



РЕТРОСИНТЕТИЧНИЙ АНАЛІЗ

Робоча програма навчальної дисципліни (Силабус)

- Реквізити навчальної дисципліни

Рівень освіти	вищої	<i>Другий</i>	<i>(магістерський)</i>
Галузь знань		<i>16 Хімічна та біоінженерія</i>	
Спеціальність		<i>161 Хімічні технології та інженерія</i>	
Освітня програма		<i>Хімічні технології та інженерія</i>	
Статус дисципліни		<i>Вибіркова</i>	
Форма навчання		<i>очна(денна)</i>	
Рік підготовки, семестр		<i>1 курс, весняний семестр</i>	
Обсяг дисципліни		<i>5 кредитів ЄКТС</i>	
Семестровий контроль/ контрольні заходи		<i>екзамен/ МКР/ДКР</i>	
Розклад занять		<i>Лекції 36 год., лабораторні 36 год., Самостійна робота 78 год.</i>	
Мова викладання		<i>Українська/Англійська</i>	
Інформація про керівника курсу / викладачів		<i>Лектор: доц., доц., к.х.н. . Бутова К.Д. ebutova@yahoo.com Лабораторні: доц., доц., к.х.н. Бутова К.Д. ebutova@yahoo.com</i>	
Розміщення курсу		<i>електронний кампус</i>	

- Програма навчальної дисципліни

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

Використовувати набуті знання з використанням ретросинтетичного аналізу є сучасним підходом при плануванні синтезу складних органічних молекул. При використанні ретросинтетичного аналізу можна вибрати найбільш оптимальний

метод отримання нових органічних речовин. Прогнозувати та розробляти сучасні підходи синтезу.

1.1. Мета навчальної дисципліни.

Метою навчальної дисципліни є формування у здобувачів вищої освіти рівня “магістр” здатностей:

- Здатність використовувати результати наукових досліджень і дослідно конструкторських розробок для вдосконалення існуючих та/або розробки нових технологій і обладнання хімічних виробництв (К10);
- Здатність ідентифікувати, аналізувати і з науково-обґрунтованою аргументацією планувати стратегію вирішення хіміко-технологічних проблем і задач виробництв органічних матеріалів, косметичних продуктів, харчових добавок (К15);
- Здатність використовувати сучасні методи досліджень, планувати і проводити наукові експерименти та вирішувати актуальні технічні задачі в галузі органічного синтезу (К16).

1.2. Основні завдання навчальної дисципліни.

Згідно з вимогами освітньо-професійної програми навчальної дисципліни здобувачі вищої освіти рівня “магістр” після засвоєння навчальної дисципліни мають продемонструвати такі результати навчання:

- Здійснювати пошук необхідної інформації з хімічної технології, процесів і обладнання виробництв хімічних речовин та матеріалів на їх основі, систематизувати, аналізувати та оцінювати відповідну інформацію (ПР 2);
- Вміти використовуючи наукові знання синтезу органічних речовин, в умовах лабораторії або виробництва, для визначення даних до технічного завдання сформулювати мету виконання дослідження (створення нового об’єкту, напрямку вдосконалення існуючого, визначення або прогнозування ключових параметрів і властивостей системи та ін. (ПР12).

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

Міждисциплінарні зв’язки: Матеріал кредитного модуля базується на знаннях, одержаних здобувачами вищої освіти рівня “магістр” при вивченні такої дисципліни: «Іноваційні хімічні технології органічних матеріалів. Частина 1. Функціональні матеріали та наносистеми», численних лабораторних практикумах і є завершальним у циклі професійної і практичної підготовки та буде використаний у підготовці магістерської дисертації.

3. Зміст навчальної дисципліни

Назви розділів і тем	Кількість годин	
		у тому числі

	Всього	Лекції	Практичні (семінарські)	Лабораторні роботи	СРС
1	2	3	4	5	6
Розділ 1. Стратегія і тактика органічного синтезу					
<i>Тема 1. Повний органічний синтез</i>	12	2		2	8
<i>Тема 2. Ретросинтетичний аналіз</i>	32	12		12	8
<i>Контрольна робота 1</i>	4				4
Разом за розділом 1	48	14		14	20
Розділ 2. Захист функціональних груп					
<i>Тема 1. Захист гідроксильної та карбонільної групи</i>	12	2		2	8
<i>Тема 2. Захист карбоксильної групи, амінів та алкінів</i>	12	2		2	8
<i>Контрольна робота 2</i>	4				4
Разом за розділом 2	28	4		4	20
Розділ 3. Синтез молекул					
<i>Тема 1. Синтез молекул з функціональними групами</i>	20	12		12	6
<i>Тема 2. Синтез циклічних молекул</i>	13	2		2	9
<i>Тема 3. Синтез оптично-активних сполук</i>	17	4		4	9
<i>Контрольна робота 3</i>	4				4
<i>екзамен</i>	10				10
Разом за розділом 3	64	18		18	38
Всього годин	150	36		36	78

4. Навчальні матеріали та ресурси

1. The Logic of Chemical synthesis, E.J.Corey and Xeu-Min Chelg, Department of Chemistry Harvard University, Cambridge, Massachusetts, 462 p.
2. Modern Organic Synthesis: An Introduction. George S. Zweifel, Michael H. Nantz, University of California, 2006, 486 p.
3. Introduction to strategies for organic synthesis. Laurie S.Starkey. California State Polytechnic University, Pomona, 2012, 360 p.
4. Element of Synthesis Planning. R.W.Hoffmann, Phillips Universitat Marbyrg FB Chemie, Germany, 2009, 827 p.
5. Classics in total Synthesis. K.C.Nicolaou, E.J.Sorensen, 1996, 827 p.

1. Методика опанування навчальної дисципліни (освітнього компонента)

Вичитування лекцій з дисципліни проводиться паралельно з виконанням здобувачами вищої освіти рівня “магістр” практичних робіт та розглядом ними питань, що виносяться на самостійну роботу. При читанні лекцій застосовуються засоби для відео конференцій Zoom та ілюстративний матеріал у вигляді презентацій, які розміщені на платформі Sikorsky-distance. Після кожної лекції рекомендується ознайомитись з матеріалами, рекомендованими для самостійного вивчення.

2. Лекційні заняття

№ з/п	Назва теми лекції та перелік основних питань (перелік дидактичних засобів, посилання на літературу та завдання на СРС)
Розділ 1. Стратегія і тактика органічного синтезу	
<i>Тема 1 – Повний органічний синтез</i>	
1	Вступ. Цілі та задачі органічного синтезу. Перспективи розвитку. Видатні вчені органічного синтезу. Огляд історії розвитку органічного синтезу. <i>Література [5, с. 98-165; 4; 16].</i>
<i>Тема 2 – Ретросинтетичний аналіз</i>	
2	Стратегія синтезу. Лінійний та конвергентний підхід до планування синтезу. Органічні реакції та синтетичні методи. <i>Література [5, ст. 203–206; 13, ст. 122–131; 8; 18].</i> СРС: Розробка нових синтетичних методів: реакції кросс - з'єднання. <i>Література [16, ст. 127–130; 5].</i>
3	Ретросинтетичний аналіз. Основи концепції. Синтони та синтетичні еквіваленти. <i>Література [16, ст. 115–127, 3; 7]</i>
4	Електронний вплив функціональних груп на вуглецевий атом. <i>Література [16, ст. 135–154, 3; 8; 18].</i> СРС: Синтони d2 та d4 типу та їхні синтетичні еквіваленти. <i>Література [16, ст. 128–129; ст. 146-154; 18].</i>
5	Нуклеофіли та електрофіли. <i>Література [16, ст. 155–164, 9; 12].</i>
6	Тактика синтезу. Формування вуглецевого скелету. Взаємоперетворення функціональних груп. <i>Література [10, ст. 73–129].</i> СРС: Нелогічний розрив зв'язку. <i>Література [10, ст. 136–174].</i>
7	Окисники та відновники. <i>Література [10, ст. 73–129].</i>
Розділ 2. Захист функціональних груп	

<i>Тема 1 – Захист гідроксильної та карбонільної функціональних груп</i>	
8	<p>Захист гідроксильної та карбонільної функціональної групи.</p> <p><i>Література</i> [6, ст. 34–55, ст. 188–201, 4].</p> <p><i>СРС:</i> Умови відновлення функціональних груп.</p> <p><i>Література</i> [6, ст. 164–180, 4].</p>
<i>Тема 2 – Захист карбонових кислот, амінів та алкінів</i>	
9	<p>Захист карбонових кислот, амінів та алкінів.</p> <p><i>Література</i> [1, с. 6-17; 3, с. 85-100, 7, с. 224-227].</p> <p><i>СРС:</i> Умови відновлення функціональних груп.</p> <p><i>Література</i> [13, с. 89-99].</p>
Розділ 3. Синтез монофункціональних молекул	
<i>Тема 1 – Синтез молекул з функціональними групами</i>	
10	<p>Синтез тіолів, тіоефірів, карбонільних сполук, спиртів, галогенпохідних, етерів</p> <p><i>Література</i> [3, с. 60-89, с. 82-141].</p> <p><i>СРС:</i> Синтез ароматичних сполук.</p> <p><i>Література</i> [3, с. 84-113].</p>
11	<p>Синтез амінів, анілінів</p> <p><i>Література</i> [3, с. 100-115, с. 152-162].</p>
12	<p>Синтез алкенів, алкінів, алканів</p> <p><i>Література</i> [3, с. 116-125, с. 162-171].</p>
13	<p>Синтез карбонових кислот та їхніх похідних</p> <p><i>Література</i> [3, с. 126-135, с. 172-184].</p>
14	<p>Синтез карбонільних сполук</p> <p><i>Література</i> [3, с. 136-144, с. 185-191].</p>
15	<p>Синтез спиртів, галогенпохідних, етерів</p> <p><i>Література</i> [3, с. 145-155, с. 192-214].</p>
<i>Тема 2 - Синтез циклічних молекул</i>	
16	<p>Сучасні методи синтезу циклічних молекул: трьох-, чотирьох-, п'яти- та шестичленних циклів.</p> <p><i>Література</i> [3, с.156-189, с. 215-241].</p> <p><i>СРС:</i> Синтез великих циклів.</p> <p><i>Література</i> [3, с. 284-313].</p>
<i>Тема 3 – Синтез оптично-активних сполук</i>	
17	<p>Передбачення та контроль стереохімії. Нуклеофільне заміщення SN 2; реакції елемінування E2. Каталитичне гидрування алкінів (цис-). Відновлення ацетиленідів (транс-). Окислення алкенів OsO₂. Приєднання до ненасичених сполук.</p> <p><i>Література</i> [3, с. 190-209, с. 217-241].</p>

18	<p>Реакції з боргїдрїдами. Епоксїдування алкенїв, розкриття епоксїдних циклїв. Циклопропанування.</p> <p><i>Лїтература [3, с. 210-223].</i></p>
----	---

3. Лабораторнї заняття

Лабораторнї роботи мають на метї навчити здобувачїв вищої освїти рївня “магїстр” самостїйно синтезувати органїчну речовину, видїлити її у їндивїдуальному виглядї та охарактеризувати сучасними методами ї довести її будову. При цьому студенти мають навчитися:

- проводити глибоке очищення та абсолутацію органїчних розчинникїв;
- видалення залишкїв оксигену їз органїчних розчинникїв;
- зберїгати особливо чистї органїчнї розчинники;
- синтезувати *трет*-бутилїтїю;
- приготувати К-На-сплав;
- гїдрувати на каталїзаторах Адамса та нїкелї Реннея;
- робота у ампулах в органїчному синтезї;
- робота з автоклавом в органїчному синтезї;
- проведення фотохїмїчних реакцїй у фотореакторї;
- робота їз глибоким вакуумом;
- методи екстракцїї у системї рїдина- тверда речовина.

Перелїк можливих синтезїв сполук для закрїплення лабораторних навикїв здобувачїв вищої освїти рївня “магїстр” :

1. Бромування адамантану. Одержання 1-бромадамантану .
2. Карбоксилування 1-бромадамантану. Одержання 1-адамантанкарбоно вої кислоти.
3. Етерифїкація 1-адамантанкарбонової кислоти. Одержання метилового етеру 1-адамантанкарбонової кислоти.
4. Вїдновлення метилового етеру 1-адамантанкарбонової кислоти. Одержання 1-гїдроксиметиладамантану.
5. Замїна гїдроксильної групи 1-гїдроксиметиладамантану на бром. Одержання 1-бромметиладамантану.
6. Бромування 1-бромметиладамантану.
7. Одержання 1-бром-3-бромметилада мангану.
8. Фрагментація 1-бром-3-бромметил-адамантану.
9. Одержання 3,7-диметилєнбїцикло[3.3.1]нонану.
10. Каталїтичне бромування адамантану. Одержання 1,3-дїбромадамантану.
11. Фрагментація 1,3-дїбромадамантану. Одержання 3-метилєн-бїцикло[3.3.1]нонан-7-ону.
12. Гїдролїз 1-бромадамантану. Одержання 1-гїдроксиадамантану

2. Самостїйна робота здобувачїв вищої освїти рївня «магїстр»

<i>Вид СРС</i>	<i>Кількість годин на підготовку</i>
<i>Підготовка до лабораторних робіт: повторення лекційного матеріалу, вивчення розділів курсу, які заплановані для самостійного опрацювання.</i>	<i>51 година</i>
<i>Підготовка до МКР</i>	<i>12 годин</i>
<i>Написання ДКР</i>	<i>15 годин</i>
<i>Підготовка до екзамену</i>	<i>10 годин</i>

- Політика та контроль

3. Політика навчальної дисципліни (освітнього компонента)

У звичайному режимі роботи університету лекції та лабораторні заняття проводяться в навчальних аудиторіях. У змішаному режимі лекційні заняття проводяться через платформу дистанційного навчання Сікорський, лабораторні заняття – у форматі відеоконференції Zoom. У дистанційному режимі всі заняття проводяться через платформу дистанційного навчання Сікорський, у форматі відеоконференцій Zoom. Відвідування лекцій та лабораторних занять є обов'язковим.

На початку кожної лекції проводиться 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 та підвищення зацікавленості.

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.

4. Види контролю та рейтингова система оцінювання результатів навчання (РСО)

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

1. Семестровий контроль: залік

Для перевірки засвоєння студентами знань, отриманих при прослуховуванні лекцій та при самостійній роботі у відповідності до учбового плану проводиться 3 контрольні роботи протягом всього семестру. Завдання контрольних робіт носять переважно практичний характер. Контрольні роботи проводиться за всіма темами кредитного модуля.

Рейтинг студента з кредитного модуля складається з балів, отриманих за:

- 1) Виконання та захист 3-х контрольних робіт (МКР);*
- 2) Домашня контрольна роботи;*
- 3) Лабораторного практикуму;*
- 4) Написання письмової залікової роботи.*

1. Контрольні роботи

Ваговий бал – 10. Максимальна кількість балів за всі роботи дорівнює $10 \text{ балів} \times 3 = 30$ балів. Рейтингові бали кожної роботи складаються з балів за виконання завдання роботи.

Критерії оцінювання контрольної роботи:

10-9 балів: «*відмінно*» – безпомилкове вирішення усіх завдань при наявності елементів продуктивного творчого підходу; демонстрація вміння впевненого застосування фундаментальних знань з органічної хімії при вирішенні контрольних завдань;

8-6 балів: «*добре*» – вирішення усіх завдань з незначними, неprincipовими 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;

5-4 балів: «*задовільно*» – вирішення усіх розрахункових вправ з двома – трьома досить суттєвими помилками; наявність суттєвих зауважень до теоретичних викладок, помилки у формулах;

3 балів: «*достатньо*» – вірне вирішення розрахункових вправ (але не менше 50 %); наявність принципів помилок у відповідях.

2- 0 балів: відповідь принципово невірна або відсутня.

2. Домашня контрольна робота

Кількість завдань цього виду – 1.

Модульна контрольна робота оцінюється в 20 балів.

Критерії оцінювання модульної контрольної роботи:

20-19 балів: «*відмінно*» – безпомилкове вирішення усіх завдань при наявності елементів продуктивного творчого підходу; демонстрація вміння впевненого застосування фундаментальних знань з органічної хімії при вирішенні контрольних завдань;

18-16 балів: «*добре*» – вирішення усіх завдань з незначними, неprincipовими 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;

15-10 балів: «*задовільно*» – вирішення усіх розрахункових вправ з двома – трьома досить суттєвими помилками; наявність суттєвих зауважень до теоретичних викладок, помилки у формулах;

9-5 балів: «*достатньо*» – вірне вирішення розрахункових вправ (але не менше 50 %); наявність принципів помилок у відповідях.

4- 0 балів: відповідь принципово невірна або відсутня.

1. Лабораторна робота:

Ваговий бал – 4, всього 5 лабораторних робіт. Максимальна кількість балів на всіх лабораторних роботах дорівнює 20 балів.

Критерії оцінювання:

4 бали: Гарна робота, правильно оформлений протокол роботи 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;

3 бали: Незначні помилки при виконанні лабораторної роботи або неправильно оформлений протокол та вирішення усіх завдань під час захисту роботи з незначними, неprincipовими 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;

2 бали: Значні помилки при виконанні лабораторної роботи або неправильно оформлений протокол та під час захисту роботи вірне вирішення розрахункових вправ (але не менше 50 %); наявність принципових помилок у відповідях;

0 балів: Не виконання лабораторної роботи.

У разі недопущення до лабораторної роботи у зв'язку з незадовільним вхідним контролем (відсутність протоколу та написаних в ньому реакцій і розрахунків) нараховується штрафний (-1) бал.

ШТРАФНІ ТА ЗАОХОЧУВАЛЬНІ БАЛИ

Студенти, що набрали суму балів за семестр 42 і більше (0.6 рейтингу за роботу протягом семестру) можуть складати залік. Якщо семестровий рейтинг менше 42 бали потрібно додаткове опрацювання матеріалу з метою підвищення рейтингу (виконання необхідної кількості індивідуальних завдань).

Розрахунок шкали рейтингової оцінки з кредитного модуля:

Максимальна сума балів протягом семестру складає:

$$R_{\max} = 70 + 30 = 100 \text{ балів}$$

Попередня рейтингова оцінка має бути не менше 42 балів.

Контрольні роботи – 30 балів.

МКР – 20 балів.

Лабораторні роботи - 20 балів

За семестр студент може набрати $30+20+20= 70$ балів.

0,6 від рейтингу становить 42 балів.

Тоді на екзамен – 30 балів.

3. Екзамен

На екзамені студенти виконують письмову роботу. Кожне завдання містить одне теоретичне питання і два практичних. Перелік питань наведений у методичних рекомендаціях до засвоєння кредитного модуля. Кожне питання оцінюється у 10 балів, всього максимально 30 балів.

Система оцінювання кожного питання:

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

8 - 6 бали: «*добре*» – достатньо повна відповідь (не менше 75% потрібної інформації, або незначні неточності);

5 - 4 бали: «*задовільно*» – неповна відповідь (не менше 60% потрібної інформації та деякі помилки);

3 - 0 балів: «*незадовільно*» – незадовільна відповідь.

Таблиця відповідності рейтингових балів оцінкам за університетською шкалою:

<i>Кількість балів</i>	<i>Оцінка</i>
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

4 Додаткова інформація з дисципліни (освітнього компонента)

- *Перелік запитань до МКР, завдань до ДКР та екзамену наведені у електронному кампусі*

Складено: доцентом кафедри органічної хімії та технології органічних речовин, доц., к.х.н. Бутовою К.Д.

Ухвалено: кафедрою органічної хімії і технології органічних речовин (протокол № 14 від 23.06.2024)

Погоджено: Методичною комісією хіміко-технологічного факультету (протокол № 10 від 21.06.2024)