



Реакційні інтермедіати в органічному синтезі

Робоча програма навчальної дисципліни (Силабус)

Реквізити навчальної дисципліни

Рівень вищої освіти	<i>Другий (магістерський)</i>
Галузь знань	16 Хімічна інженерія та біоінженерія
Спеціальність	161 Хімічні технології та інженерія
Освітня програма	Хімічні-технології синтезу та фізико-хімічні властивості органічних матеріалів
Статус дисципліни	<i>Вибіркова</i>
Форма навчання	<i>Очна(денна)</i>
Рік підготовки, семестр	<i>1 курс, семестр 2</i>
Обсяг дисципліни	4 кредити ЄКТС
Семестровий контроль/ контрольні заходи	<i>Залік, МКР, ДКР</i>
Розклад занять	Лекції 36 год., практичні заняття 18 год., самостійна робота 66 год.
Мова викладання	<i>Українська/Англійська</i>
Інформація про керівника курсу / викладачів	Лектор: Проф. каф. ОХ та ТОР, доктор хімічних наук, професор, Фокін Андрій Артурович, aaf@xtf.kpi.ua Практичні / Семінарські: доц. Е.Д. Бутова
Розміщення курсу	https://campus.kpi.ua/tutor/index.php?mode=mob&create&filter=&sd=10166&cm=2

Програма навчальної дисципліни

1. Опис навчальної дисципліни, її мета, предмет вивчення та результати навчання

Дисципліна «Реакційні інтермедіати в органічному синтезі» складена відповідно до освітньо-професійної програми підготовки спеціалістів за спеціальністю 161 Хімічні технології та інженерія, спеціалізації "Хімічні технології синтезу та фізико-хімічні властивості органічних матеріалів", за денною формою навчання. Навчальна дисципліна належить до циклу професійної підготовки.

***Предметом** навчальної дисципліни є вивчення практичних методів експериментальної органічної хімії, роботи з хімічною літературою, ведення лабораторних журналів, написання та оформлення наукових статей і технічної документації.*

***Метою** дисципліни є формування у студентів здатностей:*

–використовувати теоретичні знання й практичні навички природничо-наукових та професійно орієнтованих навчальних дисциплін для оволодіння основами організації та методології наукових досліджень хіміко-технологічних систем;

–використовувати професійно профільовані знання і практичні навички в галузі основ хімічної технології органічних сполук для оцінювання техніко-економічних показників хімічних та хіміко-технологічних процесів;

–використовувати знання, уміння й навички в галузі природничо-наукових дисциплін для теоретичного освоєння професійних дисциплін і вирішення практичних завдань з хімічної технології органічних речовин.

Основні завдання кредитного модуля.

Згідно з вимогами програми навчальної дисципліни студенти після засвоєння дисципліни мають продемонструвати такі результати навчання:

знання:

- основних інтермедіатів в органічному синтезі;*
- будови та основних перетворень реакційних інтермедіатів;*
- методів генерації реакційних інтермедіатів;*
- методів дослідження реакційних інтермедіатів;*
- про постановку експерименту в органічному синтезі з урахуванням властивостей інтермедіатів;*
- по пошуку джерела інформації та бази даних по будові та властивостям органічних сполук;*
- про методологію поглибленого вивчення механізмів реакцій.*

уміння:

- Використовуючи наукові знання синтезу органічних речовин, в умовах лабораторії або виробництва, для визначення даних до технічного завдання вміти сформулювати мету виконання дослідження (створення нового об'єкту, напрямок вдосконалення існуючого, визначення або прогнозування ключових параметрів і властивостей системи та ін.);*
- Використовуючи наукові положення хімічних і інженерно-хімічних наук, інформатики,*

математики, методи досліджень процесів органічного синтезу, комп'ютерного моделювання, в умовах лабораторії або виробництва - розробити програму виконання досліджень технологічного об'єкта (сформулювати адекватну фізичну модель, розробити схему компоновки експериментального обладнання та приладів, визначити групу інформаційних параметрів, способи і послідовність їх визначення та аналізу) з метою одержання даних для складання ТЕО;

- Використовувати типові лабораторне обладнання та вимірювальну апаратуру, типові методи та устаткування, інструкції та довідкові дані, в умовах хімічної лабораторії або хімічного виробництва виконувати фізико-хімічні випробування з хімічними системами в твердій, газовій фазах та розчинах з метою визначення необхідних фізико-хімічних даних для технологічного регламенту або ТЗ, або технічних умов.

досвід:

- вміти використовувати сучасні джерела наукової інформації з тематики дослідження;
- вміти передбачати основні напрямки перетворень реакційних інтермедіатів в реальних хімічних процесах;
- вміти застосовувати сучасні методи теоретичного та експериментального дослідження.

2. Пререквізити та постреквізити дисципліни (місце в структурно-логічній схемі навчання за відповідною освітньою програмою)

Міждисциплінарні зв'язки: Матеріал кредитного модуля базується на дисциплінах «Органічна хімія», «Механізми органічних реакцій», «Хімія елементарноорганічних сполук», «Стереохімія органічних сполук», «Кінетика та термодинаміка органічних реакцій», «Хімія гетероциклічних сполук» і є завершальним у циклі професійної і практичної підготовки.

3. Зміст навчальної дисципліни

Тема 1. Вступ. Класифікація реакційних інтермедіатів в органічній хімії.

Основні класи інтермедіатів - карбокатиони, радикали, карбаніони, карбени. Інші – катіон-радикали, аніон-радикали, нітрени. Основні класи органічних реакцій де інтермедіати утворюються чи фіксуються.

Тема 2. Карбокатиони, будова та природа стабілізації.

Класифікація карбокатионів, електронні та стеричні ефекти, гіперкон'югація, метонієвий карбокатион, приклади стабільних карбокатионів, проблема карбонільного катіона, ароматичні карбокатиони.

Тема 3. Методи генерації карбокатионів. Генерація в газовій та конденсованих фазах, суперкислоти, протонювання олефінів, інші.

Тема 4. Методи дослідження карбокатионів.

ЯМР-спектроскопія, рентгеноструктурний аналіз, солі карбокатионів.

Тема 5. Карбокатиони як інтермедіати в органічних реакціях.

Класичні дослідження нуклеофільного заміщення, роботи Брауна та Уинстейна, сольволіз та гетероліз, реакції елімінування.

Тема 6. Радикали, будова та природа стабілізації.

Класифікація радикалів, електронні та стеричні ефекти, гіперконюгація, приклади стабільних радикалів.

Тема 7. Методи генерації радикалів.

Гомоліз, перенос атома водню, активація алканів, ароматичні радикали через приєднання.

Тема 8. Методи дослідження радикалів.

Спеціальна техніка ЯМР, електронний спіновий резонанс.

Тема 9. Карбаніони, будова та природа стабілізації.

Класифікація карбаніонів, електронні та стеричні ефекти, гіперкон'югація, приклади стабільних карбаніонів, ароматичні карбаніони.

Тема 10. Методи генерації карбаніонів.

Депротонювання, СН кислотність, металорганічні сполуки, будова та реактивність.

Тема 11. Методи дослідження карбаніонів.

Особливості фізичних властивостей карбаніонів, стабілізовані та нестабілізовані карбаніони.

Тема 12. Карбени, будова та природа стабілізації.

Триплетні та синглетні стани, орбітальна картина, класичні розрахункові роботи, нітрені, кватетній вуглець.

Тема 13. Методи генерації карбенів.

Міжфазно-каталітичний, фотоліз азотвмісних сполук, термоліз, інші.

Тема 14. Реакційна здатність карбенів.

Заміщення та приєднання, орбітальні картини. димерізація.

Тема 15. Інші види реакційних інтермедіатів, катион-радикали. Катион-радикали, будова, природа стабілізації, стійкість.

Тема 16. Інші види реакційних інтермедіатів, аніон-радикали.

Аніон-радикали, будова, природа стабілізації, стійкість. Підведення підсумків.

4. Навчальні матеріали та ресурси

Навчальні матеріали, зазначені нижче, доступні у бібліотеці університету та у бібліотеці кафедри органічної хімії та технології органічних речовин. Обов'язковою до вивчення є базова література, інші матеріали – факультативні. Розділи та теми, з якими студент має ознайомитись самостійно, викладач зазначає на лекційних та практичних заняттях.

Базова: *В бібліотеці університету та у бібліотеці кафедри органічної хімії та технології органічних речовин.*

Додаткова:

*Надаються розділи класичних монографій, сучасні спеціалізовані монографії, огляди з реєр-
review журналів (Chem. Rev., Acc. Chem. Res., Chem. Soc. Rev. та ін.), оригінальні статті
з реєр-review журналів.*

1. Reactive Intermediate Chemistry, Editor(s): Robert A. Moss, Matthew S. Platz, Maitland Jones Jr ISBN:9780471233244 | John Wiley & Sons, Inc.

2. *Reactive Intermediates in Organic Chemistry*, Maya Shankar Singh, ISBN 978-3-527-33594-7, Wiley-VCH, 2014, Weinheim.

Навчальний контент

5. Методика опанування навчальної дисципліни (освітнього компонента)

Лекційні заняття

Вичитування лекцій з дисципліни проводиться паралельно з виконанням студентами індивідуальних завдань та розглядом ними питань, що виносяться на самостійну роботу. При читанні лекцій при змішаному навчанні застосовуються засоби для відеоконференцій (Google Meet, Zoom тощо) та ілюстративний матеріал у вигляді презентацій якій передається слухачам через чат. Після кожної лекції рекомендується ознайомитись з матеріалами, рекомендованими для самостійного вивчення, а перед наступною лекцією – повторити матеріал попередньої. Кожен студент отримує індивідуальне завдання у вигляді оригінальної статті по темі лекції.

Лекція 1. Вступ. Класифікація реакційних інтермедіатів в органічній хімії.

Лекція 2. Карбокатіони, будова та природа стабілізації.

Лекція 3. Методи генерації карбокатіонів.

Лекція 4. Методи дослідження карбокатіонів.

Лекція 5. Карбокатіони як інтермедіати в органічних реакціях.

Лекція 6. Радикали, будова та природа стабілізації.

Лекція 7. Методи генерації радикалів.

Лекція 8. Методи дослідження радикалів.

Лекція 9. Карбаніони, будова та природа стабілізації.

Лекція 10. Методи генерації карбаніонів.

Лекція 11. Методи дослідження карбаніонів.

Лекція 12. Карбени, будова та природа стабілізації.

Лекція 13. Методи генерації карбенів.

Лекція 14. Реакційна здатність карбенів.

Лекція 15. Катіон-радикали, будова, природа стабілізації, стійкість.

Лекція 16. Аніон-радикали, будова, природа стабілізації, стійкість.

Лекція 17. Інші види реакційних інтермедіатів

Лекція 18. Підведення підсумків.

Практичні заняття

Практичні роботи мають на меті навчити студентів самостійно оцінювати роль реакційних інтермедіатів в конкретних хімічних перетвореннях через вирішення задач.

Практичне заняття 1. Розв'язування задач. Карбокатіони.

Практичне заняття 2. Аналіз виконання індивідуальних завдань.

Практичне заняття 3. Розв'язування задач. Радикали.

Практичне заняття 4. Аналіз виконання індивідуальних завдань.

Практичне заняття 5. Розв'язування задач. Карбаніони.

Практичне заняття 6. Аналіз виконання індивідуальних завдань.

Практичне заняття 7. Розв'язування задач. Карбени.

Практичне заняття 8. Аналіз виконання індивідуальних завдань.

Самостійна робота студента

№ з/п	Вид самостійної роботи	Кількість годин СРС
1	Підготовка до аудиторних занять: повторення лекційного матеріалу, підготовка до практичних занять	44
2	Підготовка до ДКР	10
3	Підготовка до МКР	6
4	Підготовка до заліку	6

Політика таконтроль

6. Політика навчальної дисципліни (освітнього компонента)

Всі вимоги не суперечать законодавству України і відповідають нормативним документам Університету. У звичайному режимі роботи університету лекції та лабораторні заняття проводяться в навчальних аудиторіях. У змішаному режимі лекційні заняття проводяться через платформу дистанційного навчання. На початку кожної лекції лектор може проводити опитування за матеріалами попередньої лекції із застосуванням інтерактивних засобів (Google Forms). Перед початком чергової теми лектор може надсилати питання із застосуванням інтерактивних засобів з метою визначення рівня

обізнаності здобувачів за даною темою, підвищення зацікавленості та залучення слухачів до розв'язання прикладів.

Після перевірки завдання викладачем, на захист виставляється загальна оцінка і робота вважається захищеною.

Несвоєчасні захист і виконання роботи без поважної причини штрафуються відповідно до правил призначення заохочувальних та штрафних балів.

Правила призначення заохочувальних та штрафних балів:

Несвоєчасне виконання практичного завдання без поважної причини штрафується 1 балом; Політика дедлайнів та перескладань: визначається п. 8 Положення про поточний, календарний та семестровий контроль результатів навчання в КПІ ім. Ігоря Сікорського.

Політика щодо академічної доброчесності: визначається політикою академічної чесності та іншими положеннями Кодексу честі університету.

7. Види контролю та рейтингова система оцінювання результатів навчання (PCO)

3.

Види контролю встановлюються відповідно до Положення про поточний, календарний та семестровий контроль результатів навчання в КПІ ім. Ігоря Сікорського:

Поточний контроль: ДКР, МКР.

Календарний контроль: проводиться двічі на семестр як моніторинг поточного стану виконання вимог силабусу.

Семестровий контроль: залік

Рейтингова система оцінювання результатів навчання

1. Рейтинг студента з кредитного модуля розраховується виходячи із 100-бальної шкали, з них 60 балів складає стартова шкала. Стартовий рейтинг (протягом семестру) складається з балів, що студент отримує за:

- Виконання індивідуальних завдань (ДКР);
- написання модульної контрольної роботи(МКР);

2. Критерії нарахування балів:

2.1. Робота на практичних заняттях

Ваговий бал – 3.

Максимальна кількість балів на усіх заняттях дорівнює 20 балів.

Критерії оцінювання:

20-18 бали: Гарна робота, правильно оформлена та безпомилкове вирішення усіх завдань під час захисту роботи при наявності елементів продуктивного творчого підходу; демонстрація вміння впевненого застосування фундаментальних знань з органічної хімії при вирішенні контрольних завдань;

17-15 бали: Незначні помилки при виконанні або неправильно оформлена відповідь та вирішення усіх завдань під час захисту роботи з незначними, непринциповими

помилками; наявність 1-2 помилок та 1-2 зауважень щодо вміння застосовувати фундаментальні знання з органічної хімії при вирішенні контрольних завдань та відповіді на теоретичні питання

14-7 балів: Незначні помилки або неправильно оформлений протокол та під час захисту роботи вірне вирішення розрахункових вправ (але не менше 50 %); наявність принципів помилок у відповідях.

6-0 балів: Робота не виконана або незахищена;

2.2. Модульна контрольна робота

Кількість завдань цього виду – **1**.

Модульна контрольна робота оцінюється **в 20 балів**.

Критерії оцінювання модульної контрольної роботи:

20-18 балів: «відмінно» – повна відповідь (не менше 90% потрібної інформації); **17-15 балів:** «дуже добре» – достатньо повна відповідь (не менше 75% потрібної інформації, або незначні неточності);

14-10 балів: «добре» – неповна відповідь (не менше 60% потрібної інформації та деякі помилки);

9-5 балів: «задовільно» – неповна відповідь (не менше 35% потрібної інформації та деякі помилки);

0-5 балів: «незадовільно» – незадовільна відповідь

2.3. Домашня контрольна робота

Кількість завдань цього виду – **1**.

Домашня контрольна робота виконується у вигляді індивідуального завдання: дослідницької пропозиції (ResearchProposal) та оцінюється **в 20 балів**.

Критерії оцінювання розрахунково-графічної роботи:

20 балів: «відмінно» – виконані всі вимоги до роботи, в тому числі дата задачі роботи;

15 балів: «добре» – виконані майже всі вимоги до роботи, або є несуттєві помилки, робота здана вчасно;

10 балів: «задовільно» – є недоліки щодо виконання вимог до роботи і певні помилки, робота здана вчасно;

5 балів: «достатньо» – є суттєві недоліки щодо виконання вимог до роботи і багато помилок, робота здана невчасно;

0 балів: «незадовільно» – не відповідає вимогам до «задовільно»

Штрафні та заохочувальні бали

- За несвоєчасну здачу завдання (без поважної причини) знімається - 2 бали (тобто, при несвоєчасному написанні максимальна оцінка **-3 бали**).

- Заохочувальні бали додаються:

- За активну роботу на лекції нараховується до **1 заохочувального балу** (але не **більше 5 балів** на семестр).

- за якість виконання індивідуальних завдань - **Збали**.

Студенти, що набрали суму балів за семестр 36 і більше (0.6 рейтингу за роботу протягом семестру) можуть скласти залік. Якщо семестровий рейтинг менше 30 балів потрібно додаткове опрацювання матеріалу з метою підвищення рейтингу (виконання необхідної кількості індивідуальних завдань).

Студенти отримують позитивні атестації у семестрі, якщо поточна сума набутих балів відповідає 0,5 і більше від максимально можливої кількості балів на момент проведення атестації.

Умовою допуску до заліку є написання ДКР, написання МКР та кількість рейтингових балів не менше 36. Максимальна сума балів, яку студент може набрати протягом семестру, складає **60 балів**:

$$RC = r_{\text{ДКР}} + r_{\text{МКР}} + r_{\text{ІЗ}} = 20 + 20 + 20 = 60 \text{ балів}$$

Залік

На заліку студенти виконують письмову роботу. Кожне завдання містить два теоретичні запитання (завдання) і два практичні. Перелік питань наведений у методичних рекомендаціях до засвоєння кредитного модуля. Кожне питання оцінюється у 10 балів. Максимально можна отримати **40 балів**.

Система оцінювання питання:

10-9 балів: «відмінно» – повна відповідь (не менше 90% потрібної інформації);

8-7 балів: «дуже добре» – достатньо повна відповідь (не менше 75% потрібної інформації, або незначні неточності);

6-5 балів: «добре» – неповна відповідь (не менше 60% потрібної інформації та деякі помилки);

4-3 балів: «задовільно» – неповна відповідь (не менше 35% потрібної інформації та деякі помилки);

2-0 балів: «незадовільно» – незадовільна відповідь

Таблиця відповідності рейтингових балів оцінкам за університетською шкалою:

Кількість балів	Оцінка
100-95	Відмінно
94-85	Дуже добре
84-75	Добре
74-65	Задовільно
64-60	Достатньо
Менше 60	Незадовільно
Не виконані умови допуску	Не допущено

8. Додаткова інформація з дисципліни (освітнього компонента)

Вимоги до оформлення домашньої контрольної роботи, перелік запитань до МКР, ДКР та заліку наведені у Google Classroom (платформа Sikorsky-distance). У випадку проходження дистанційних чи онлайн курсі за темою освітньої компоненти зараховуються сертифікати, отримані у неформальній освіті. Відповідність сертифікату програмі ОК визначає лектор. Загальна кількість перезарахованих годин не має перевищувати 25%.

Складено проф. каф. ОХ та ТОР, доктор хімічних наук, професор,
Фокін Андрій Артурович

Ухвалено: кафедрою органічної хімії і технології органічних речовин
(протокол № 13 від 08.06.2023)

Погоджено: Методичною комісією хіміко-технологічного факультету
(протокол № 9 від 25.05.2023)