

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования
«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»

УТВЕРЖДАЮ
Директор ИИИПТ

Яковлев А.Н.

«30» 06 2020 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
ПРИЕМ 2019 г.
ФОРМА ОБУЧЕНИЯ очная

Научные основы органического синтеза

Направление подготовки/ специальность	18.04.01 Химическая технология		
Образовательная программа (направленность (профиль))	Химия и технология биологически активных веществ		
Специализация	Химия и технология биологически активных веществ		
Уровень образования	высшее образование - магистратура		
Курс	1	семестр	1
Трудоемкость в кредитах (зачетных единицах)	3		
Виды учебной деятельности	Временной ресурс		
Контактная (аудиторная) работа, ч	Лекции	8	
	Практические занятия	16	
	Лабораторные занятия	24	
	ВСЕГО	48	
Самостоятельная работа, ч		60	
ИТОГО, ч		108	

Вид промежуточной
аттестации

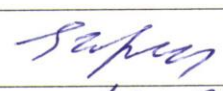
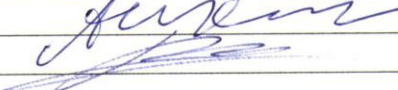
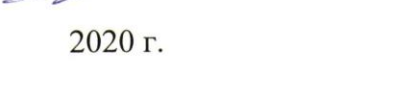
Экзамен

Обеспечивающее
подразделение

НОЦ Н.М.
Кижнера

Руководитель НОЦ Н.М.
Кижнера

Руководитель ООП
Преподаватель

	Краснокутская Е.А.
	Хлебников А.И.
	Филимонов В.Д.

2020 г.

1. Цели освоения дисциплины

Целями освоения дисциплины является формирование у обучающихся определенного ООП (п. 5. Общей характеристики ООП) состава компетенций для подготовки к профессиональной деятельности.

Код компетенции	Наименование компетенции	Составляющие результатов освоения (дескрипторы компетенций)	
		Код	Наименование
ОПК(У)-4	Готовность к использованию методов математического моделирования материалов и технологических процессов, к теоретическому анализу и экспериментальной проверке теоретических гипотез	ОПК(У)-4.B1	Владеет методами анализа конкретного химического процесса (тип реакции, механизм реакции, роль катализатора, влияние растворителя)
		ОПК(У)-4.U1	Умеет проводить оценку влияния заместителей на реакционную способность субстратов с использованием корреляционных уравнений; устанавливать тип химической реакции; выбирать реагенты и условия протекания реакции
		ОПК(У)-4.31	Знает о закономерностях протекания органических реакций; оценки влияния заместителей; классификации реакций и реагентов; теории гомогенного катализа органических реакции; оценки влияния растворителя, основные типы механизмов органических реакций

2. Место дисциплины (модуля) в структуре ООП

Дисциплина относится к базовой части Блока 1 учебного плана образовательной программы.

3. Планируемые результаты обучения по дисциплине

После успешного освоения дисциплины будут сформированы результаты обучения:

Планируемые результаты обучения по дисциплине		Компетенция
Код	Наименование	
РД-1	Применять знания об основных типах механизмов органических реакций и методов их изучения.	ОПК(У)-4
РД-2	Применять экспериментальные и теоретические методы для качественной и количественной оценки влияния строения на реакционную способность органических соединений	ОПК(У)-4
РД -3	Уметь предсказывать качественное и количественное влияние растворителей на скорость и равновесие химической реакции	ОПК(У)-4

Оценочные мероприятия текущего контроля и промежуточной аттестации представлены в календарном рейтинг-плане дисциплины.

4. Структура и содержание дисциплины

Основные виды учебной деятельности

Разделы дисциплины	Формируемый результат обучения по дисциплине	Виды учебной деятельности	Объем времени, ч.
Раздел (модуль) 1. Основные типы механизмов органических реакций и методы их изучения	РД-1	Лекции	3
		Практические занятия	6
		Лабораторные занятия	8
		Самостоятельная работа	20
Раздел (модуль) 2. Экспериментальные и теоретические методы для качественной и количественной оценки влияния строения на реакционную способность органических соединений	РД-2	Лекции	3
		Практические занятия	6
		Лабораторные занятия	10
		Самостоятельная работа	30
Раздел (модуль) 3. Умение предсказывать качественное и количественное влияние растворителей на скорость и равновесие химической реакции	РД-3	Лекции	2
		Практические занятия	4
		Лабораторные занятия	6
		Самостоятельная работа	10

Содержание разделов дисциплины:

Раздел 1. Основные типы механизмов органических реакций и методы их изучения

Рассматриваются механизмы и методы их изучения наиболее важных реакций для органического синтеза. Обсуждаются зависимости между строением и реакционной способностью органических веществ, влияние природы растворителя на механизмы и скорости реакций. Рассматриваются типы катализа и катализаторов – гомогенный общий и специфический кислотно-основной, гетерогенный, межфазовый.

Темы лекций:

1. Энергетический профиль реакции, энтальпия, энтропия и энергия Гиббса, переходные состояния. Постулат Хэммонда. Кинетический и термодинамический контроль органических реакций.
2. Основные методы изучения механизмов органических реакций

Темы практических занятий:

1. Экспериментальные и теоретические методы исследований механизмов органических реакций
2. Механизмы типичных реакций органического синтеза
3. Механизмы типичных реакций органического синтеза

Названия лабораторных работ:

1. Освоение работы программ Gaussian, GausView и HyperChem 1
2. Освоение работы программ Gaussian, GausView и HyperChem 2
3. Освоение работы программ Gaussian, GausView и HyperChem 3
4. Определение параметров строения органических веществ (длины связей, валентные и диэдральные углы) полуэмпирическими квантово-химическими вычислениями с использованием программ Gaussian и HyperChem

Раздел 2. Экспериментальные и теоретические методы для качественной и количественной оценки влияния строения на реакционную способность органических соединений
--

Рассматриваются основы квантовой химии и существующие методы квантово-химических вычислений (полуэмпирические, неэмпирические и методы функционала плотности). Проводится обучение современным программам квантово-химического моделирования строения и свойств органических веществ, определения термодинамических и кинетических параметров органических реакций.

Темы лекций:

1. Использование уравнения Гаммета для интерпретации механизмов органических реакций. Составление корреляционных уравнений, связывающих влияния заместителей на скорости и равновесия органических реакций

Темы практических занятий:

1. Методы количественного определения влияния строения реагентов и субстратов на скорости и равновесия органических реакций
2. Принцип линейного соотношения свободных энергий и уравнение Гаммета
3. Вычисление скоростей и равновесий органических реакций с использованием уравнений Гаммета

Названия лабораторных работ:

1. Определение параметров строения органических веществ (длины связей, валентные и диэдральные углы) неэмпирически и методами функционала плотности с использованием программ Gaussian и HyperChem. Сравнение вычисленных значений с экспериментальными и определение влияний методов вычислений на точности расчетов.
2. Определение спектральных характеристик органических веществ с помощью квантово-химических расчетов
3. Определение термодинамических характеристик органических веществ с помощью квантово-химических расчетов
4. Определение влияний растворителей на структурные, спектральные и термодинамические характеристики органических соединений квантово-химическими методами

Раздел 3. Влияние растворителей на скорость и равновесие химической реакции

1. Вычисления энтальпии, свободной энергии и энтропии органической реакции. Сравнение вычисленных значений с экспериментальными и определение влияний методов вычислений на точности расчетов.
2. Определение строения и энергии переходных состояний органической реакции квантово-химическими методами
3. Определение профиля изменений свободной энергии органической реакции, вычисление константы скорости и термодинамических параметров.
4. Квантово-химическое моделирование кислотно- и основно-катализируемой органической реакции.

5. Организация самостоятельной работы студентов

Самостоятельная работа студентов при изучении дисциплины (модуля) предусмотрена в следующих видах и формах:

- Работа с лекционным материалом, поиск и обзор литературы и электронных источников информации по индивидуально заданной проблеме курса;

- Изучение тем, вынесенных на самостоятельную проработку;
- Подготовка к лабораторным работам, к практическим и семинарским занятиям;
- Исследовательская работа и участие в научных студенческих конференциях, семинарах и олимпиадах;
- Анализ научных публикаций по заранее определенной преподавателем теме;
- Подготовка к оценивающим мероприятиям;

6. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

6.1. Учебно-методическое обеспечение

1. Смит, В. А. Основы современного органического синтеза : учебное пособие / В. А. Смит, А. Д. Дильман. — 5-е изд. — Москва : Лаборатория знаний, 2020. — 753 с. — ISBN 978-5-00101-761-5. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/135517> (дата обращения: 23.06.2020). — Режим доступа: для авториз. пользователей.
2. Реутов, О. А. Органическая химия. 4 ч : учебник / О. А. Реутов, А. Л. Курц, К. П. Бутин. — 3-е изд. — Москва : Лаборатория знаний, 2013. — 726 с. — ISBN 978-5-9963-2276-3. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <https://e.lanbook.com/book/3155> (дата обращения: 29.01.2021). — Режим доступа: для авториз. пользователей.

Дополнительная литература

1. Сайкс, Питер. Механизмы реакций в органической химии : пер. с англ. / П. Сайкс. — Москва: Химия, 1991. — 446 с.: ил.. — ISBN 5724501910.
<http://catalog.lib.tpu.ru/catalogue/simple/document/RU%5CTPU%5Cbook%5C33541>
2. Щербина, Ада Эммануиловна. Органическая химия. Основной курс: учебник / А. Э. Щербина, Л. Г. Матусевич. — Минск; Москва: Новое знание Инфра-М, 2014. — 808 с.: ил.. — Высшее образование. Бакалавриат. — Библиогр.: с. 790-791. — Именной указатель: с. 792-793. — Указатель веществ: с. 794-801. — Указатель терминов и понятий: с. 802-807.. — ISBN 978-5-16-006956-2. — ISBN 978-985-475-551-9.

6.2. Информационное и программное обеспечение

Internet-ресурсы (в т.ч. в среде LMS MOODLE и др. образовательные и библиотечные ресурсы):

1. Introduction to Gaussssian program: https://www.tau.ac.il/~ephraim/Gaussian_manual.pdf
2. Электронно-библиотечная система «Лань» - <https://e.lanbook.com/>
3. Профессиональные базы данных и информационно-справочные системы доступны по ссылке: <https://www.lib.tpu.ru/html/irs-and-pdb>

Лицензионное программное обеспечение (в соответствии с **Перечнем лицензионного программного обеспечения ТПУ**):

1. Microsoft Office 2007 Standard Russian Academic;
2. Document Foundation LibreOffice;
3. Cambridgesoft ChemBio Office 14;
4. Hypercube HyperChem 8.0 Professional;
5. Mozilla Firefox ESR;
6. Google Chrome;
7. Zoom Zoom

7. Особые требования к материально-техническому обеспечению дисциплины

В учебном процессе используется следующее оборудование для лекционных практических и лабораторных занятий:

№	Наименование специальных помещений	Наименование оборудования
1.	Аудитория для проведения учебных занятий всех типов, курсового проектирования, консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации 634034, Томская область, г. Томск, Ленина проспект, д. 43а, 307А	Комплект учебной мебели на 20 посадочных мест; Интерактивная доска IQBoard ET-D AD080 - 1 шт.; Компьютер - 1 шт.; Проектор - 1 шт.
2.	Аудитория для проведения учебных занятий всех типов, курсового проектирования, консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации (компьютерный класс) 634034, Томская область, г. Томск, Ленина проспект, д. 43а, 310	Комплект учебной мебели на 11 посадочных мест; Компьютер - 10 шт.; Принтер - 3 шт.
3.	Для всех дисциплин (модулей), практики, иных видов учебной деятельности, предусмотренных учебным планом образовательной программы. Помещение для самостоятельной работы 634034, Томская область, г. Томск, Белинского улица, 53а, 311	Комплект учебной мебели на 50 посадочных мест Компьютер - 38 шт.; Принтер - 3 шт.; Проектор - 1 шт.,

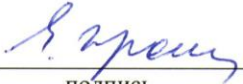
Рабочая программа составлена на основе Общей характеристики образовательной программы по направлению 18.04.01 «Химическая технология» / специализация «Химия и технология биологически активных веществ» (приема 2019 г., очная форма обучения)

Разработчик(и):

Должность	Подпись	ФИО
Профессор НОЦ Н.М. Кижнера		Филимонов В.Д.

Программа одобрена на заседании выпускающего Научно-образовательного центра Н.М. Кижнера (протокол от «26» июня 2019 г. № 4).

Заведующий кафедрой-руководитель
НОЦ Н.М. Кижнера (на правах кафедры),
д.х.н, доцент

 /Краснокутская Е.А./
подпись

Лист изменений рабочей программы дисциплины:

Учебный год	Содержание /изменение	Обсуждено на заседании Отделения / Центра (протокол)
2020/2021 учебный год	1. Изменена форма рабочей программы в соответствии с приказом ТПУ от 06.05.2020 г. № 127-7/об «Об утверждении форм документов ООП». 2. Обновлено программное обеспечение. 3. Обновлен состав профессиональных баз данных и информационно-справочных систем.	от 25.06.2020 г. № 4