

**КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ  
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА**

**Хімічний факультет**  
Кафедра органічної хімії

**«ЗАТВЕРДЖУЮ»**

Заступник декана  
навчальної роботи



Наталія УСЕНКО

2023 року

**РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ**  
**МЕХАНІЗМИ ХІМІЧНИХ ПРОЦЕСІВ У РОЗЧИНАХ**

для здобувачів освітньо-наукового рівня  
доктор філософії

галузі знань **10 Природничі науки**  
спеціальність **102 Хімія**  
освітній рівень **третій (освітньо-науковий)**  
освітня програма **Хімія**  
вид дисципліни **дисципліна вільного вибору аспіранта**

Форма навчання **денна**  
Навчальний рік **2023/2024**  
Період навчання **2 курс**  
Семестр **II**  
Кількість кредитів ECTS **4 кредити**  
Мова викладання, навчання та оцінювання **українська**  
Форма заключного контролю **іспит**

Викладач (лектор): **Пивоваренко Василь Георгійович**

Пролонговано: на **2024/2025** н.р. \_\_\_\_\_ (\_\_\_\_\_) «\_\_» \_\_\_\_\_ 20\_\_ р.

на **2025/2026** н.р. \_\_\_\_\_ (\_\_\_\_\_) «\_\_» \_\_\_\_\_ 20\_\_ р.

**КИЇВ – 2023**

Розробники): **Пивоваренко Василь Георгійович**

ЗАТВЕРДЖЕНО

Завідувач кафедри органічної хімії



Олександр ГРИГОРЕНКО

Протокол № 15 від «09» травня 2023 р.

Схвалено науково-методичною комісією хімічного факультету

Протокол № 17 від «06» червня 2023 року

Голова науково-методичної комісії



Олександр РОЇК

**1. Мета дисципліни** – теоретичне вивчення та практичне засвоєння аспірантами молекулярної будови розчинів та механізмів хімічних перетворень у розчинах.

**2. Попередні вимоги до опанування навчальної дисципліни:**

1. Знати загальну хімію на рівні магістра за спеціальністю «Хімія».
2. Знати органічну хімію на рівні магістра за спеціальністю «Хімія».
3. Знати аналітичну хімію на рівні магістра за спеціальністю «Хімія».
4. Знати фізичну хімію на рівні магістра за спеціальністю «Хімія».
5. Знати стереохімію на рівні бакалавра за спеціальністю «Хімія».

**3. Анотація навчальної дисципліни.** Курс «Механізми хімічних процесів у розчинах» призначений для поглибленого вивчення хімічних перетворень у розчинах. Розглядаються аспекти, що стосуються теорії розчинів та міжмолекулярних взаємодій хімічних сполук у розчинах, змін електронної будови молекул у залежності від властивостей молекул оточення, а також від інших умов: ультразвукового та мікрохвильового поля тощо.

**4. Завдання:** подати сучасну версію теорії розчинів та хімічних перетворень у розчинах. Подати і поглибити розуміння студентами принципів хімічної взаємодії молекул у розчинах і залежності механізму взаємодії від просторової та електронної будови молекули і зовнішніх умов. Навчити передбачати результат реакції шляхом аналізу просторової та електронної будови молекули, а також умов реакції.

**5. Результати навчання за дисципліною**

Код	Результат навчання	Форми викладання і навчання	Методи оцінювання поточний контроль ПтК-1, ПтК-2 та ПтК-3), підсумковий контроль ПсК	Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни
<b>1. Знання</b>				
1.1	Знати вплив температури, світла, ультразвуку та мікрохвиль на розчини.	лекції, самостійні	ПтК-2, ПтК-3, ПсК	15
1.2	Знати зв'язок супрамолекулярної будови розчину з електронною та просторовою будовою його складових.	лекції, самостійні	ПтК-2, ПтК-3, ПсК	10

1.3	Знати принципи хімічної взаємодії молекул і залежності механізму взаємодії від їх просторової та електронної будови і зовнішніх умов.	лекції, самостійні	ПтК-1, ПтК-3, ПсК	15
<b>2. Вміння</b>				
2.1	Вміти аналізувати електронну та просторову будову молекул та молекулярних комплексів	лекції, практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПтК-3, ПсК	10
2.2	Вміти передбачати результат хімічної реакції в залежності від умов її проведення.	лекції, практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПтК-3, ПсК	15
2.3	Вміти правильно планувати умови проведення хімічної реакції	лекції, практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПтК-3, ПсК	15
<b>3. Комунікація</b>				
3.1	Здатність використовувати сучасні інформаційно-комунікаційні технології при спілкуванні, а також для збору, аналізу, обробки та інтерпретації даних	лекції, практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПтК-3, ПсК	5
3.2	Здатність виконувати передбачені навчальною програмою завдання та операції у співпраці з іншими виконавцями	лекції, практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-3, ПсК	5
<b>4. Автономність та відповідальність</b>				
4.1	Вміти самостійно збирати та аналізувати інформацію в галузі комп'ютерної хімії	лекції, практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-3, ПсК	5
4.2	Вміти оперувати сучасною номенклатурою та термінологією в галузі комп'ютерної хімії	лекції, практичні, самостійні	ПтК-1, ПтК-3, ПсК	5

**6. Співвідношення результатів навчання дисципліни (РНД) із програмними результатами навчання (ПРН):**

ПРН	РНД (код)										
	1.1	1.2	1.3	2.1	2.2	2.3	3.1	3.2	4.1	4.2	
<b>Знання</b> Сучасні передові концептуальні та методологічні знання в галузі хімії та суміжних галузей знань.	+	+	+								
Знання праць провідних зарубіжних вчених, наукових шкіл та фундаментальних праць у галузі дослідження, формулювання мети власного наукового дослідження в контексті світового наукового процесу.	+	+	+								
Знати принципи фінансування науково-дослідної роботи та структуру кошторисів на її виконання, вміння підготувати запит на отримання фінансування, звітну документацію.											
<b>Уміння</b> Критичний аналіз, оцінка і синтез нових ідей.				+							
Уміння з нових дослідницьких позицій формулювати загальну методологічну базу власного наукового дослідження, усвідомлювати його актуальність, мету і значення для розвитку інших галузей науки, суспільно-політичного, економічного життя.					+					+	
Ініціювати, організувати та проводити комплексні дослідження в галузі науково-дослідницької та інноваційної діяльності, які приводять до отримання нових знань.						+	+				
Вміти формувати команду дослідників для вирішення локальної задачі (формулювання дослідницької проблеми, робочих гіпотез, збору інформації, підготовки пропозицій).						+	+	+	+		
Вміння формулювати наукову проблему з огляду на сучасні наукові тенденції.				+							
Формулювати робочі гіпотези та моделі досліджуваної проблеми.				+	+	+					
Аналізувати наукові праці в галузі хімії та суміжних наук, виявляючи дискусійні та мало досліджені питання.				+							
Моніторинг наукових джерел інформації відносно досліджуваної проблеми.				+						+	
Здійснювати процедуру встановлення інформаційної цінності джерел шляхом порівняльного аналізу з іншими джерелами.				+						+	

ПРН	РНД (код)										
	1.1	1.2	1.3	2.1	2.2	2.3	3.1	3.2	4.1	4.2	
Визначати принципи та методи дослідження, використовуючи міждисциплінарні підходи.			+	+						+	
<b>Комунікація</b> Здатність спілкування в діалоговому режимі з широкою науковою спільнотою та громадськістю в галузі хімії.								+	+		
Вміння кваліфіковано відображати результати наукових досліджень у наукових статтях в фахових виданнях, вести конструктивний діалог з рецензентами та редакторами.				+					+	+	+
Здатність професійно презентувати результати своїх досліджень на міжнародних наукових конференціях, семінарах, практично використовувати іноземну мову (в першу чергу - англійську) у науковій, інноваційній та педагогічній діяльності.				+					+	+	+
Здатність працювати в команді, мати навички міжособистісної взаємодії.								+	+		+
Використовувати сучасні інформаційні та комунікативні технології при спілкуванні, обміні інформацією, зборі, аналізі, обробці, інтерпретації джерел.	+	+	+	+	+	+	+	+	+		
<b>Автономія та відповідальність</b> Ініціювання наукових та інноваційних комплексних проектів в галузі хімії, лідерство та автономність під час їх реалізації.										+	+
Здатність діяти соціально відповідально та громадянсько свідомо і на основі, дотримуватися професійної та корпоративної етики.											+
Здатність саморозвиватися і самовдосконалюватися, нести відповідальність за новизну наукових досліджень та прийняття експертних рішень.	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+
Здатність приймати обґрунтовані рішення, мотивувати людей.	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+

## **7. Схема формування оцінки**

### **7.1. Форми оцінювання студентів:**

#### **- семестрове оцінювання**

- 1.1. активність під час практичних занять;
- 1.2. виконання домашнього самостійного завдання;
- 1.3. написання контрольної роботи.

#### **- підсумкове оцінювання**

іспит.

## 7.2. Організація оцінювання (за формами контролю згідно з графіком навчального процесу):

	Змістовий модуль 1		Змістовий модуль 2		Іспит	
	Min. – 18 бали	Max. – 30 балів	Min. – 18 бали	Max. – 30 балів	Min – 24 бали	Max – 40 балів
Усна відповідь	1	3	1	3		
Виконання домашньої самостійної роботи	3	5	3	5		
Модульна контрольна робота 1	14	22				
Модульна контрольна робота 2			14	22	24	40

До іспиту може бути допущений аспірант, який виконав усі обов'язкові види робіт, які передбачаються навчальним планом з дисципліни "Механізми хімічних процесів у розчинах" (а саме: виконання зазначених у програмі домашніх самостійних робіт, написання контрольних робіт, виконання практичних робіт), і при цьому за результатами модульно-рейтингового контролю в семестрі отримав за змістові модуля сумарну оцінку в балах не менше 36 балів (розрахунковий мінімум при формі підсумкового контролю – іспит).

Для отримання загальної позитивної оцінки з дисципліни оцінка за іспит не може бути меншою 24 балів.

У випадку відсутності аспіранта з поважних причин відпрацювання пропущених занять та перездачі контрольних робіт здійснюються у відповідності до „Положення про порядок оцінювання знань студентів при кредитно-модульній системі організації навчального процесу” від 1 жовтня 2010 року.

## 7.3. Шкала відповідності оцінок

За 100 – бальною шкалою	За національною шкалою	
90 – 100	5	відмінно / excellent
85 – 89	4	добре / good
75 – 84		
65 – 74	3	задовільно / satisfactory
60 – 64		
0 – 59	2	не задовільно / fail



## 8. Структура навчальної дисципліни.

### Тематичний план лекцій

№ теми	Назва теми	Кількість годин		
		лекції	практ	С/Р
<b>Змістовий модуль 1.</b>				
<i>Будова розчину та основні фактори, що визначають механізм реакції</i>				
1	Сучасні уявлення про міжмолекулярні взаємодії в газовій та конденсованій фазах. Будова розчинів.	4		20
2	Типи міжмолекулярних взаємодій та їх роль у хімічній реакції. Комплекс типу донор електронної пари – акцептор електронної пари як необхідна передумова (післяумова) хімічної реакції.	2		10
3	Колективні коливання і фононний механізм хімічних перетворень у розчинах. Механізми фазових переходів.	4		20
4	Енергетика та кінетика хімічної реакції. Швидкість реакції та вільна енергія активації. Кінетичний та термодинамічний контроль продуктів реакції.	2		10
5	Електронні та просторові ефекти та їх вплив на властивості молекул.	2		10
6	Модульна контрольна робота 1	1		
<b>Змістовий модуль 2.</b>				
<i>Вплив зовнішніх умов на хімічну взаємодію і механізми найбільш важливих хімічних реакцій</i>				
8	Механізми найбільш важливих термохімічних реакцій. Механізми каталізу металокомплексами та поверхнею дисперсної фази.	6	3	20
9	Механізми найбільш важливих фотохімічних перетворень. Клік- та фотоклік-реакції.	2	1	20
10	Механізм впливу мікрохвиль на розчини. Мікрохвильовий хімічний синтез.	4	1	30
11	Механізм впливу акустичних коливань на розчини. Сонохімія та способи використання ультразвуку в хімічному синтезі.	4	1	30
12	Будова ферментів і механізми ферментативного каталізу.	4	2	22
15	Модульна контрольна робота 2	1		
	<b>ВСЬОГО</b>	<b>36</b>		<b>192</b>

Загальний обсяг **240 год.**, в тому числі:

Лекцій – **36 год.**

Практичні заняття – **8 год.**

Консультації – **4 год.**

Самостійна робота - **192 год.**

## Рекомендована література

### Основна:

1. Пивоваренко В. Г. «Механізми органічних реакцій у розчинах». Київ, ВПЦ «Київський університет», 2019, 306 с.
2. Сайкс П. Механизмы реакций в органической химии. М., "Химия", 1991 г., 446 с.
3. Clayden J., Greeves N., Warren S., Wothers P. Organic chemistry, V 1-3. ISBN: 978-0199270293, Oxford University Press, 2001.
3. J. Jacob. Microwave Assisted Reactions in Organic Chemistry: A Review of Recent Advances  
Microwave Assisted Reactions in Organic Chemistry: A Review of Recent Advances.  
International Journal of Chemistry; 2012, Vol. 4, No. 6; p. 29-43.
4. Wu, T.Y., Guo, N., Teh C.Y., Hay, J.X.W. Advances in Ultrasound Technology of Ultrasound Remediation. Chapter 2. Theory and Fundamentals of Ultrasound. 2013, p. 5-12. Springer, ISBN 978-94-007-5532-1
6. Райхардт К. Растворители и эффекты среды в органической химии. М.: Мир, 1991. 765 с.
7. Овчинников Ю.А. Биоорганическая химия. М., "Просвещение", 1987, 876 с.

### Додаткова:

1. N.H. Ince, G. Tezcanli, R.K. Belen, I.G. Apikyan. Ultrasound as a catalyzer of aqueous reaction systems: the state of the art and environmental applications. Applied Catalysis B: Environmental 29 (2001) 167–176.
2. Banerjee B. Recent developments on ultrasound assisted catalyst-free organic synthesis. Ultrason. Sonochem. 2017, 35, 1-14. doi:
3. Ингольд К. Теоретические основы органической химии. М., "Мир", 1973.
4. Leach, Dr Andrew (2001-01-30). *Molecular Modelling: Principles and Applications* (2 ed.). Harlow: Prentice Hall. ISBN 9780582382107.
5. Страйер Л. Биохимия. В 3-х томах. Т. 1. М., "Мир", 1985.
6. B. Hayes, Microwave Synthesis: Chemistry at the Speed of Light. Cem Corp. CEM Publishing, 2003, 289 pp. ISBN-13: 978-0972222907
7. Карпе С. О., В. Pieber B., Dalling D. Microwave Effects in Organic Synthesis: Myth or Reality? // Angew. Chem. Int. Ed.- 2013.- V. 52.- P. 10881094.
8. Pedersen S. L., Tofteng A. P., Malik L., Jensen K. J. Microwave heating in solid-phase peptide synthesis // Chem. Soc. Rev.- 2012.- V. 41.- P. 1826-184.

### Інтернет ресурси

1. [https://en.wikipedia.org/wiki/Hammett\\_acidity\\_function](https://en.wikipedia.org/wiki/Hammett_acidity_function)
2. [https://en.wikipedia.org/wiki/Norrish\\_reaction](https://en.wikipedia.org/wiki/Norrish_reaction)
3. <https://en.wikipedia.org/wiki/Excimer>
4. [https://en.wikipedia.org/wiki/Stevens\\_rearrangement](https://en.wikipedia.org/wiki/Stevens_rearrangement)
5. [https://en.wikipedia.org/wiki/1,2-Wittig\\_rearrangement](https://en.wikipedia.org/wiki/1,2-Wittig_rearrangement)
6. [https://en.wikipedia.org/wiki/Benzilic\\_acid\\_rearrangement](https://en.wikipedia.org/wiki/Benzilic_acid_rearrangement)
7. [https://en.wikipedia.org/wiki/Alpha-ketol\\_rearrangement](https://en.wikipedia.org/wiki/Alpha-ketol_rearrangement)
8. [https://en.wikipedia.org/wiki/Fritsch%E2%80%93Buttenberg%E2%80%93Wiechell\\_rearrangement](https://en.wikipedia.org/wiki/Fritsch%E2%80%93Buttenberg%E2%80%93Wiechell_rearrangement)
9. [https://en.wikipedia.org/wiki/Brook\\_rearrangement](https://en.wikipedia.org/wiki/Brook_rearrangement)
10. [https://en.wikipedia.org/wiki/Seyferth%E2%80%93Gilbert\\_homologation](https://en.wikipedia.org/wiki/Seyferth%E2%80%93Gilbert_homologation)
11. [https://en.wikipedia.org/wiki/Pericyclic\\_reaction](https://en.wikipedia.org/wiki/Pericyclic_reaction)
12. <https://en.wikipedia.org/wiki/Cycloaddition>
13. [https://en.wikipedia.org/wiki/4%2B4\\_Photocycloaddition](https://en.wikipedia.org/wiki/4%2B4_Photocycloaddition)
14. [https://en.wikipedia.org/wiki/6%2B4\\_cycloaddition](https://en.wikipedia.org/wiki/6%2B4_cycloaddition)

15. [https://en.wikipedia.org/wiki/Electrocyclic\\_reaction](https://en.wikipedia.org/wiki/Electrocyclic_reaction)
16. [https://en.wikipedia.org/wiki/Ene\\_reaction](https://en.wikipedia.org/wiki/Ene_reaction)
17. [https://en.wikipedia.org/wiki/Cheletropic\\_reaction](https://en.wikipedia.org/wiki/Cheletropic_reaction)
18. [https://en.wikipedia.org/wiki/Heck\\_reaction](https://en.wikipedia.org/wiki/Heck_reaction)
19. [https://en.wikipedia.org/wiki/Negishi\\_coupling](https://en.wikipedia.org/wiki/Negishi_coupling)
20. [https://en.wikipedia.org/wiki/Kumada\\_coupling](https://en.wikipedia.org/wiki/Kumada_coupling)
21. [https://en.wikipedia.org/wiki/Tsuji%E2%80%93Trost\\_reaction](https://en.wikipedia.org/wiki/Tsuji%E2%80%93Trost_reaction)
22. [https://en.wikipedia.org/wiki/Buchwald%E2%80%93Hartwig\\_amination](https://en.wikipedia.org/wiki/Buchwald%E2%80%93Hartwig_amination)
23. [https://en.wikipedia.org/wiki/Dialkylbiaryl\\_phosphine\\_ligands](https://en.wikipedia.org/wiki/Dialkylbiaryl_phosphine_ligands)
24. [https://en.wikipedia.org/wiki/Catellani\\_reaction](https://en.wikipedia.org/wiki/Catellani_reaction)
25. <https://en.wikipedia.org/wiki/Methyltransferase>
26. [https://en.wikipedia.org/wiki/Vitamin\\_B12](https://en.wikipedia.org/wiki/Vitamin_B12)
27. [https://en.wikipedia.org/wiki/S-Adenosyl\\_methionine](https://en.wikipedia.org/wiki/S-Adenosyl_methionine)
28. [https://en.wikipedia.org/wiki/Wood%E2%80%93Ljungdahl\\_pathway](https://en.wikipedia.org/wiki/Wood%E2%80%93Ljungdahl_pathway)
29. [https://en.wikipedia.org/wiki/Coenzyme\\_A](https://en.wikipedia.org/wiki/Coenzyme_A)
30. <https://en.wikipedia.org/wiki/Biotin>
31. [https://en.wikipedia.org/wiki/Acetyl-CoA\\_carboxylase](https://en.wikipedia.org/wiki/Acetyl-CoA_carboxylase)
32. <https://www.sciencedirect.com/topics/biochemistry-genetics-and-molecular-biology/biotin-carboxylase>