

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**

**“ Теорія хімічних процесів органічного синтезу ”**

(назва та код кредитного модуля)

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

(шифр 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.

Кредитний модуль «Теорія хімічних процесів органічного синтезу» викладається згідно навчального плану підготовки спеціалістів та магістрів. Він ставить за мету ознайомити студентів з сучасними теоретичними уявленнями про перебіг процесів і прищепити навички використання цих методів в практичній роботі. 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", "Фізика" та численних лабораторних практикумах та бакалаврському дипломному проекті.

Робоча навчальна програма кредитного модуля складена на основі відповідної навчальної програми. 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 набуті студентом компетенції, повинні також знайти своє відображення у відповідному розділі експериментальної частини дипломного проекту.

## 2. Розподіл навчального часу

Семестр	Всього Кред/г од	Розподіл за семестрами та видами занять						Вид. семест. атест.
		Лекц.	Модуль	ДКР	Лабор.	Контр. роб.	СРС	
9	6.5/234	36	1	1	54	-	144	Екз.

## 3. Мета і завдання дисципліни.

**МЕТА** вивчення дисципліни полягає у формуванні у студентів системи здатностей, необхідних для вирішення типових завдань та теоретичних проблем органічного синтезу, і навчити майбутніх фахівців основам сучасного якісного та кількісного аналізу органічних перетворень, прищепити навички користування сучасними розрахунковими методами в хімії і технології. Дисципліна «Теорія хімічних процесів органічного синтезу» викладається згідно учбового плану підготовки магістрів і спеціалістів призначена для поглибленого вивчення теорії органічних реакцій майбутніми науковцями і інженерами-технологами.

Останні десятиліття органічна хімія та технологія органічних речовин широко впроваджує новітні методи аналізу і синтезу органічних сполук, особливо у поєднанні із спектральними методами, як квантова хімія. Зріст вимог до якості публікацій результатів роботи дослідника поторкує прищеплення навичок роботи з сучасною хімічною літературою.

Після вивчення курсу студент повинен знати:

- основи загальнотеоретичних дисциплін в об'ємі, необхідному для вирішення аналітичних завдань;
- основні методи розрахунку енергетики органічних реакцій;

Після вивчення курсу студент повинен вміти:

- обирати метод розрахунку властивостей органічної сполуки та робити висновки про її будову на основі аналізу;
- осмысленно выбрать расчетный метод для оценки энергетики органической реакции;
- уверенно интерпретировать расчетные данные из современной химической литературы;
- оценивать механизм, стадийность и вычислять энергетику 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	
<b>Розділ 1. Енергетика індивідуальних молекул</b>				
Тема 1. Вступ. Уровни молекулярной энергии и спектральные области им соответствующие	2			27
Тема 2. Вращательная энергия молекул. Типы ротаторов. Приближение жесткого ротатора. Уровни энергии вращательного движения. Правила отбора. Приближение нежесткого ротатора.	2		8	20
Тема 3. Колебательное движение. Колебательное движение в приближении гармонического осциллятора. Решение волнового уравнения для колебательного движения молекул. Правила отбора. Потенциальные функции. Нулевая колебательная энергия.	2		8	15
Тема 4. Колебательное движение. Ангармонический осциллятор. Функция Морзе. Учет ангармоничности. Правила отбора. Типы переходов.	2		8	
Тема 5. Электронное движение. Уровни электронной энергии молекул. Колебательные подуровни. Принцип Франка-Кондона. Типы переходов и характер электронных спектров. Спиновые состояния. Диаграмма Яблонского, классификация переходов, запрет по спину	2			
Тема 6. Колебания сложных молекул. Правило $3N-6$ ( $3N-5$ ). Независимые координаты. Поверхность потенциальной энергии.	2			13
Тема 6. Колебания сложных молекул. Координата реакции. Матрица силовых постоянных	2			13
<b>Розділ 2. Анализ ППЭ</b>				
Тема 7. Критические точки. Критические точки и их выявление. Прямая визуализация, метод реакционной координаты.	2		6	15
Тема 8. Переходные состояния. Мнимые колебательные моды и их количество (NIMAG). Методы выявления переходных состояний. Контроль по симметрии.	2		6	13

Тема 9. Седловые точки. Анализ седловых точек на ППЭ. Эмпирические подходы к анализу ППЭ органических реакций. Тема 10.«Аномалии» на ППЭ. Нарушение адиабатичности, туннелирование, бифуркация.	2			11
<b>Розділ 3.Постулаты</b>				
Тема 11. Принцип наименьшего движения, постулат Хэммонда, принцип Кертена-Гаммета.	2		6	13
Тема 12. Макроэнергетика химических реакций Связь топологии ППЭ с термодинамическими параметрами химических реакций.	2			
Тема 13. Вычисление энтропии. Статистическое вычисление энтальпии и энтропии. Составляющие энтропии.	2		4	12
Тема 14. Методы расчета ППЭ механическая модель.. Молекулярно-механический метод. Стерическая энергия $E_{ster}$ . Виды силовых полей. Параметризация. Применение метода ММ в органической химии. Теплоты образования, энергия напряжения $E_{str}$ , гомодейсмические уравнения.	2			
Тема 15. Методы расчета ППЭ квантовая модель (подходы). Методы расчета ППЭ. Квантово-химические методы. Приближения, используемые в компьютерной химии. Приближение Борна-Оппенгеймера. Молекулярные орбитали ( $\phi$ ), приближение МО-ЛКАО. Базисные функции ( $\chi$ ), примитивные гауссианы ( $g$ ). Классификация базисов по Поплу.	2			
Тема 16. Методы расчета ППЭ квантовая модель (методы). Уравнение Шрёдингера ( $\hat{H}\Psi=E_x\Psi$ ). Пробная («неправильная») волновая функция ( $\Psi'$ ). Вариационный принцип.	1			
Тема 17. Методы расчета ППЭ квантовая модель (приближения) Простой метод Хюккеля. Виды интегралов ( $\alpha$ , $\beta$ и $S$ ) и их физический смысл. Вычисление энергии орбиталей этилена, бензола. Представление волновой функции $\Psi$ . Продукт Хартри. Спиновые операторы $\alpha$ и $\beta$ . Спин-орбитали.	1			13
Тема 18. Методы расчета ППЭ квантовая модель (точная модель) Вычисление электронной энергии молекул в методе Хартри-Фока. Уравнение Рутаана-Хала. Матрица Фока ( $F_{\mu\nu}$ ), матрица перекрывания ( $S_{\mu\nu}$ ), матрица электронной плотности ( $P_{\lambda\sigma}$ ). 2-х электронные четырехцентровые интегралы $\langle\mu\nu \lambda\sigma\rangle$ и $\langle\mu\lambda \sigma\nu\rangle$ .	1			13

Тема 19. Методы расчета ППЭ квантовая модель (упрощенная модель) Сложности вычисления электронной энергии в методе Хартри-Фока ( <i>ab initio</i> ). Итерационный метод самосогласованного поля (ССП). Упрощения подхода <i>ab initio</i> . Полуэмпирические методы (CNDO и MNDO).	1			
Тема 20. Учет электронной корреляции. Метод конфигурационного взаимодействия. Метод Мёллера-Плессета. DFT-методы. Уравнение Кона-Шама. Представление электронной энергии через функционалы электронной плотности, виды термов. Обменно-корреляционный терм $E^{XC}$ и его составляющие. Виды обменных и корреляционных функционалов.	2			10
Всего	36		54	144

#### 4.2 Лекції.

Лекція 1. Вступ.

Лекція 2. Вращательная энергия молекул.

Лекція а 3. Колебательное движение.

Лекція 4. Колебательное движение.

Лекція 5. Электронное движение.

Лекція 6. Колебания сложных молекул.

Лекція 7. Критические точки.

Лекція 8. Переходные состояния.

Лекція 9. Седловые точки.

Лекція 10. Постулаты

Лекція 11. «Аномалии» на ППЭ.

Лекція 12. Макроэнергетика химических реакций

Лекція 13. Вычисление энтропии.

Лекція 14. Методы расчета ППЭ механическая модель..

Лекція 15. Методы расчета ППЭ квантовая модель (подходы).

Лекція 16. Методы расчета ППЭ квантовая модель (методы).

Лекція 17. Методы расчета ППЭ квантовая модель (приближения)

Лекція 18. Методы расчета ППЭ квантовая модель (точная модель)

Лекція 19 Методы расчета ППЭ квантовая модель (упрощенная модель)

Лекція 20. Учет электронной корреляции.

#### 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 каталізаторах 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-бромаадамтану.
2. Карбоксилювання 1-бромаадамтану. Одержання 1-адамтанкарбоної кислоти.
3. Етерифікація 1-адамтанкарбоної кислоти. Одержання метилового етеру 1-адамтанкарбоної кислоти.
4. Відновлення метилового етеру 1-адамтанкарбоної кислоти. Одержання 1-гідроксиметилаадамтану.
5. Заміна гідроксильної групи 1-гідроксиметилаадамтану на бром. Одержання 1-бромметилаадамтану.
6. Бромовання 1-бромметилаадамтану. Одержання 1-бром-3-бромметилаадамтану.
7. Фрагментація 1-бром-3-бромметил-адамтану. Одержання 3,7-диметил-ленбіцикло[3.3.1]нонану.
8. Каталітичне бромовання адамантану. Одержання 1,3-дибромаадамтану.
9. Фрагментація 1,3-дибромаадамтану. Одержання 3-метил-енбіцикло[3.3.1]нонан-7-ону.
10. Гідроліз 1-бромаадамтану. Одержання 1-гідроксиадамтану.
11. Окислення 1-гідроксиадамтану. Одержання адамантанону.
12. Одержання 3-бромаадамтан-1-карбоної кислоти.
13. Одержання хлорангідриду 3-бромаадамтан-1-карбоної кислоти
14. Одержання феніл-(3-бромаадамтан-1)кетону.
15. Одержання феніл-(3-бромаадамтан-1)карбінолу.
16. Одержання феніл-(3-бромаадамтан-1)бромметану.
17. Одержання 3-метил-ен-7-бензилденбіцикло[3.3.1]нонану.
18. Одержання метил-(3-гідроксиадамтан-1)кетону.
19. Відновлення метил-(3-гідроксиадамтан-1)кетону.
20. Одержання 1-бром-1-(3-гідроксиадамтан-1)етану.
21. Одержання 3-метил-ен-7-етилденбіцикло[3.3.1]нонану.
22. Одержання 1-адамтанетилкетону.
23. Одержання (адамтан-1)метилкетону.

## 8. КОНТРОЛЬНІ РОБОТИ

Основною метою рубіжних контрольних робіт є контроль успішності засвоєння студентами змісту тематики робочої навчальної програми кредитного модуля *к* і виявлення питань програми, що незадовільно засвоюються студентами, з метою формування тематики консультаційних занять.

При вивченні кредитного модуля студентами з напряму підготовки 8.05130102, виконуються контрольна робота у відповідності з розділами, наведеними в тематичному плані програми. Перелік питань, що виносяться на контрольну роботу, формується з використанням переліку питань, наведених в лекціях цієї програми. Ваговий бал див. відповідну РСО.

### 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. М. Минкин, Е. Симкин, Р. Миняев. Квантовая химия органических соединений, М., "Химия", 1989.
2. Л. Салем. Электроны в химических реакциях. М., Мир, 1985.
3. G. Maskill. Physical Bases of Organic Chemistry, Pergamon Press, 1990.
4. Н. Еллінджер. Молекулярна механіка. "Мир", 1988
5. В. Клоп ман. Современные аспекты органических реакций. Мир. 1987
6. Ф. Банкер, П. Йенсен. Симметрия молекул и спектроскопия. Мир, 2004.
7. Дж. Маррел, Ф. Кеттл. Химическая связь. Мир, 1980.
8. К. Бернуэлл. Основы молекулярной спектроскопии. Мир, 1985.

#### 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. B. *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 «Теорія хімічних процесів органічного 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: Теорія хімічних процесів органічного синтезу  
(код та назва)

для спеціальності: 8.05130102 – Хімічні технології органічних речовин

факультету  
кафедри

(шифр та назва)

хіміко-технологічного  
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.	Модуль	ДКР	Лабор.	Контр. роб.	СРС	
9	6.5/234	36	1	1	54	-	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 неprincipовими 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:

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