

НАЦІОНАЛЬНИЙ ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ УКРАЇНИ
“КИЇВСЬКИЙ ПОЛІТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ”
Кафедра органічної хімії та технології органічних речовин

“ЗАТВЕРДЖУЮ”

Декан ХТФ

_____ І.М.Астрелін

“ ___ ” _____ 2013 р.

РОБОЧА НАВЧАЛЬНА ПРОГРАМА КРЕДИТНОГО МОДУЛЯ

**“ Кінетика і термодинаміка процесів основного органічного та
нафтохімічного синтезу ”**

_____ (назва та код кредитного модуля)

Для студентів освітньо-кваліфікаційного рівня магістр
напряму підготовки 8.05130102 «Хімічні технології органічних речовин»

_____ (шифри та назви напрямів, спеціальностей)

_____ денна

(форма навчання)

Програму рекомендовано
кафедрою органічної хімії
та технології органічних речовин
Протокол № 9
від “ 30 ” 05 2013 року

Завідувач кафедри

_____ А.А.Фокін

Київ-2012

1. Загальні відомості.

“Кінетика і термодинаміка процесів основного органічного та нафтохімічного синтезу” – ключова дисципліна, яка разом з іншими дисциплінами складає технологічний цикл підготовки з даного напрямку. Органічна хімія та технологія органічних речовин широко використовує кінетичні та термодинамічні дані про перебіг процесів. Дисципліна “Кінетика і термодинаміка процесів основного органічного та нафтохімічного синтезу” має на меті ознайомити студентів з детальними розрахунками кінетичних і термодинамічних параметрів органічних речовин і прищепити навички використання цих методів в практичній роботі. Фундаментальні знання і вміння, набуті студентами під час вивчення дисципліни, застосовуються у дисциплінах Хімія і технологія органічних речовин, Інструментальні методи хімічного аналізу, Спектральні методи дослідження органічних сполук, "Фізична хімія", "Механізми органічних реакцій", "Фотохімія", "Фізика" та численних лабораторних практикумах та бакалаврському дипломному проекті.

Робоча навчальна програма кредитного модуля складена на основі Освітньо-професійної програми вищої освіти за напрямом Хімічні технології органічних речовин (магістр). Викладання кредитного модулю заплановано на 9 семестр.

Навчальний матеріал дисципліни базується на знаннях, одержаних студентами при вивченні таких дисциплін, як *Загальна та неорганічна хімія, Органічна хімія, Додаткові розділи органічної хімії, Спецрозділи органічної хімії, Аналітична хімія* тощо.

Відповідно до структурно-логічної схеми з вказаного напрямку набути студентом компетенції, повинні також знайти своє відображення у відповідному розділі експериментальної частини дипломного проекту.

2. Розподіл навчального часу

Семестр	Всього Кред/год	Розподіл за семестрами та видами занять						Вид. семестр атест.
		Лекц.	Практ.	Семін.	Лабор.	Контр. роб.	СРС	
9	7/252	36	-	-	72	9	144	Екз.

3. Мета і завдання дисципліни.

МЕТА вивчення дисципліни полягає у формуванні у студентів системи здатностей, необхідних для вирішення типових завдань при розрахунках нових хіміко-технологічних процесів, і навчити майбутніх фахівців основам добування кількісних характеристик органічних перетворень. Дисципліна “Кінетика і термодинаміка процесів основного органічного та нафтохімічного синтезу” викладається згідно учбового плану підготовки магістрів і спеціалістів призначена для поглибленого вивчення енергетичних характеристик органічних реакцій майбутніми науковцями і інженерами-технологами.

Кінетичні і термодинамічні дані про органічні реакції є ключовими при розробці хіміко-технологічних процесів, конструювання і розміщення обладнання

Після вивчення курсу студент повинен знати:

- основи загальнотеоретичних дисциплін в об'ємі, необхідному для вирішення практичних завдань;
- основні методи розрахунку швидкості протікання органічних реакцій;

Після вивчення курсу студент повинен вміти:

- обирати релевантну кінетичну модель складної органічної реакції;
- осознанно использовать эмпирические кинетические модели;
- интерпретировать детали превращений на основе кинетических и термодимических данных
- подбирать наиболее оптимальные условия для проведения органических реакций.
-

4. ТЕМАТИЧНИЙ ПЛАН

4.1. РОЗПОДІЛ НАВЧАЛЬНОГО ЧАСУ ЗА ТЕМАМИ

Найменування розділів, тем	Розподіл за семестрами та видами занять			
	Лекції	Практ.	Лабор.	СРС
1	2	3	4	
Розділ 1. Реакционный среды				
Тема 1. Реакционный среды. Диэлектрическая проницаемость среды. Ее зависимость от свойств растворителя. Способ экспериментального определения.	2			10
Тема 2. Взаимодействие зарядов в среде. Свободная энергия электростатического поля при взаимодействии ионов. Влияние диэлектрической проницаемости среды на диполь-ионное и диполь-дипольное взаимодействие	2		8	10
Тема 3. Свободная энергия. Принцип линейности свободных энергий как следствие теоремы Эйлера об однородности функций. Изокинетическая температура. Ее интерпретация. Соотношения между изменениями ΔE_a и $\Delta \Delta G$.	2		8	15
Тема 4. Эмпирические корреляции в органической химии. Полилинейное разложение неявных функций: использование в корреляционном анализе.	2		8	15
Розділ 2. Эмпирические корреляции				
Тема 5. Электронные эффекты. Эффект гиперконъюгации. Варианты его проявления. Выделение как отдельного компонента свободной энергии.	2		8	10
Тема 6. Уравнению Гаммета. Уравнение Гаммета как следствие принципа ЛСЭ. Химический смысл ρ и σ . Индуктивный эффект заместителя. Методы экспериментального определения. Затухание индуктивного эффекта. Его оценка с помощью уравнения Гаммета. Уравнение Юкаво-Цуно как обобщенное уравнение Гаммета.	2		8	10

Тема 7. Уравнение Тафта. Согласование шкал σ . Уравнение Тафта. Эффект сквозного сопряжения. Шкалирование эффектов сквозного сопряжения с помощью уравнения Тафта.	2		4	10
Тема 8. Стерические эффекты. Природа пространственных эффектов заместителей. Шкалы стерического эффекта.	2			10
Тема 9. Влияние заместителя. Вторичный эффект сопряжения. Его учет при разделении эффектов заместителей на индуктивную и резонансную составляющие. Модель Экснера. Уравнение Свена-Лаптона.	2		8	10
Тема 10. Влияние растворителя. Уравнение Грюнвальда-Уинстейна. Его достоинства и применения. Сольватохромные эффекты. Параметры растворителей Косовера и Димрота-Рейхарда. Донорно-акцепторные шкалы Гутмана. Уравнение Свена как общий подход к классификации реакций нуклеофильного замещения.	2		8	10
Тема 11. Кислотно-основный катализ. Уравнение Бренстеда. Области применения. Общий и специфический кислотный и основной катализ. Функции кислотности. Экспериментальный метод их построения и области применения.	2			10
Розділ 3. Неэмпірическая кінетика і термодинаміка				
Тема 12. Кинетика сложных органических реакций. Теория активированного комплекса и ее связь с топологией ППЭ. Реакции с предравновесием. Кинетика Михаэлиса-Ментен.	4		8	10
Тема 12. Макроэнергетика химических реакций Связь топологии ППЭ с термодинамическими параметрами химических реакций.	2			10
Тема 13. Температурная зависимость скорости органических реакций. Температурная зависимость скорости химической реакции классический и статистический подходы.. Реакции с отрицательным температурным коэффициентом.	2		4	4
Тема 14. Термодинамика органических реакций. Термодинамические параметры, их вычисление. Равновесий реакции. Термодинамические характеристики сложных органических реакций. Калориметрия.	2			
Всего	36		72	144

4.2 Лекції.

Лекція 1. Реакційний середовище.

Лекція 2. Взаємодія зарядів в середовищі.

- Лекція 3. Свободная энергия.
 Лекція 4. Эмпирические корреляции в органической химии.
 Лекція 5. Электронные эффекты.
 Лекція 6. Уравнениу Гаммета.
 Лекція 7. Уравнение Тафта.
 Лекція 8. Стерические эффекты.
 Лекція 9. Влияние заместителя.
 Лекція 10. Влияние растворителя.
 Лекція 11. Кислотно-основный катализ.
 Лекція 12. Кинетика сложных органических реакций.
 Лекція 13. Температурная зависимость скорости органических реакций.
 Лекція 14. Термодинамика органических реакций.

4.3. Лабораторні роботи.

Лабораторні роботи мають на меті навчити студентів самостійно синтезувати органічну речовину, виділити її у індивідуальному вигляді та охарактеризувати сучасними методами і довести її будову. При цьому студенти мають навчитися:

- проводити глибоке очищення та абсолютацію органічних розчинників;
- видалення залишків кисню із органічних розчинників;
- зберігати особливо чисті органічні розчинники;
- синтезувати *трет*-бутиллітію;
- приготувати К-На-сплав;
- гідрувати на катализаторах Адамса та нікелі Реннея;
- робота у ампулах в органічному синтезі;
- робота з автоклавом в органічному синтезі;
- проведення фотохімічних реакцій у фотореакторі;
- робота із глибоким вакуумом;
- методи екстракції у системі рідина- тверда речовина.

Перелік можливих синтезів сполук для закріплення лабораторних навиків студентів [1-3]:

1. Бромовання адамантану. Одержання 1-бромадамантану.
2. Карбоксилування 1-бромадамантану. Одержання 1-адамантанкарбонової кислоти.
3. Етерифікація 1-адамантанкарбонової кислоти. Одержання метилового етеру 1-адамантанкарбонової кислоти.
4. Відновлення метилового етеру 1-адамантанкарбонової кислоти. Одержання 1-гідроксиметиладамантану.
5. Заміна гідроксильної групи 1-гідроксиметиладамантану на бром. Одержання 1-бромметиладамантану.
6. Бромовання 1-бромметиладамантану. Одержання 1-бром-3-бромметиладамантану.
7. Фрагментація 1-бром-3-бромметил-адамантану. Одержання 3,7-диметилен-біцикло[3.3.1]нонану.
8. Каталітичне бромовання адамантану. Одержання 1,3-дибромадамантану.
9. Фрагментація 1,3-дибромадамантану. Одержання 3-метилен-біцикло[3.3.1]нонан-7-ону.
10. Гідроліз 1-бромадамантану. Одержання 1-гідроксиадамантану.
11. Окислення 1-гідроксиадамантану. Одержання адамантанону.

12. Одержання 3-бромадамантан-1-карбонової кислоти.
13. Одержання хлорангідриду 3-бромадамантан-1-карбонової кислоти
14. Одержання фенил-(3-бромадамантил-1)кетону.
15. Одержання фенил-(3-бромадамантил-1)карбінолу.
16. Одержання фенил-(3-бромадамантил-1)бромметану.
17. Одержання 3-метилен-7-бензиліденбцикло[3.3.1]нонану.
18. Одержання метил-(3-гідроксиадамантил-1)кетону.
19. Відновлення метил-(3-гідроксиадамантил-1)кетону.
20. Одержання 1-бром- 1-(3-гідроксиадамантил- 1)етану.
21. Одержання 3-метилен-7-етеліденбцикло[3.3.1]нонану.
22. Одержання 1-адамантилетилкетону.
23. Одержання (адамантил-1)метилкетону.

8. КОНТРОЛЬНІ РОБОТИ

Курсом передбачено проведення двох контрольних робіт. Перша з них проводиться по завершенню розділу 1 з хімічного аналізу органічних речовин. Білет складається з трьох комплексних задач. Друга контрольна робота проводиться по завершенню розділу 2. Білет складається з чотирьох питань: два питання зі змісту тем 2.1-2.3, та два наступні питання – 2.4 та 2.5. Результати контрольних робіт є підставою для рубіжної атестації студентів

9. Методичні вказівки

З метою забезпечення наочності викладання матеріалу на лекційних та практичних заняттях доцільно застосовувати дидактичний матеріал, підготовлений у середовищі Microsoft Power Point; довідкові матеріали розташовуються на сайті кафедри ОХ та ТОР або у бібліотеці кафедри.

10. Навчально-методичні матеріали.

ОСНОВНА ЛІТЕРАТУРА

1. И. Шмидт, Е. Сапунов. Неформальная кинетика. “Химия”, 1983
2. В. А. Пальм. Основы количественной теории органических реакций. “Химия», 1977
3. Бенсон С. Термохимическая кинетика. "Мир" Москва 1971, 308 стр.

ДОДАТКОВА ЛІТЕРАТУРА

- 1 Grimme, G.; Mück-Lichtenfeld, C.; Erker, G.; Kehr, G.; Wang, H.; Beckers, H.; Willner, H. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2009**, *48*, 2592–2595.
- 2 Bersuker, I. V. *Chem. Rev.* **2001**, *101*, 1067-1114.
- 3 Burns, L. A.; Vazquez-Mayagoitia, A.; Sumpter, B. G.; Sherrill, C. D. *J. Chem. Phys.* **2011**, *134*, 084107(25p).
- 4 Curtiss, L. A.; Raghavachari, K.; Redfern, P. C.; Pople, J. A. *J. Chem. Phys.* **1997**, *106*, 1063-1079.

Робоча навчальна програма складена на основі навчальної програми дисципліни «Кінетика і термодинаміка процесів основного органічного та нафтохімічного синтезу», затвердженої деканом ХТФ , протокол № 9 від 30 травня 2012 року.

Розробник програми: професор кафедри органічної хімії та технології органічних речовин хіміко-технологічного факультету НТУУ «КПІ», доктор хімічних наук Фокін Андрій Артурович.

ПОЛОЖЕННЯ про рейтингову систему оцінки успішності студентів

з кредитного модуля: Кінетика і термодинаміка процесів основного органічного та нафтохімічного синтезу
(код та назва)

для спеціальності: 8.05130102 – Хімічні технології органічних речовин
(шифр та назва)

факультету хіміко-технологічного
кафедри органічної хімії та технології органічних речовин

2. Розподіл навчального часу.

Розподіл навчального часу за видами занять і завдань з дисципліни "Методи експерименту в органічному синтезі -2" згідно з робочим навчальним планом:

Семестр	Всього Кред/г од	Розподіл за семестрами та видами занять						Вид. семест атест.
		Лекц.	Практ.	Семін.	Лабор.	Контр. роб.	СРС	
9	7/252	36	-	-	72	9	144	Екз.

Рейтинг студента з дисципліни складається з балів, що він отримує за:

- 1) присутність на лекціях;
- 2) залік по лабораторним роботам;
- 3) екзаменаційна відповідь;

Система рейтингових (вагових) балів (r_k) та критерії оцінювання

Долі рейтингу, що відповідають типам робіт, у відсотках:

Присутність на лекціях – 10%

Курсова робота – 20%

Залік по лабораторним роботам – 30%

Екзаменаційна складова (R_E) шкали дорівнює 40 % від R

1. Відвідування аудиторних занять.

Присутність на занятті – 0,5 бала; відсутність – (0,5) бал, відсутність з поважної причини – 0 балів. Максимальна кількість балів за відвідування усіх аудиторних занять дорівнює 9 балів.

2. Залік з лабораторних робіт.

Залік виставляється на підставі лабораторного журналу, підписаного керівником. Максимальна оцінка - 30 балів

3. Оцінка курсової роботи.

Максимальна кількість балів за курсову роботу дорівнює 21 бал.

Критерії оцінювання:

21 -19 бали: повна і вичерпно вірна відповідь на запитання лектора;

18-10 бали: відповідь неповна, з неприциповими помилками або після деякої (не дуже значної) навідної допомоги лектора;

0-9 балів: неповна відповідь або відповідь з вельми принциповими помилками, або неспроможність студента сформулювати вірну відповідь навіть при наявній допомозі лектора чи іншого студента;

мінус 1 бал (штрафний): відмова від відповіді на запитання.

Критерії оцінювання екзамену:

40-35 балів: майже бездоганні відповіді на теоретичні питання при наявності елементів продуктивного творчого підходу; демонстрація вміння впевненого застосування фундаментальних знань з хімії при вирішенні контрольних завдань;

34-30 балів: наявність 1-2 помилок та 1-2 зауважень щодо вміння застосовувати фундаментальні знання з хімії при аналізі технології виробництва та відповіді на теоретичні питання;

29-19 балів: наявність суттєвих зауважень до теоретичних викладок, помилки у формулах;

18-9 балів: наявність принципових помилок у відповідях.

0-5 бали: відповідь принципово невірна або відсутня.

Розрахунок шкали рейтингової оцінки з кредитного модуля (RD):

Максимальна сума вагових балів контрольних заходів (R_C) протягом семестру складає:

$$9 + 21 + 30 = 60 \text{ балів}$$

Екзаменаційна складова (R_E) шкали дорівнює 40 балів. Таким чином, рейтингова шкала з дисципліни складає 100 балів.

Відповідно до «Положення про організацію навчального процесу в НТУУ «КПІ»», необхідними умовами допуску до заліку є не менш ніж одна позитивна оцінка з атестації, зарахування обох модульних контрольних робіт, а також стартовий рейтинг (r_C) не менш 50 % від R_C (35 балів).

Студенти, які набрали протягом семестру рейтинг не менше 0,9 R_C , мають право без додаткового опитування отримати оцінку «добре» («В» - 67-70 балів, «С» - 63-66 балів).

Для отримання студентом відповідних оцінок (ECTS – European Credit Transfer System – Європейської кредитно-трансферної та акумулюючої системи – та традиційних) його рейтингова оцінка RD переводиться згідно з таблицею:

$RD = R_C + R_{\check{A}\check{C}}$	%*	Оцінка ECTS	Традиційна оцінка
$0,95R \leq RD:$ 95...100	10	<i>A</i> – Відмінно	Відмінно
$0,85R \leq RD < 0,95R:$ 85... 94	25	<i>B</i> – Дуже добре	Добре
$0,75R \leq RD < 0,85R:$ 82.....91	30	<i>C</i> – Добре	Добре
$0,65R \leq RD < 0,75R:$ 71.....81	25	<i>D</i> – Задовільно	Задовільно
$0,6R \leq RD < 0,65R:$ 65... 70	10	<i>E</i> – Достатньо	
$RD < 0,6R:$ <65	–	<i>F_X</i> – Незадовільно	Незадовільно
$r_C < 0,5R_C:$ <55	–	<i>F</i> – Незадовільно (потрібна додаткова робота)	Не допущений

* Статистичні значення певних позитивних оцінок, що рекомендовані системою ECTS.

менш ніж 0,35 - студент має “Незадовільно” без права перездачі.

Склав: проф. Фокін А.А. _____

Ухвалено на засіданні кафедри ОХ та ТОР

Протокол № 9 від „ 30 ” _____ 05 _____ 2012_ р.

Завідувач кафедри _____ проф. Фокін А.А