 1	11	1		1		9
Тема 2	11	1		1		9
Тема 3	10	1		1		8
Тема 4	11	1		1		9
Разом за модулем 1	43	4		4		35

Модуль 2						
Тема 5	11	1		1		9
Тема 6	11	1		1		9
Разом за модулем 2	22	2		2		18
Модуль 3						
Тема 7	11	1		1		9
Тема 8	10	1		1		8
Тема 9	11	1		1		9
Тема 10	10	1		1		8
Разом за модулем 1	42	4		4		34
Усього годин	107	10		10		87

5. Теми лабораторних занять

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
Тема 1	Октетна теорія Льюїса, типи зв'язків	1
Тема 2	Теорія електронних зміщень та ефектів	1
Тема 3	Фізична природа хімічних зв'язків	1
Тема 4	Кислотно-основні властивості органічних сполук	1
Тема 5	Карбокатиони та карбаніони	1
Тема 6	Вільні радикали	1
Тема 7	Загальні принципи реакційної здатності	1
Тема 8	Емпіричний підхід до оцінки реакційної здатності	1
Тема 9	Реакції заміщення	1
Тема 10	Реакції приєднання та елімінування	1
Разом		10

6. Самостійна робота

Назва теми	Кількість Годин
	Ср
Тема 1. Октетна теорія Льюїса, типи зв'язків: іонний, ковалентний, координаційний, дативний. Двох-, трьох- та багатоцентрові зв'язки. σ -Комплекси. Комплекси з переносом заряду. Гідрогенний зв'язок. Залежність властивостей органічних сполук від характеру зв'язку.	9
Тема 2. Поняття про електронегативність. Теорія електронних зміщень та ефектів: індуктивний та резонансний, статичний і динамічний. Ефект поля. Розкладання сумарних властивостей на властивості окремих зв'язків по адитивним схемам: енергії зв'язків, полярність зв'язків та груп. Експериментальні характеристики зв'язків. Енергія дисоціації, валентні кути, довжини, полярність, поляризованість, дипольні моменти.	9

Тема 3. Фізична природа хімічних зв'язків. Квантовомеханічні уявлення про хімічний зв'язок. Поняття про атомні та молекулярні орбіталі, σ , π -наближення, квантовохімічні методи розрахунків. Правила взаємодії орбіталей (відповідність симетрії, інтеграл перекривання, розщеплення рівнів). Співвідношення класичної і квантової теорій. Ароматичність та антиароматичність.	8
Тема 4. Кисотно-основні властивості органічних сполук. визначання кислот і основ по Бренстеду та Льюїсу. Кисотно-основна рівновага. Рівняння Бренстеда. Загальний і специфічний кислотний та основний каталіз. Принцип ЖМКО та приклади його використання. Таутомерні протонні перетворення. Кето-енольна таутомерія та її механізм. Вплив структурних факторів на стан таутомерної рівноваги. Таутомерія нітрогеновмісних органічних сполук.	9
Тема 5. Основні типи проміжних частинок. Гетеролітична дисоціація зв'язків. Карбокатиони та карбаніони, їх стабільність та фактори, що її визначають (просторові та електронні ефекти, ефект середовища). Будова. Основні методи генерації. Хімічні перетворення карбокатионів та карбаніонів.	9
Тема 6. Гомолітична дисоціація. Вільні радикали, причини їх утворення та стійкості. Електронна будова. Методи визначення стабільності вільних радикалів. Ароматичні та аліфатичні вільні радикали. Методи їх отримання, хімічні властивості. Бірадикали, карбени, арини. Іон-радикали.	9
Тема 7. Загальні принципи реакційної здатності. Класифікація реакцій: за типом розриву зв'язків, за характером перетворень, за типом реагуючої частинки. Принцип структурної відповідності інтермедіату (постулат Хемонда). Теорія перехідного стану. Гіперповерхня енергії. Координата реакції та зміни енергії вздовж неї. Вільна енергія активації, ентальпія та ентропія реакції.	9
Тема 8. Емпіричний підхід до оцінки реакційної здатності. Кореляційні рівняння, принцип лінійності вільних енергій. Рівняння Гаммета і Тафта.	8
Тема 9. Реакції заміщення. Нуклеофільне заміщення у насиченого атома Карбону. Стереохімія заміщення. Електрофільне заміщення у насиченого атома Карбону.	9
Тема 10. Реакції приєднання та елімінування. Направленість реакцій приєднання, їх стереохімія. Правило Марковникова та перекисний ефект. Механізми реакцій елімінування та їх стереохімія. Реакції перегрупувань.	8
Разом	87

7. Методи навчання

Лекції, виконання лабораторних робіт, самостійна робота.

8. Методи контролю

Захист лабораторних робіт, залік.

9. Розподіл балів, які отримують студенти

Поточне тестування та самостійна робота	Підсумковий	Сум
---	-------------	-----

			семестровий контроль (залік)	а
Модуль 1	Модуль 2	Модуль 2	55	100
T1-4	T5-6	T7-11		
15	15	15		
Разом 45				

1. Студент допускається до підсумкового семестрового контролю (іспиту) за умови виконання та оформлення усіх лабораторних робіт і наявності загального рейтингу не менше 40 балів.
2. Екзамен вважається зданим, якщо рейтинг за екзамен не менше, ніж 20 балів.
3. За пропуск однієї лекції без поважної причини студент втрачає 2 бали від загального рейтингу за семестр.
4. Несвоєчасне виконання або оформлення лабораторних робіт оцінюється лише в 75% від набраної рейтингової оцінки. Термін подання оформлених лабораторних робіт визначається викладачем, який веде практичні заняття.

Шкала оцінювання

Сума балів за всі види навчальної діяльності протягом семестру	Оцінка ECTS	Оцінка за національною шкалою
90 – 100	A	відмінно
80-89	B	добре
70-79	C	
60-69	D	задовільно
50-59	E	
1-49	FX	незадовільно

10. Методичне забезпечення

1. Робоча програма навчальної дисципліни.
2. Навчальні посібники, монографії, наукові статті.
3. Описи лабораторних робіт.

11. Рекомендована література

1. Марч Дж. Органическая химия / Пер. с англ. под ред. И. П. Белецкой. – М.: Химия. – 1987. –т. 1-4.
2. Кери Ф., Сандберг Р. Углубленный курс органической химии / Пер. с англ. под ред. В. Б. Потапова. –М.: Химия. -1981. –т. 1, 2.
3. Днепровский А. С., Темникова Т. И. Теоретические основы органической химии. Л.: Химия, 1979. -520с.
4. M. V. Smith. March's Advanced Organic Chemistry: Reactions, Mechanisms, and Structure, 7th Edition. Wiley, 2013. -2080 p.
5. Carey F. A., Sundberg R. J. Advanced Organic Chemistry. Part A: Structure and Mechanisms. 5th ed. Springer, 2007. -1199 p.