

НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ

ВІДДІЛЕННЯ ФІЗИКО-ХІМІЇ ГОРЮЧИХ КОПАЛИН  
ІНСТИТУТУ ФІЗИКО-ОРГАНІЧНОЇ ХІМІЇ І ВУГЛЕХІМІЇ ім. Л. М. ЛИТВИНЕНКА

«ЗАТВЕРДЖУЮ»

Директор Відділення ФХГК ІнФОВ

ім. Л. М. Литвиненка НАН України

с. н. с., к. х. н.

Г. Г. МІДЯНА

«24» грудня 2019 р.



## СИЛАБУС З ДИСЦИПЛІНИ

### «Гомогенні та гетерогенні каталізатори радикальних процесів»

ГАЛУЗЬ ЗНАНЬ  
СПЕЦІАЛЬНІСТЬ  
СПЕЦІАЛІЗАЦІЯ  
РІВЕНЬ ОСВІТИ

10 – ПРИРОДНИЧІ НАУКИ  
102 – «ХІМІЯ»  
«ФІЗИЧНА ХІМІЯ»  
ТРЕТІЙ (ОСВІТНЬО-НАУКОВИЙ)

м. Львів 2019 р.

Силабус з дисципліни «Гомогенні та гетерогенні каталізатори радикальних процесів» для аспірантів у галузі знань 10 – «Природничі науки», спеціальності 102 – «Хімія» (спеціалізації «Фізична хімія») (третьій освітньо–науковий рівень освіти).

«24» грудня 2019 р. – 9 с.

Розробник: д. х. н., проф., гол. н. с. відділу хімії окислювальних процесів Відділення ФХГК ІнФОВ ім. Л. М. Литвиненка НАН України Й. О. Опейда

Силабус затверджений на засіданні Вченої ради Відділення фізико–хімії горючих копалин Інституту фізико–органічної хімії і вуглехімії ім. Л. М. Литвиненка НАН України (протокол № 18 від «24» грудня 2019 року).

© Опейда Й. О., 2019

© Відділення фізико–хімії горючих копалин  
Інституту фізико–органічної хімії і вуглехімії  
ім. Л. М. Литвиненка НАН України

<b>Назва курсу</b>	<b>ГОМОГЕННІ ТА ГЕТЕРОГЕННІ КАТАЛІЗАТОРИ РАДИКАЛЬНИХ ПРОЦЕСІВ</b>
<b>Адреса викладання курсу</b>	Наукова лабораторія Відділення фізико-хімії горючих копалин Інституту фізико-органічної хімії і вуглехімії ім. Л. М. Литвиненка НАН України; вул. Наукова, 3а, кімн. № 144
<b>Відділ, за яким закріплена дисципліна</b>	Відділ хімії окислювальних процесів
<b>Галузь знань, шифр та назва спеціальності</b>	10 Природничі науки 102 Хімія
<b>Викладачі курсу</b>	Опейда Йосип Олексійович, д. х. н., професор, гол. н. с. відділу хімії окислювальних процесів.
<b>Контактна інформація викладачів</b>	Відділ хімії окислювальних процесів, вул. Наукова, 3а, кімн. № 144; (032) 263 5174 електронна пошта: <a href="mailto:Opeyda.Io.O@nas.gov.ua">Opeyda.Io.O@nas.gov.ua</a>
<b>Консультації по курсу відбуваються</b>	1) очно при попередній домовленості з викладачем за адресою: Відділ хімії окислювальних процесів, вул. Наукова, 3а, кімн. № 144; 2) заочно через електронну пошту
<b>Інформація про курс</b>	«Гомогенні та гетерогенні каталізатори радикальних про- цесів» є дисципліною вільного вибору освітньо-наукової програми підготовки доктора філософії за спеціальністю 102 «Хімія». Обсяг дисципліни – 180 годин (6 кредитів ECTS), в тому числі аудиторних – 60 годин для денної та 30 годин для заочної форми навчання
<b>Коротка анотація курсу</b>	Завданнями курсу є: 1) розкриття смислу методів кінети- тики каталітичних радикальних процесів, навчити аспі- ранта бачити області його застосування і можливості при вирішенні конкретних хімічних проблем; 2) виділи- ти методологічно важливі питання хімічної кінетики ка- талітичних радикальних процесів і на конкретних прикла- дах показати застосування методу хімічної кінетики для опису каталітичних радикальних процесів; 3) розви- ток умінь, що допоможуть застосовувати теорію та пра- ктику хімічної кінетики до вирішення різних задач, обґрунтовано оцінювати адекватність моделей та їх застосовність в конкретних умовах.

<p><b>Мета та цілі курсу</b></p>	<p>Метою курсу «Гомогенні та гетерогенні каталізатори радикальних процесів» є: загально-педагогічна – підготовка спеціалістів-хіміків, які вміють застосовувати методи комп'ютерного та математичного моделювання для вирішення кінетичних задач; дидактична – засвоєння знань, що передбачені програмою, завдяки цілеспрямованій співпраці викладача і аспіранта; методична – виділити головну ланку в кожній темі, що сприятиме формуванню основних понять з курсу, формуванню знань у результаті активізації пізнавальної діяльності аспірантів, застосування методів активного навчання.</p>
<p><b>Література для вивчення дисципліни</b></p>	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Эмануэль Н. М. Денисов, Е. Т. , Майзус З. К Цепные реакции окисления углеводородов в жидкой фазе.– М.: Наука, 1965. – 375 с</li> <li>2. Денисов Е. Т., Мицкевич Н. И, Агабеков В. Е. — Механизм окисления кислород- содержащих соединений. Минск. Наука и техника, 1975,</li> <li>3. Опейда, Й. О.Інноваційний органокаталіз—перспек тивний напрямок у реакціях рідиннофазного окислення молекулярним киснем. Наука та інновації, (2015). (11,№ 6), 68-74.</li> <li>4. Опейда, Й. О.Математичне та комп'ютерне моделювання в хімії: підручник /. – Вінниця: ДонНУ, 2015. – 388 с. (з грифом МОН, лист № 1/11–7540 від 20.05.2014 р.)</li> <li>5. Опейда, Й. О.Комп'ютери та експеримент у хімії /. – Вінниця, Львів: ДонНУ, 2016. – 196 с.</li> <li>6. Ракша О.В., Пастернак О.М., Туровський М.А. Інформатика, інформаційні технології. ДонНУ, 2011. – 118 с.</li> <li>7. Вдckvall J.-E., Ed. Modern Oxidation Methods; Wiley-VCH Verlag GmbH &amp; Co. KGaA: Weinheim, 2005</li> <li>8. Денисов Е.Т. Кинетика гомогенных химических реакций. – М.: Высшая школа, 1988. .</li> <li>9. Жидкофазное окисление непредельных соединений в окиси олефинов / Кучер Р.В., Тимохин В.И., Шевчук И.П., Васютын Я.М. – Киев: Наукова думка, 1986. – 160 с.</li> <li>10. Р. В. Кучер, И. А. Опейда. Соокисление органических веществ в жидкой фазе / - Киев : Наук. думка, 1989. - 208 с.</li> <li>11. Stahl, S.; Paul, L. Alsters (Ed) Liquid Phase Aerobic Oxidation Catalysis – Industrial Applications and Academic Perspectives: John Wiley &amp; Sons., 2016, 429p.</li> <li>12. R.A. Sheldon and J.K. Kochi, Metal-Catalyzed Oxidation of Organic Compounds (Academic Press, New York, 1981)</li> <li>13. D.H.R. Barton, A.E. Martell and D.T. Sawyer, eds., The Activation of Dioxygen and Homogeneous Catalytic Oxidation (Plenum, New York, 1993).</li> <li>14. G.W. Parshall and S.D. Ittel, Homogeneous Catalysis, 2nd Ed. (Wiley, New York, 1992).</li> </ol>

<b>Тривалість курсу</b>	IV рік підготовки, 8 семестр 180 годин
<b>Очікувані результати навчання</b>	<p>В результаті вивчення навчального матеріалу аспірант повинен:</p> <p>знати:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• – основні поняття експериментальних та теоретичних методів кінетики каталітичних радикальних процесів;</li> <li>• – розуміти принципові можливості застосування методів кінетики каталітичних радикальних процесів для дослідження конкретних хімічних проблем;</li> </ul> <p>вміти:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• – засобами хімічної кінетики аналізувати фізичні та хімічні явища і процеси;</li> <li>• – застосовувати хімічні закони для створення кінетичних моделей хімічних процесів;</li> <li>• – обґрунтовувати постановку хімічного експерименту для встановлення механізму каталізу в радикальних процесах;</li> <li>• – за результатами експериментальних експериментів побудувати адекватний хімічний механізм процесу;</li> <li>• – візуалізувати результати експерименту та моделювання — будувати графіки, таблиці, діаграми, які описують каталітичні процеси.</li> </ul>
<b>Формат курсу</b>	Очний/заочний. Лекційні та семінарські заняття, проведення консультацій у випадку труднощів із засвоєнням матеріалу
<b>Теми</b>	<p><b>Змістовий модуль 1. Основні положення методів опису кінетики процесів окиснення з метою отримання кисневмісних сполук.</b></p> <p><b>Тема 1.</b> Історичний огляд розвитку кінетики та каталізу радикальних процесів. Основні поняття кінетичних методів. Особливості опису кінетики складних хімічних процесів окиснення органічних сполук.</p> <p><b>Тема 2.</b> Ефективні методи каталітичної функціоналізації вуглеводнів – основне завдання як у синтетичній, так і в промисловій хімії. Селективне перетворення алканів, алкіларенів до кисневмісних сполук таких як гідропероксиди, спирти, кетони та карбонові кислоти шляхом окиснення молекулярним киснем – важлива реакція в хімічній промисловості.</p>

<p style="text-align: center;"><b>Теми</b></p>	<p style="text-align: center;"><b>Змістовий модуль 2. Каталіз в окисненні органічних сполук .</b></p> <p><b>Тема 3.</b> Каталіз рідиннофазного окиснення солями перехідних металів за допомогою таких реагентів як кисень, пероксид водню або трет-бутилгідропероксид – ефективний спосіб введення функціональних груп і, таким чином, функціоналізації насичених і ненасичених вуглеводнів..</p> <p><b>Тема 4.</b> Каталіз рідиннофазного окиснення металевими Co, Mn, Ag. Метали і сплави металів як індивідуальні, без підкладок, металеві сітки або решітки як каталізатори у екзотермічних реакціях, які вимагають малої висоти шарів каталізатора. Сітки платини–родію для окиснення аміаку в азотну кислоту і срібні сітки для окиснення метану до формальдегіду.</p>
<p style="text-align: center;"><b>Підсумковий контроль, форма</b></p>	<p style="text-align: center;">Усний іспит</p>
<p style="text-align: center;"><b>Необхідне обладнання</b></p>	<p>Методичне забезпечення:</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Робоча програма навчальної дисципліни.</li> <li>2. Навчальні посібники, монографії, наукові статті.</li> <li>3. Документація до програмного забезпечення.</li> </ol>

<p style="text-align: center;"><b>Навчальні методи та техніки, які будуть використовуватися під час викладання дисципліни</b></p>	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Пояснювально-ілюстративний метод або інформаційно-рецептивний: <ul style="list-style-type: none"> <li>• аспіранти одержують знання на лекції, з навчальної або методичної літератури, через екранний посібник в "готовому" виді;</li> <li>• аспіранти сприймають і осмислюють факти, оцінки, висновки й залишаються в рамках репродуктивного (відтворюючого) мислення.</li> </ul> </li> <li>2. Репродуктивний метод: <ul style="list-style-type: none"> <li>• застосування створеної математичної моделі;</li> <li>• діяльність аспірантів носить алгоритмічний характер, тобто виконується за інструкціями, приписаннями, правилами в аналогічних, подібних з показаним зразком ситуаціях;</li> <li>• організовується діяльність аспірантів за кількарізним відтворенням засвоєваних знань. Для цього використовуються різноманітні вправи, лабораторні, практичні роботи, програмований контроль;</li> </ul> </li> <li>3. Частково-пошуковий (або евристичний) метод: <ul style="list-style-type: none"> <li>• полягає в організації активного пошуку рішення висунутих у навчанні (або сформульованих самостійно) пізнавальних завдань;</li> <li>• процес мислення поетапно направляється й контролюється викладачем або самими аспірантами на основі роботи над програмами (у тому числі й комп'ютерними) і навчальними посібниками.</li> </ul> </li> <li>4. Дослідницький метод: <ul style="list-style-type: none"> <li>• проводиться аналіз матеріалу, аналіз постановки проблем і завдань, оцінка отримуваних результатів;</li> <li>• аспіранти самостійно вивчають літературу, джерела, виконують інші дії пошукового характеру;</li> <li>• завдання, які виконуються з використанням дослідницького методу, повинні містити в собі всі елементи самостійного дослідницького процесу (постановку завдання, обґрунтування, припущення, пошук відповідних джерел необхідної інформації, процес рішення завдання);</li> </ul> </li> <li>5. Словесні методи: джерелом знання є усне або друковане слово (розповідь, бесіда, взаємний аналіз даних і ін.)</li> <li>6. Практичні методи: аспіранти одержують знання й уміння, виконуючи практичні дії (пошук в електронних базах даних, вправа, тренування, ).</li> <li>7. Наочні методи: джерелом знань є спостережувані предмети, явища, наочні приклади (комп'ютерна візуалізація даних, ілюстрування, показ).</li> <li>8. Дискусійні методи: елементи дискусії (аналіз проблеми з різних точок зору, зіставлення позицій, навмисного загострення й навіть перебільшення протиріч в досліджуваному матеріалі).</li> </ol>
---	--

**Критерії оцінювання навчальних досягнень аспірантів з дисципліни  
«Гомогенні та гетерогенні каталізатори радикальних процесів»**

<b>Рівень, шкала ECTS, бали</b>	<b>Теоретична підготовка</b>	<b>Практичні вміння і навички</b>
1	2	3
<b>Високий, А, 91* – 100, відмінно – 5</b>	Аспірант має глибокі, міцні і систематичні знання всіх положень наукової методології, може не тільки вільно володіти матеріалом, але й самостійно довести існування певних закономірностей, принципів, використовує здобуті знання і вміння в нестандартних ситуаціях, здатний вирішувати проблемні питання. Відповідь аспіранта відрізняється точністю формулювань, логікою, достатній рівень узагальненості знань	Аспірант самостійно розв’язує типові ситуаційні задачі різними способами, стандартні, комбіновані й нестандартні казуси з наукової методології, здатний проаналізувати й узагальнити отриманий результат. При виконанні індивідуальних завдань та самостійних робіт аспірант дотримується усіх вимог, передбачених програмою курсу. Крім того, його дії відрізняються раціональністю, вмінням оцінювати помилки й аналізувати результати
<b>Вище середнього, Середній В, С, 81 – 90; 71 – 80; дуже добре, добре – 4</b>	Аспірант знає і може самостійно сформулювати основні методологічні підходи, принципи їх застосування, але не завжди може самостійно здійснити критичний аналіз. Аспірант може самостійно застосовувати знання в стандартних ситуаціях, його відповідь логічна, але розуміння не є узагальненим	Аспірант самостійно розв’язує типові (або за визначеним алгоритмом) казуси з наукової методології і завдання, володіє базовими навичками з виконання необхідних логічних операцій та перетворень, може самостійно сформулювати типову задачу за її словесним описом, скласти типову схему та обрати раціональний метод розв’язання, але не завжди здатний провести аналіз і узагальнення результату
<b>Достатній, D, E, 61 – 70, 51 – 60 задовільно, посередньо – 3</b>	Аспірант відтворює основні поняття і визначення курсу, але досить поверхово, не виділяючи взаємозв’язок між ними, може сформулювати з допомогою викладача основні методологічні положення, знає істотні ознаки (засади) основних підходів та їх відмінність, може записати окремі термінологічні дефініції теоретичного положення за словесним формулюванням і навпаки; допускає помилки, які повною мірою самостійно виправити не може	Аспірант може розв’язати найпростіші типові задачі за зразком, виявляє здатність виконувати основний елементарний аналіз конкретних наукових методів, але не спроможний самостійно сформулювати задачу за словесним описом і визначити метод її розв’язання. При вирішенні фабули аспірант виконує роботу за зразком, але з помилками; робить висновки, але не розуміє достатньою мірою мету роботи



<p><b>Низький, FX / F 1 – 51, незадовільно – 2</b></p>	<p>Відповідь аспіранта при відтворенні навчального матеріалу елементарна, фрагментарна, зумовлена нечіткими уявленнями про закони і методи. У відповіді цілком відсутня самостійність. Аспірант знайомий лише з деякими основними поняттями та визначеннями курсу, з допомогою викладача може сформулювати лише деякі основні положення теорії (рис, принципи)</p>	<p>Аспірант знає основні терміни та вміє розрізняти окремі закономірності. Вміє розв'язувати задачі лише на відтворення основних положень методології, здійснювати найпростіші логічні операції. При вирішенні фабули аспірант вміє користуватися окремими методологічними підходами, але не може самостійно виконати роботу і зробити висновки</p>
--	--	---

Примітка:

\*Відповіді, оцінені до 90 балів, можуть супроводжуватися додатковими питаннями – до 10 балів у сукупності.

**Розподіл балів, що виставляються аспірантам (ПМК – I семестр)**

Модуль I				Модуль II				Самостійна робота	Сума	
Поточний контроль Теми 1–5				Підсумковий контроль Теми 1–5	Поточний контроль Теми 6–9					Підсумковий контроль Теми 6–9
Теми 1–2	Тема 3	Тема 4	Тема 5		Теми 6–7	Тема 8	Тема 9			
5	5	5	5	10	5	5	5	25	30	100

**Шкала переведення академічних успіхів аспірантів  
Відділення ФХГК ІнФОВ ім. Л. М. Литвиненка НАН України  
в шкалу за системою ECTS**

Шкала оцінювання				
Оцінювання за національною шкалою		Оцінювання за шкалою ЄКТС		
Іспит	Залік	Інтервал за шкалою		Оцінювання згідно з ЄКТС
		накопичувальної системи		
відмінно	зараховано	90–100		<b>A</b> відмінно
добре		82–89		<b>B</b> дуже добре
		74–81		<b>C</b> добре
задовільно		64–73		<b>D</b> задовільно
		60–63		<b>E</b> достатньо
незадовільно	не зараховано	35–39		<b>FX</b> незадовільно
		1–34		<b>F</b> неприйнятно