



Реакційні інтермедіати в органічному синтезі

Робоча програма навчальної дисципліни (Силабус)

Реквізити навчальної дисципліни

Рівень вищої освіти *Другий (магістерський)*

Галузь знань	16 Хімічна 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

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.

1.1. Мета навчальної дисципліни.

Метою навчальної дисципліни є формування у студентів здатностей:

- Здатність до пошуку, оброблення та аналізу інформації з різних джерел
- (К 3);
- Здатність вести професійну, у тому числі науково-дослідну діяльність у міжнародному середовищі (К 6)
- Здатність використовувати сучасне спеціальне наукове обладнання та програмне забезпечення при проведенні експериментальних досліджень і здійсненні дослідно-конструкторських розробок у сфері хімічних технологій та інженерії (К 11)
- Здатність використовувати сучасні програми квантово-хімічних обчислень для оптимізації хіміко-технологічних процесів, для обробки та інтерпретації результатів хімічних експериментів тому числі з органічного синтезу (К12);
- Здатність ідентифікувати, аналізувати і з науково-обґрунтованою аргументацією планувати стратегію вирішення хіміко-технологічних проблем і задач виробництва 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 студенти після засвоєння навчальної дисципліни мають продемонструвати такі результати навчання:

- Критично осмислювати наукові концепції та сучасні теорії хімічних процесів та хімічної інженерії, застосовувати їх при проведенні наукових досліджень та створенні інновацій (ПР 1);
- Здійснювати у науково-технічній літературі, патентах, базах даних, інших джерелах пошук необхідної інформації з хімічної технології, процесів і обладнання виробництва хімічних речовин та матеріалів на їх основі, систематизувати, і аналізувати та

оцінювати відповідну інформацію (ПР 7);

- Знання сучасних методів дослідження, приладів та обладнань, програмного забезпечення в галузі технологій органічних продуктів (ПР 8);

- 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, напрямок вдосконалення існуючого, визначення або прогнозування ключових параметрів 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 надисциплінах «Органічна хімія», «Механізми органічних реакцій», «Хімія елементорганічних 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 – катион-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, гіперконюгація, метонієвий карбокатион, приклади стабільних карбокатионів, проблема норборнільного 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, сольволиз та гетероліз, реакції елімінування.

Тема 6. Радикали, будова та природа стабілізації.

Класифікація радикалів, електронні та стерічні 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 стерічні ефекти, гіперконюгація, приклади стабільних карбаніонів, ароматичні карбаніони.

Тема 10. Методи генерації карбаніонів.

Депротонування, 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, квартетній вуглець.

Тема 13. Методи генерації карбенів.

Межфазно-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 ітогів.

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.

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.

Додаткова:

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

Навчальний контент

5. Методика опанування навчальної дисципліни (освітнього компонента)

Лекційні заняття

Вичитування лекцій з дисципліни проводиться паралельно з виконанням студентами індивідуальних завдань та розглядом питань, що виносяться на самостійну роботу. При читанні лекцій у змішаному навчанні застосовуються засоби для відеоконференцій (Google Meet, Zoom тощо) та ілюстративний матеріал у вигляді презентацій, які передаються 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. Катион-радикали, будова, природа стабілізації, стійкість.

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

Лекція 17. Інші види реакційних інтермедіатів

Лекція 18. Підведення ітогів.

Практичні заняття

Практичні роботимають на меті навчити студентів самостійно оцінювати роль реакційних інтермедіатів в конкретній 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

Самостійна робота студента (СРС) протягом семестру включає повторення лекційного матеріалу, освоєння теоретичного матеріалу винесеного на самостійне самоопрацювання, виконання домашньої контрольної роботи, підготовка до написання модульної контрольної роботи до екзамену. Рекомендована кількість годин, яка відводиться на підготовку до зазначених видів робіт:

Вид СРС, Кількість годин на підготовку

Підготовка до аудиторних занять: повторення лекційного матеріалу, складання попередніх варіантів програм для проведення розрахунків на заняттях, оформлення звітів 1 – 2 години на тиждень

Виконання домашньої контрольної роботи 30 годин

Підготовка до МКР (повторення матеріалу) 6 годин

Підготовка до екзамену 30 годин

Політика та контроль

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 надіслати 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)

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

1. Поточний контроль: опитування на практичних заняттях, МКР.
2. Календарний контроль: проводиться двічі на семестр як моніторинг поточного стану виконання вимогсилабусу.
3. Семестровий контроль: письмовий екзамен.

Рейтингова система оцінювання результатів навчання

1. Рейтинг студента з кредитного модуля розраховується виходячи із 100-бальної шкали, з них 50 балів складає стартова шкала. Стартовий рейтинг (протягом семестру) складається з балів, що студент отримує за:

- Виконання індивідуальних завдань (7 тем занять);
- написання модульної контрольної роботи (МКР);

2. Критерії нарахування балів:

- 2.1. Практична робота:

- Ваговий бал – 3. Максимальна кількість балів на усіх роботах дорівнює 15 балів.

- Критерії оцінювання:

- 3 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;
- 2 бали: Незначні помилки при виконанні або неправильно оформлена відповідь та вирішення усіх завдань під час захисту роботи з незначними, не принциповими 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;

- 1 бал: Незначні помилки або неправильно оформлений протокол та під час захисту роботи вірне вирішення розрахункових вправ (але не менше 50 %); наявність принципових помилок у відповідях
- 0 балів: Робота не виконана або незахищена;

2.2. Модульна контрольна робота

- Кількість завдань цього виду – 1.
- Модульна контрольна робота оцінюється в 25 балів.
- **Критерії оцінювання модульної контрольної роботи:**
21-25 балів: «відмінно» – повна відповідь (не менше 90% потрібної інформації);
15-20 балів: «дуже добре» – достатньо повна відповідь (не менше 75% потрібної інформації, або незначні неточності);
10-14 балів: «добре» – неповна відповідь (не менше 60% потрібної інформації та деякі помилки);
5-9 балів: «задовільно» – неповна відповідь (не менше 35% потрібної інформації та деякі помилки);
 0-5 балів: «незадовільно» – незадовільна відповідь

2.3. Розрахунково-графічна робота

Кількість завдань цього виду – 1.

Розрахунково-графічна робота у вигляді індивідуального завдання: *дослідницької пропозиції (Research Proposal)* оцінюється в 20 балів.

Критерії оцінювання розрахунково-графічної роботи:

- 20 балів: «відмінно» – виконані всі вимоги до роботи, в тому числі дата здачі 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 - 3 бали.
- Студенти, що набрали суму балів за семестр 36 і більше (0.6 рейтингу за роботу протягом семестру) можуть скласти екзамен. 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 набраних балів відповідає 0,5 і більше від максимально можливої кількості балів на момент проведення атестації.

Залік

На заліку студенти виконують письмову роботу. Кожне завдання містить одне теоретичне запитання (завдання) і одно практичне. Перелік питань наведений у методичних рекомендаціях до засвоєння кредитного модуля. Кожне питання оцінюється у 15 балів.

Система оцінювання теоретичного питання:

13.5-15 балів: «відмінно» – повна відповідь (не менше 90% потрібної інформації);

10-13 балів: «дуже добре» – достатньо повна відповідь (не менше 75% потрібної інформації, або незначні неточності);

7-9.5 балів: «добре» – неповна відповідь (не менше 60% потрібної інформації та деякі помилки);

5-6 балів: «задовільно» – неповна відповідь (не менше 35% потрібної інформації та деякі помилки);

0-5 балів: «незадовільно» – незадовільна відповідь

Максимальна сума балів, яку студент може набрати протягом семестру, складає 60 балів:

$$RC = r_{\text{пр}} + r_{\text{мкр}} + r_{\text{із}} = 15+25+ 20+20 = 60 \text{ балів}$$

Умовою допуску до екзамену є зарахування всіх комп'ютерних практикумів, написання МКР та кількість рейтингових балів не менше 30.

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 «Органічна хімія чистих виробництв» (платформа Sikorsky-distance).

9. Додаткова інформація з дисципліни (освітнього компонента)

Перелік питань до МКР та екзамену наведені у Електронному кампусі. У випадку проходження дистанційних чи онлайн курсів 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)