

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Пекаревский Борис Владимирович
Должность: Проректор по учебной и методической работе
Дата подписания: 10.11.2023 17:44:10
Уникальный программный ключ:
3b89716a1076b80b2c167df0f27c09d01782ba84



МИНОБРНАУКИ РОССИИ
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Санкт-Петербургский государственный технологический институт
(технический университет)»

УТВЕРЖДАЮ
Проректор по учебной и
методической работе

_____ Б.В.Пекаревский
« 28 » июня 2021 г.

**Рабочая программа дисциплины
КОЛИЧЕСТВЕННАЯ ТЕОРИЯ РЕАКЦИЙ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ
АЗОТА**

Направление подготовки

18.05.01– Химическая технология энергонасыщенных материалов и изделий

Направленность программы специалитета

№1 Химическая технология органических соединений азота

Квалификация

Инженер

Форма обучения

Очная

Факультет **инженерно-технологический**

Кафедра **химии и технологии органических соединений азота**

Санкт-Петербург

2021

ЛИСТ СОГЛАСОВАНИЯ

Должность разработчика	Подпись	Учёное звание, Фамилия, инициалы
Старший преподаватель		Павлюкова Ю.Н.

Рабочая программа дисциплины «Количественная теория реакций органических соединений азота» обсуждена на заседании кафедры химии и технологии органических соединений азота

протокол от «31» мая 2021 №3

Заведующий кафедрой

А.А.Кирюшкин

Одобрено учебно-методической комиссией инженерно-технологического факультета
протокол от «24 » июня 2021 № 9

Председатель

А.П. Сула

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель направления подготовки «химическая технология энергонасыщенных материалов и изделий»		Т.В. Украинцева
Директор библиотеки		Т.Н. Старостенко
Начальник методического отдела учебно- методического управления		Т.И. Богданова
Начальник УМУ		С.Н. Денисенко

СОДЕРЖАНИЕ

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы	4
2. Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы.....	5
3. Объем дисциплины	5
4. Содержание дисциплины	
4.1. Разделы дисциплины и виды занятий.....	6
4.2. Занятия лекционного типа.....	7
4.3. Занятия семинарского типа	
4.3.1. Семинары, практические занятия.....	9
4.3.2. Лабораторные занятия.....	9
4.4. Самостоятельная работа.....	9
5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине	11
6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации.....	12
7. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины	13
8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины	14
9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.....	14
10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине	
10.1. Информационные технологии.....	15
10.2. Программное обеспечение.....	15
10.3. Базы данных и информационные справочные системы.....	15
11. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине.....	15
12. Особенности освоения дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья	15
Приложения: 1. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации...	17

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы.

В результате освоения образовательной программы специалитета обучающийся должен овладеть следующими результатами обучения по дисциплине:

Код и наименование компетенции	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Планируемые результаты обучения (дескрипторы)
<p>ПК-5 Способен планировать и осуществлять синтез энергонасыщенных соединений азота</p>	<p>ПК-5.6 Количественно исследовать механизм химических реакций, прогнозировать реакцию способность органических соединений азота</p>	<p>Знать: основные механизмы реакций, объясняющие реакцию способность и направление реакции (З.5.6.1); Уметь: Применять методы количественной теории органических реакций для прогноза реакционной способности органических соединений азота (У.5.6.1); Владеть: Навыками решения задач в теоретических и практических исследованиях. (В.5.6.1).</p>

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы.

Дисциплина входит в часть, формируемую участниками образовательных отношений Блока Б1, «Дисциплины по выбору» (Б1.В.ДВ.03.01) и изучается на 3 курсе в 6 семестре.

В методическом плане дисциплина опирается на элементы компетенций, сформированные при изучении дисциплины «Введение в специальность», «Физическая химия» и «Органическая химия». Полученные в процессе изучения дисциплины «Количественная теория реакций органических соединений азота» знания, умения и навыки могут быть использованы при изучении дисциплин «Проектирование производств энергонасыщенных соединений» и «Молекулярный дизайн и свойства органических соединений азота», при прохождении производственной практики, а также при выполнении выпускной квалификационной работы.

3. Объем дисциплины.

Вид учебной работы	Всего, ЗЕ/академ. часов
Общая трудоемкость дисциплины (зачетных единиц/ академических часов)	4/144
Контактная работа с преподавателем:	76
занятия лекционного типа	36
занятия семинарского типа, в т.ч.	
семинары, практические занятия (в том числе практическая подготовка)	-
лабораторные работы (в том числе практическая подготовка)	36(8)
курсовое проектирование (КР или КП)	
КСР	4
другие виды контактной работы	-
Самостоятельная работа	68
Форма текущего контроля (Кр, реферат, РГР, эссе)	-
Форма промежуточной аттестации (КР, КП, зачет, экзамен)	Зачёт

4. Содержание дисциплины.

4.1. Разделы дисциплины и виды занятий.

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Занятия лекционного типа, академ. часы	Занятия семинарского типа, академ. часы		Самостоятельная работа, академ. часы	Формируемые компетенции	Формируемые индикаторы
			Семинары и/или практические занятия	Лабораторные работы			
1.	Понятие о механизмах органических реакций. Классификация механизмов органических реакций.	6	-	-	13	ПК - 5	ПК-5.6
2.	Механизм электрофильного нитрования. Основные электрофильные нитрующие агенты.	6		-	5	ПК - 5	ПК-5.6
3	Основы формальной кинетики органических реакций. Закон действия масс	4		18	10	ПК - 5	ПК-5.6
4.	Теория переходного состояния. Поверхность потенциальной энергии.	4		-	8	ПК - 5	ПК-5.6
5	Уравнение Аррениуса. Истинная энергия активации и кинетический изотопный эффект.	4		18	8	ПК - 5	ПК-5.6
6	Количественная теория кислот и оснований. Функции кислотности	4		-	8	ПК - 5	ПК-5.6
7	Влияние среды на скорость и равновесие реакций органических соединений	4		-	8	ПК - 5	ПК-5.6
8	Принцип линейности свободной энергии	4		-	8	ПК - 5	ПК-5.6

4.2. Занятия лекционного типа.

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
1	<p>Механизмы реакций органических соединений. Классификация механизмов по характеру разрыва и образования связей. Гомолитические, гетеролитические реакции, одноэлектронный перенос. Нуклеофильные и электрофильные реагенты и реакции. Ионные реакции. Карбокатионы и карбанионы. Реакции ионов (перегруппировки, распад, присоединение, замещение других ионов, рекомбинация). Классификация химических реакций. Элементарные акты и механизм реакции. Порядок и молекулярность реакции. Стереохимические аспекты моно- и бимолекулярного замещения.</p>	6	Слайд-презентация
2	<p>Реакция электрофильного нитрования как основной химический процесс в производстве ароматических нитросоединений. Кислотное нитрование ароматических соединений. Свойства и состав нитрующих кислотных смесей. Кинетика и механизм электрофильного нитрования. Нитроний-катион. Получение солей нитрония. Факторы, влияющие на процессы нитрования. Влияние концентрации серной кислоты (состава смесей). Пространственное влияние заместителей, связанных с ароматическим ядром. Влияние температуры на соотношение изомеров при нитровании. Парциальный фактор скорости нитрования. Механизм электрофильного нитрования с переносом электрона. Комплекс Уэланда. Сравнительная оценка реакционной способности нитрующих агентов. Основные электрофильные нитрующие агенты.</p>	6	Слайд-презентация
3	<p>Основы формальной кинетики органических реакций. Скорость химической реакции. Закон действия масс. Реакции простых типов. Константа скорости реакций. Уравнение Аррениуса. Порядок и молекулярность реакций.</p>	4	Слайд-презентация
4	<p>Теория переходного состояния. Поверхность потенциальной энергии. Теория абсолютных скоростей реакций. Термодинамическая их формулировка.</p>	4	Слайд-презентация
5	<p>Влияние среды на скорость и равновесие реакций органических соединений. Эффекты сольватации. Специфическая и неспецифическая сольватация. Клеточный эффект. Структура сольватных оболочек. Электростатическая сольватация. Энергии ион-ионного, ион-дипольного и диполь-дипольного взаимодействия. Уравнение Скотчгарда. Влияние</p>	4	Слайд-презентация

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
	диэлектрической проницаемости среды на скорость ионных реакций. Влияние ионной силы на скорость реакций. Уравнение Бренстеда-Бьеррума. Закон Дебая-Хюккеля. Коэффициенты активности. Первичный и вторичный солевой эффекты. Дисперсионное взаимодействие. Формула Лондона. Поляризуемость нейтральных органических молекул и ионов. Уравнение Бахшиева. Влияние дисперсионного взаимодействия на скорость и равновесие органических реакций.		
6	Количественная теория кислот и оснований. Определение кислот и оснований по Бренстеду и Льюису. Термодинамические и концентрационные константы ионизации. Константы основности. Методы измерения констант ионизации. Измерения степени диссоциации. Электрометрическое (потенциометрическое) определение констант ионизации. Измерение констант ионизации с помощью индикаторов. Спектрофотометрическое измерение констант ионизации. Определение констант ионизации сильных кислот и слабых оснований	4	Слайд-презентация
7	Постулат Гаммета. Функция кислотности H_0 . Нарушения постулата Гаммета. Функции кислотности. Соотношения между функциями кислотности. Суперкислоты. Типы кислот и оснований. ОН-, NH-, СН - кислоты. Влияние структурных и сольватационных факторов на кислотность. Кислотность и основность алифатических, ароматических и гетероциклических ОН-, NH- и СН-кислот. Вторичные основания.	4	Слайд-презентация
8	Принцип линейности свободных энергий и количественная интерпретация реакционной способности. Сущность принципа линейности свободных энергий (ЛСЭ). Уравнение Бренстеда как пример соблюдения принципа ЛСЭ. Уравнение Юкава-Цуно. Электрофильные и нуклеофильные константы заместителей. Индукционные константы заместителей σ Тафта. Применение σ -анализа для интерпретации механизмов органических реакций. Понятие о резонансе (мезомерии). Электроотрицательность групп и индукционный эффект. Гиперконъюгация. Принцип аддитивности. Постулат Тафта. Разделение вкладов индукционного, стерического и резонансного эффектов в реакционную способность. Правило затухания индукционного эффекта. Индукционные, стерические и резонансные константы заместителей.	4	Слайд-презентация

4.3. Занятия семинарского типа.

4.3.1. Семинары, практические занятия.

Практические занятия не предусмотрены

4.3.2. Лабораторные работы

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы		Примечания
		всего	в том числе на практическую подготовку	
3	Исследование конверсии субстрата (например, соли 5-фенилтетразола) в реакции электрофильного замещения в условиях межфазного катализа. Применение метода УФ спектроскопии с целью количественного контроля конверсии субстрата. Построение калибровочной зависимости оптической плотности от концентрации субстрата. Расчёт и построение зависимости концентрации субстрата (%) от времени реакции.	18	4	
3, 5	Расчёт констант скорости (первого и второго порядков) и активационных параметров при алкилировании с участием органических соединений азота. Выводы об исследованном механизме реакции.	18	4	

4.4. Самостоятельная работа обучающихся.

№ раздела дисциплины	Тема самостоятельной работы	Объем, акад. часы	Примечания
1	Механизмы цепных ион-радикальных реакций в химии нитросоединений (реакции Корнблума, тер Меера, щелочного нитрования мононитроалканов). Механизмы реакций электрофильного замещения на примере ароматического нитрования и галогенирования и реакции Фриделя-Крафтса. Влияние заместителей и кислотности среды на скорость и направление процесса. Механизмы электрофильного замещения в ряду металлорганических соединений	13	Устный опрос Слайд-презентация
2	Факторы, влияющие на образование катиона нитрония (состав кислотной смеси, концентрация, температура). Влияние концентраций серной кислоты (состава	5	Устный опрос Слайд-презентация

№ раздела дисциплины	Тема самостоятельной работы	Объем, акад. часы	Примечания
	<p>смесей) на скорость реакции нитрования.</p> <p>Кинетические закономерности, установленные при нитровании ароматических соединений, обладающих высокой и пониженной реакционной способностью азотной кислотой в инертном растворителе.</p> <p>Влияние заместителей на распределение электронной плотности в ароматических соединениях.</p> <p>Пространственные факторы заместителей, влияющие на скорость реакции нитрования и изомерный состав продуктов реакции. Температурные коэффициенты реакций образования изомеров и их соотношение.</p> <p>Распределение электронной плотности в основном и реакционном состояниях в ароматических соединениях. Пространственное влияние заместителей в ароматических соединениях на изомерный состав продуктов реакции нитрования.</p> <p>Нитрование спиртов (о-нитрование). Механизм реакции. Нитрование аминоксидных соединений. Нитрование галогенароматических соединений. Нитрование ароматических соединений в неокислительных средах</p> <p>Механизм реакции нитрования ароматических соединений, факторы влияющие на процессы нитрования различными нитрующими агентами.</p>		
3	<p>Механизмы реакций нуклеофильного замещения водорода в ароматическом ряду (викариозное замещение). Типы реакций 1,3-дипольного циклоприсоединения. Региоселективность циклоприсоединения. Кинетические уравнения цепных реакций с линейным и квадратичным обрывом цепи, с разветвлением и без разветвления цепи. Кинетические уравнения автокаталитических реакций.</p> <p>Кинетические уравнения последовательных реакций с ассоциативным предравновесием.</p>	10	Устный опрос Слайд-презентация
4	<p>Влияние конформационных равновесий на скорость реакций конформеров. Принцип Кертвина-Гаммета. Методы ингибирования и инициирования цепных реакций. Эффективность инициаторов и ингибиторов.</p>	8	Устный опрос Слайд-презентация
5	<p>Кинетика гетерофазных органических реакций, осложненных массообменом. Теория обновления поверхности Данквертса-Астариты. Принцип ЖМКО (жестких и мягких кислот и оснований). Количественный учет влияния растворителей на скорость и равновесие органических реакций.</p>	8	Устный опрос Слайд-презентация
6	<p>Уравнения Камлета и Коппеля-Пальма. Понятие о супрамолекулярной химии. Принципы молекулярного</p>	8	Устный опрос Слайд-

№ раздела дисциплины	Тема самостоятельной работы	Объем, акад. часы	Примечания
	распознавания. Координационные комплексы переходных металлов как катализаторы ионных органических реакций, включая анионную полимеризацию олефинов		презентация
7	Карбены, нитрены и их использование в органическом синтезе. Методы генерации и строение карбенов и нитренов. Перегруппировки карбокатионных интермедиатов. Реакция Байера-Виллигера. Перегруппировки Демьянова и Вагнера-Меервейна.	8	Устный опрос Слайд-презентация
8	Секстетные перегруппировки. Реакции Гофмана, Курциуса, Бекмана. Прототропные и сигматропные перегруппировки органических соединений. Кетоенольная, лактам-лактимная, нитро-ацитаутомерия. Металлотропия. Конформации линейных и циклических органических молекул. Потенциалы внутреннего вращения, энергии напряжения и их связь с реакционной способностью	8	Устный опрос Слайд-презентация

5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине.

Методические указания для обучающихся по организации самостоятельной работы по дисциплине, включая перечень тем самостоятельной работы, формы текущего контроля по дисциплине и требования к их выполнению размещены в электронной информационно-образовательной среде СПбГТИ(ТУ) на сайте: <http://media.technology.edu.ru>.

При чтении лекций используются материалы, представляемые в виде презентаций, с применением ресурса PowerPoint, включая анимационные режимы. Демонстрация - с помощью мультимедийного проектора, а также белой доски. В процессе обучения используются информационные материалы ведущих мировых производителей оборудования для производств малотоннажных химических продуктов.

В качестве учебных пособий для демонстрации условий применения аналитических методов на производстве может быть использован кафедральный стенд, моделирующий стадию нитрования ароматических субстратов серно-азотной нитрующей смесью, а также различные типы емкостных реакторов, моделей перемешивающих устройств, средства автоматического контроля. Используется оборудование ЦКП «Передовые методы диагностики в химии». Для демонстрации работы микрореактора используются ресурсы кафедры оптимизации химических и биотехнологических производств СПбГТИ(ТУ).

6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации.

Современное выполнение обучающимся мероприятий текущего контроля позволяет превысить пороговый уровень освоения предусмотренных элементов компетенций. Результаты дисциплины считаются достигнутыми, если для всех элементов компетенций превышен пороговый уровень освоения компетенции на данном этапе.

Промежуточная аттестация по дисциплине проводится в форме зачёта. К сдаче зачёта допускаются студенты, выполнившие все формы текущего контроля. Зачёт предусматривает проверку освоения предусмотренных элементов компетенций, и комплектуется двумя вопросами (заданиями) для проверки знаний, умений и навыков. При сдаче зачёта, студент получает билет, состоящий из 1-го вопроса (задания) из перечня вопросов по дисциплине, время подготовки студента к устному ответу – до 30 минут.

Оценка «зачтено» (пороговый уровень) ставится студенту, обнаружившему понимание учебного материала в объеме, необходимом для предстоящей работы по профессии, справляющемуся с выполнением заданий, предусмотренных программой практики, при наличии в содержании отчета и его оформлении небольших недочётов или недостатков, затруднениях при ответах на вопросы.

Пример варианта билета на зачёте:

Вариант № 1

1. Определение констант ионизации сильных кислот и констант основности слабых оснований. Функция кислотности Гаммета.

Фонд оценочных средств по дисциплине представлен в Приложении № 1

7. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины.

а) печатные издания:

1. Целинский, И.В. Количественная теория органических реакций. ч. 1. Механизмы реакций органических соединений: текст лекций / И.В. Целинский, С.Ф.Мельникова; СПб ГТИ (ТУ), каф. ХТОСА. - СПб, 2010. - 55 с. (ЭБ).
2. Целинский, И.В. Кинетика реакций нитросоединений: текст лекций / И.В. Целинский, И.В. Шугалей, С.Ф.Мельникова; СПб ГТИ (ТУ), каф. ХТОСА. - СПб.: 2010. - 52 с. (ЭБ).
3. Целинский, И.В. Роль среды в реакциях нитросоединений: текст лекций / И.В. Целинский, И.В. Шугалей. СПб ГТИ (ТУ), каф. ХТОСА.-СПб.: 2010. - 48 с. (ЭБ).
4. Целинский, И.В. Кислотно-основные свойства органических соединений азота: текст лекций / И.В. Целинский, И.В. Шугалей. / СПб ГТИ (ТУ), каф. ХТОСА. - СПб.: 2012. - 57с. (ЭБ).
5. Травень, В.Ф. Органическая химия В 3-х томах: учебник для вузов / В.Ф. Травень.-М.: БИНОМ, 2015. (ЭБС).
6. Реутов, О.А. Органическая химия: в 4-х частях / О.А. Реутов, А.Л. Курц, К.П. Бутин. - М.: Бином. Лаборатория знаний, - ч.1. – 7-е изд. – 2017. - 570 с, ч.2 – 7-е изд. 2017. - 626 с, ч.3.- 6-е изд. - 2016. - 547 с, ч .4. 4-е изд. – 2016 . - 727 с. (ЭБС)
7. Трифонов, Р.Е. Моделирование структуры и свойств молекул методами молекулярной механики и молекулярной динамики: Учебное пособие / Р.Е Трифонов, В.А. Островский - СПб.: СПбГТИ(ТУ), 2011. - 52 с. (ЭБ)
8. Целинский, И.В. Теоретические основы электрофильного нитрования: текст лекций / И.В. Целинский, С.Ф. Мельникова; СПбГТИ(ТУ), каф. ХТОСА. –СПб., 2011. - 113 с. (ЭБ).
9. Химия нитро- и нитрозогрупп. / Под ред. Г. Фойера. пер. с англ. В.И. Ерашко, М.В. Ершовой. – М.; Мир, 1973. том 2 – 299 с.
10. Ингольд, К. Теоретические основы органической химии / К. Ингольд. - М.; Мир, 1973. – 1054 с.
11. Горелик, М.В. Основы химии и технологии ароматических соединений / М.В. Горелик, Л.С. Эфрос. - М.; Химия, 1992, - 640 с.
12. Жилин, В.Ф. Химия и технология ароматических нитросоединений: учебное пособие / В.Ф. Жилин, В.Л. Збарский.- М.; Изд. центр РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2004. - 272 с.
13. Курц, А.В. Электрофильное замещение в ароматическом ряду / Курц А.В., Ливанцев М.В., Ливанцев Л.И. – Методическая разработка для студентов III курса. - М.: МГУ им. М.В. Ломоносова, 1997.

б) электронные учебные издания

1. Целинский, И.В. Количественная теория органических реакций. ч. 1. Механизмы реакций органических соединений: текст лекций / И.В. Целинский, С.Ф.Мельникова; СПб ГТИ (ТУ), каф. ХТОСА. - СПб, 2010. - 55 с. (ЭБ).
2. Целинский, И.В. Кинетика реакций нитросоединений: текст лекций / И.В. Целинский, И.В. Шугалей, С.Ф.Мельникова; СПб ГТИ (ТУ), каф. ХТОСА. - СПб.: 2010. - 52 с. (ЭБ).
3. Целинский, И.В. Роль среды в реакциях нитросоединений: текст лекций / И.В. Целинский, И.В. Шугалей. СПб ГТИ (ТУ), каф. ХТОСА.-СПб.: 2010. - 48 с. (ЭБ).
4. Целинский, И.В. Кислотно-основные свойства органических соединений азота: текст лекций / И.В. Целинский, И.В. Шугалей. / СПб ГТИ (ТУ), каф. ХТОСА. - СПб.: 2012. - 57с. (ЭБ).

8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины.

Для расширения знаний по дисциплине рекомендуется использовать интернет-ресурсы:

проводить поиск в системах: Scirus.com. SciFinder, Reaxys.

Государственная публичная научно-техническая библиотека. <http://www.gpntb.ru/>;

Учебный план РПД и учебно-методический материал; <http://media.technolog.edu.ru>

«Электронный читальный зал – БиблиоТех» <https://technolog.bibliotech.ru/>;

Федеральный портал «Российское образование» <http://www.edu.ru/>

Федеральное хранилище «Единая коллекция цифровых образовательных ресурсов» <http://school-collection.edu.ru/>

«Лань» <https://e.lanbook.com/books/>. ООО «Издательство «Лань».

«Научно-электронная библиотека eLibrary.ru». <http://elibrary.ru>. Государственная публичная научно-техническая библиотека. <http://www.gpntb.ru/>;

9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.

Дисциплина обеспечена необходимой литературой и учебными пособиями. При чтении лекций используются презентации, слайды рисунки и схемы, представляемые с помощью мультимедийного проектора.

Лекционные, практические и лабораторные занятия проводятся в специализированных аудиториях и лабораториях. Лекционная аудитория оснащена мультимедийной системой с комплектом презентаций и видеофильмов.

Практические занятия проводятся в специализированной аудитории, снабженной персональными компьютерами, программным обеспечением для выполнения обработки экспериментальных данных.

Рабочей программой дисциплины предусмотрена самостоятельная работа студентов. Самостоятельная работа проводится с целью углубления знаний по дисциплине и предусматривает:

- чтение студентами рекомендованной литературы и усвоение теоретического материала дисциплины;
- подготовку к лабораторным и практическим занятиям;
- работу с интернет-источниками;
- посещение научных семинаров и конференций, проводимых в Санкт-Петербурге;
- подготовку к сдаче зачётов и экзаменов.

Планирование времени на самостоятельную работу, необходимого на изучение настоящей дисциплины, студентам лучше всего осуществлять на весь семестр, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала. Материал, пройденный на семинарских занятиях, необходимо регулярно дополнять сведениями из литературных источников, представленных в «Рабочей программе». По каждой из тем для самостоятельного изучения, приведенных в «Рабочей программе» дисциплины следует сначала прочитать рекомендованную литературу и при необходимости составить краткий конспект основных положений, терминов, сведений, требующих запоминания и являющихся основополагающими в этой теме и для освоения последующих разделов курса.

Все виды занятий по дисциплине преподаватели должны проводить в соответствии с требованиями следующих СТП:

СТП СПбГТИ 016-2015 КС УКДВ. Порядок проведения зачетов и экзаменов.

СТП СПбГТИ 020-2011. КС УКДВ. Виды учебных занятий. Лабораторные занятия. Общие требования к организации и проведению.

СТП СПб ГТИ 040-2002. КС УКДВ. Виды учебных занятий. Лекция. Общие требования. Утв. Ректором 17.05.2002;

СТП СПбГТИ 048-2009. КС УКДВ. Виды учебных занятий. Самостоятельная планируемая работа студентов. Общие требования к организации и проведению. Утв. Ректором 11.12.2009;

Планирование времени, необходимого для изучения данной дисциплины, лучше всего осуществлять на весь семестр, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала.

Основными условиями правильной организации учебного процесса для студентов является: плановость в организации учебной работы; серьезное отношение к изучению материала; постоянный самоконтроль.

На занятия студентов должен приходиться, имея багаж знаний и вопросов по уже изученному материалу.

С целью более эффективного усвоения студентами материала данной дисциплины рекомендуется при проведении занятий использовать мультимедийные ресурсы, а также ресурсы сети интернет.

Устный опрос проводится с целью определения качества усвоения лекционного материала.

На контрольных мероприятиях студентам предлагается ответить на 3 вопроса по материалам учебной дисциплины. Оценка проставляется в зачетную книжку.

10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине.

10.1. Информационные технологии.

В учебном процессе по данной дисциплине предусмотрено использование информационных технологий

- чтение лекций с использованием слайд-презентаций
- взаимодействие с обучающимися посредством ЭИОС
- информационные справочные системы Scirus.com. SciFinder, Reaxys

Для расширения знаний по теме обучения рекомендуется использовать Интернет-ресурсы: проводить поиск в различных системах, таких как, www.yandex.ru, www.google.ru и других, и использовать материалы Интернет-ресурсов профильных организаций, рекомендованных преподавателем.

Возможна сдача электронного варианта отчетов, рефератов, литературных обзоров и др. по электронной почте, обмен информацией по социальным сетям.

10.2. Программное обеспечение.

Пакеты прикладных программ стандартного набора (MicrosoftOffice).

(Microsoft Excel; Microsoft Word; Microsoft PowerPoint).

Проводить поиск в системах: Scirus.com. SciFinder, Reaxys.

10.3. Базы данных и информационные справочные системы.

- Электронно-библиотечные системы, предлагаемые библиотекой СПбГТИ(ТУ).
- Справочно-поисковая система «Консультант-Плюс»,
- «Электронный читальный зал – БиблиоТех» <https://technolog.bibliotech.ru/>;
- Федеральный портал «Российское образование» <http://www.edu.ru/>
- Федеральное хранилище «Единая коллекция цифровых образовательных ресурсов» <http://school-collection.edu.ru/>
- «Лань» <https://e.lanbook.com/books/>. ООО «Издательство «Лань».
- «Научно-электронная библиотека eLibrary.ru». <http://elibrary.ru>. Наименование организации – ООО РУНЭБ.

11. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине.

- Для ведения лекционных и практических занятий используется аудитория, оборудованная средствами оргтехники на 50 посадочных мест.

- Для проведения лабораторных занятий используется синтетический практикум, рассчитанный на 30 рабочих мест, оборудованный для проведения химических синтезов.

Кафедра оснащена необходимым научно-исследовательским оборудованием, измерительными и вычислительными комплексами и другим материально-техническим обеспечением, необходимым для полноценного прохождения учебного процесса.

12. Особенности освоения дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья.

Для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями учебные процесс осуществляется в соответствии с Положением об организации учебного процесса для обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья СПбГТИ(ТУ), утвержденным ректором 28.08.2014 г.

**Фонд оценочных средств
для проведения промежуточной аттестации по
дисциплине «Количественная теория реакций органических соединений азота»**

1. Перечень компетенций и этапов их формирования.

Индекс компетенции	Содержание	Этап формирования
ПК-5	Способен планировать и осуществлять синтез энергонасыщенных соединений азота	промежуточный

2. Показатели и критерии оценивания компетенций на различных этапах их формирования, шкала оценивания

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Показатели сформированности (дескрипторы)	Критерий оценивания	Уровни сформированности (описание выраженности дескрипторов)		
			«удовлетворительно» (пороговый)	«хорошо» (средний)	«отлично» (высокий)
ПК-5.6 Количественно исследовать механизм химических реакций, прогнозировать реакционную способность органических соединений азота.	Называет основные механизмы реакций, объясняющие реакционную способность и направление реакции (3.5.6.1);	Правильные ответы на вопросы № 1,2,6,11,13-15,17,19,21,33 к зачёту	Называет основные механизмы реакций, объясняющие реакционную способность и направление реакции с ошибками	Называет основные механизмы реакций, объясняющие реакционную способность и направление реакции с помощью преподавателя	Правильно и самостоятельно называет основные механизмы реакций, объясняющие реакционную способность и направление реакции
	Сопоставляет и делает выводы По применению методов количественной теории органических реакций для прогноза реакционной способности органических соединений азота (У.5.6.1);	Правильные ответы на вопросы № 4,7,8,12,16,22, 25-28,30,34-36 к зачёту	Неточно сопоставляет и делает выводы по применению методов количественной теории органических реакций для прогноза реакционной способности органических соединений азота	Сопоставляет и делает выводы по применению методов количественной теории органических реакций для прогноза реакционной способности органических соединений азота с подсказками преподавателя	Самостоятельно сопоставляет и делает выводы по применению методов количественной теории органических реакций для прогноза реакционной способности органических соединений азота и объясняет прогноз возможных результатов
	Демонстрирует Навыки решения задач в теоретических и практических исследованиях. (В.5.6.1).	Правильные ответы на вопросы № 3,5,9,10,18, 20,23,24,29,31, 32,37 к зачёту	Неуверенно и с небольшими ошибками Демонстрирует Навыки решения задач в теоретических и практических исследованиях.	Уверенно демонстрирует навыки решения задач в теоретических и практических исследованиях.	Правильно и самостоятельно демонстрирует навыки решения задач в теоретических и практических исследованиях.

3. Типовые контрольные задания для проведения промежуточной аттестации Вопросы для оценки знаний, умений и навыков, сформированных у студента по компетенции ПК-5:

1. Реакции нитрования, основные типы и механизмы получения нитросоединений.
2. Нитрование ароматических соединений серно-азотными кислотными смесями, механизм реакции.
3. Кинетика нитрования ароматических соединений.
4. Зависимость потенциальной энергии системы от координаты реакции при нитровании.
5. Доказательство ступенчатого бимолекулярного механизма реакции нитрования ароматических соединений.
6. Классификация заместителей в ароматическом соединении.
7. Влияние заместителей на распределение электронной плотности в ароматических соединениях и переходных состояниях.
8. Пространственное влияние заместителей, связанных с ароматическим ядром на реакцию электрофильного нитрования и на изомерный состав продуктов реакции нитрования.
9. Влияние температуры на соотношение изомеров при нитровании ароматических соединений на примере толуола.
10. Влияние концентрации азотной кислоты на скорость реакции нитрования и выход нитросоединения.
11. Гомо- и гетерофазные реакции и их особенности. Кинетический и диффузионный контроль реакции.
12. Энергия водородной связи и ее влияние на скорость и равновесие химической реакции.
13. Параллельные и последовательные реакции. Лимитирующая стадия процесса и ее определение.
14. Понятие о механизме химических реакций.
15. Типы гомолитических реакций. Примеры.
16. Ассоциация ионов и ее влияние на скорость химических реакций. Типы ионных пар. Уравнение Акри.
17. Типы гетеролитических реакций. Примеры.
18. Определение кислот и оснований по Бренстеду и Льюису.
19. Нуклеофильные и электрофильные реагенты и реакции.
20. Методы измерения констант ионизации и констант основности.
21. Молекулярные реакции. Правило Вудворда-Гоффмана.
22. Теория переходного состояния. Поверхность потенциальной энергии.
23. Определение констант ионизации сильных кислот и констант основности слабых оснований. Функция кислотности Гаммета.
24. Термодинамическая формулировка скоростей реакций. Энтальпия и энтропия активации и их связь с аррениусовской энергией активации.
25. Типы кислот и оснований. ОН-, NH- и СН-кислоты. Влияние структурных факторов на кислотность.
26. Истинная энергия активации. Кинетический изотопный эффект.
27. Первичный и вторичный изотопные эффекты. Изотопный эффект среды.
28. Определение катализа. Гомогенный и гетерогенный катализ. Кинетические уравнения каталитических реакций.
29. Общий и специфический кислотно-основной катализ. Соотношение Бренстеда между скоростями и равновесиями кислотно-(основно)-каталитических процессов.
30. Принцип линейности свободных энергий (ЛСЕ). Уравнение Бренстеда как пример соблюдения принципа ЛСЕ.

31. Уравнение Гаммета и его модификации как пример соблюдения принципа линейности свободной энергии. Уравнение Юкава-Цуно. Электрофильные и нуклеофильные константы заместителей.

32. Влияние ионной силы на скорость ионных реакций. Уравнение Бренстеда.

33. Понятие о резонансе (мезомерии). Электроотрицательность групп и индуктивный эффект. Гиперконъюгация.

34. Первичный и вторичный солевые эффекты в скоростях и равновесиях органических реакций.

35. Применение принципа линейности свободных энергий к отдельным структурным эффектам. Принцип аддитивности. Постулат Тафта.

36. Разделение вкладов индукционного, стерического и резонансного эффектов заместителей в реакционную способность органических соединений. Правило затухания индукционного эффекта.

37. Индукционные, стерические и резонансные константы заместителей. Орто-эффект. Взаимное влияние эффектов заместителей.

4. Методические материалы для определения процедур оценивания знаний, умений и навыков, характеризующих этапы формирования компетенций.

Промежуточная аттестация по дисциплине проводится в соответствии с требованиями СПб ГТИ(ТУ) 016-2015. КС УКДВ Порядок проведения зачетов и экзаменов.

По дисциплине промежуточная аттестация проводится в форме зачёта.

Шкала оценивания на зачёте – «зачёт», «незачёт». При этом «зачёт» соотносится с пороговым уровнем сформированности компетенции.