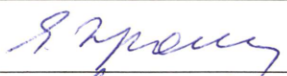


ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ПО ДИСЦИПЛИНЕ
ПРИЕМ 2019 г.
ФОРМА ОБУЧЕНИЯ очная

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		

Руководитель НОЦ Н.М. Кижнера		Краснокутская Е.А.
Руководитель ООП		Хлебников А.И.
Преподаватель		Филимонов В.Д.

2020 г.

1. Роль дисциплины «Научные основы органического синтеза» в формировании компетенций выпускника:

Элемент образовательной программы (дисциплина, практика, ГИА)	Семестр	Код компетенции	Наименование компетенции	Составляющие результатов освоения (дескрипторы компетенций)	
				Код	Наименование
Научные основы органического синтеза	1	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. Показатели и методы оценивания

Планируемые результаты обучения по дисциплине		Код контролируемой компетенции (или ее части)	Наименование раздела дисциплины	Методы оценивания (оценочные мероприятия)
Код	Наименование			
РД-1	Применять знания об основных типах механизмов органических реакций и методов их изучения.	ОПК(У)-4	Раздел 1 - Раздел 6.	ИДЗ, контрольные работы, коллоквиумы, решение задач повышенной сложности
РД-2	Применять экспериментальные и теоретические методы для качественной и количественной оценки влияния строения на реакционную способность органических соединений	ОПК(У)-4	Раздел 1 - Раздел 6.	Защита ИДЗ, контрольные работы, коллоквиумы, решение задач повышенной сложности
РД-3	Уметь предсказывать качественное и количественное влияние растворителей на скорость и равновесие химической реакции	ОПК(У)-4	Раздел 3. Раздел 4.	Защита отчета по лабораторной работе

3. Шкала оценивания

Порядок организации оценивания результатов обучения в университете регламентируется отдельным локальным нормативным актом - «Система оценивания результатов обучения в Томском политехническом университете (Система оценивания)» (в действующей редакции). Используется балльно-рейтинговая система оценивания результатов обучения. Итоговая оценка (традиционная и литерная) по видам учебной деятельности (изучение дисциплин, УИРС, НИРС, курсовое проектирование, практики) определяется суммой баллов по результатам текущего контроля и промежуточной аттестации (итоговая рейтинговая оценка - максимум 100 баллов).

Распределение основных и дополнительных баллов за оценочные мероприятия текущего контроля и промежуточной аттестации устанавливается календарным рейтинг-планом дисциплины.

Рекомендуемая шкала для отдельных оценочных мероприятий входного и текущего контроля

% выполнения задания	Соответствие традиционной оценке	Определение оценки
90%÷100%	«Отлично»	Отличное понимание предмета, всесторонние знания, отличные умения и владение опытом практической деятельности, необходимые результаты обучения сформированы, их качество оценено количеством баллов, близким к максимальному.
70% - 89%	«Хорошо»	Достаточно полное понимание предмета, хорошие знания, умения и опыт практической деятельности, необходимые результаты обучения сформированы, качество ни одного из них не оценено минимальным количеством баллов.
55% - 69%	«Удовл.»	Приемлемое понимание предмета, удовлетворительные знания, умения и опыт практической деятельности, необходимые результаты обучения сформированы, качество некоторых из них оценено минимальным количеством баллов.
0% - 54%	«Неудовл.»	Результаты обучения не соответствуют минимально достаточным требованиям.

Шкала для оценочных мероприятий экзамена

% выполнения заданий экзамена	Экзамен, балл	Соответствие традиционной оценке	Определение оценки
90%÷100%	18 ÷ 20	«Отлично»	Отличное понимание предмета, всесторонние знания, отличные умения и владение опытом практической деятельности, необходимые результаты обучения сформированы, их качество оценено количеством баллов, близким к максимальному
70% - 89%	14 ÷ 17	«Хорошо»	Достаточно полное понимание предмета, хорошие знания, умения и опыт практической деятельности, необходимые результаты обучения сформированы, качество ни одного из них не оценено минимальным количеством баллов.
55% - 69%	11 ÷ 13	«Удовл.»	Приемлемое понимание предмета, удовлетворительные знания, умения и опыт практической деятельности, необходимые результаты обучения сформированы, качество некоторых из них оценено минимальным количеством баллов.
0% - 54%	0 ÷ 10	«Неудовл.»	Результаты обучения не соответствуют минимально достаточным требованиям.

4. Перечень типовых заданий

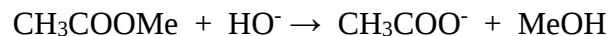
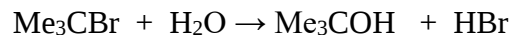
Оценочные мероприятия	Примеры типовых контрольных заданий
1. Контрольная работа	Вопросы: 1. Интермедиаты органических реакций, несущие неспаренные электроны: образование и пути превращений 2. Вклад энтальпии и энтропии в термодинамику органических реакций 3. Кинетический и термодинамический контроль органических реакций. Постулат Хэммонда. 4. Органические реакции, протекающие через стадии переноса электрона (SET reactions)

5. Типы кислотно-основных взаимодействий
6. Кинетические изотопные эффекты и механизмы реакций
7. Обратимые и необратимые реакции ароматического электрофильного замещения. Примеры термодинамически контролируемых реакций этого типа
8. Влияние строения карбонильных соединений на реакционную способность в реакциях присоединения нуклеофилов
9. Тетраэдрические интермедиаты и ацильные карбокатионы в реакциях производных карбоновых кислот
10. Механизмы и реакционная способность в реакциях взаимопревращений карбоновых кислот (карбоновые кислоты, сложные эфиры, амиды)

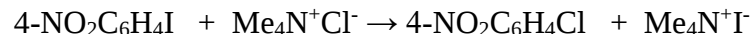
2. Коллоквиум

Вопросы:

1. Значение ρ для щелочного гидролиза метилбензоатов равно 2,38. Объясните это значение
2. CH_3Br , $\text{C}_2\text{H}_5\text{Br}$, изо- $\text{C}_3\text{H}_7\text{Br}$, трет- $\text{C}_4\text{H}_9\text{Br}$ реагируют с иодид-ионом в ацетоне со значениями констант скоростей второго порядка 245000 : 1667 : 13 : 1. Предложите объяснение таких различий.
3. Как будет изменяться скорость следующих реакций при увеличении полярности растворителя?



4. Какой из растворителей (H_2O , Me_2CO , MeCN , Me_2SO) будет в наибольшей степени ускорять, а какой - замедлять данную реакцию:



5. Объясните, почему реакция (a) протекает быстрее, чем (b)



- | | | |
|----|------------------------------------|--|
| 1. | Защита лабораторной работы | <p>6. Выберите среди перечисленных производных бензола вещества, склонные к ипсо-электрофильному замещению: PhCH₃, PhOH, PhNHAc, PhSAc, PhSiMe₃, PhCMe₃, PhNHCH₂Ph. Приведите примеры подобных реакций.</p> <p>Вопросы:</p> <ol style="list-style-type: none">1. Вычисление строения ряда алкенов полуэмпирическими методами AM1 и PM3, и методом Хартри-Фока в базисе 6-31. Сравнение вычисленных геометрических параметров с экспериментальными. Объяснение полученных отличий в длинах связей и валентных углах в зависимости от метода расчета.2. Вычисление строения ряда пиридинов полуэмпирическими методами AM1 и PM3, и методом функционала плотности в базисе 6-31. Сравнение вычисленных геометрических параметров и спектров ИК с экспериментальными. Объяснение полученных отличий в зависимости от метода расчета.3. Вычисление профиля изменений потенциальной энергии реакции нитрования нафталина. Сравнение энергий переходных состояний при альфа- и бета-замещении. |
| 2. | Защита ИДЗ | <p>Вопросы:</p> <ol style="list-style-type: none">1. Опишите экспериментальные и теоретические методы доказательств механизмов реакций электрофильного ароматического замещения.2. Опишите экспериментальные и теоретические методы доказательств механизмов свободно-радикального галогенирования алканов.3. Примеры использования уравнения Гаммета в исследовании механизмов органических реакций.4. Различия квантово-химических вычислений полуэмпирическими, неэмпирическими методами и методами функционала плотности (DFT) |
| 3. | Решение задач повышенной сложности | <p>Примеры задач:</p> <ol style="list-style-type: none">1. Провести квантово-химический расчет методом DFT в базисе 6-31 реакций электрофильного бромирования трет-бутилбензола, определить поверхность потенциальной энергии, соотношение образующихся изомеров, найти в литературе опубликованные результаты этой реакции. Дать интерпретацию степени расхождения вычисленных и экспериментальных результатов.2. Дать объяснения необходимости использования либо констант Гаммета σ, либо констант σ^+ при оценке скоростей реакций электрофильного ароматического замещения. Приведите примеры этих реакций.3. Опишите механизмы сольватации нейтральных молекул и ионных частиц. Различия механизмов и энергий сольватации протонных и апротонных биполярных растворителей. |

4. Приведите примеры общего и специфического катализа реакций гидролиза сложных эфиров. Опишите влияние концентрации кислот, силы кислот и pH среды на механизмы этих реакций. Уравнение Бренстеда.

4. Экзамен

Вопросы:

1. Механизмы реакций электрофильного ароматического замещения. Влияния строения субстратов и реагентов на скорости и равновесия этих реакций.
2. Механизмы реакций электрофильного присоединения к алкенам. Влияния строения субстратов и реагентов на скорости и равновесия этих реакций.
3. Механизмы металлокомплексного катализа и примеры его использования в органическом синтезе.
4. Примеры смены механизмов органических реакций под влиянием растворителей.
5. Возможности и ограничения квантово-химических методов в исследовании реакционной способности и механизмов реакций.

5. Методические указания по процедуре оценивания

Оценочные мероприятия		Процедура проведения оценочного мероприятия и необходимые методические указания
1.	Контрольная работа	Три контрольные работы оцениваются по 10 баллов каждая. Проводятся во время практических занятий.
2.	Коллоквиум	Коллоквиумы по темам «Полуэмпирические квантово-химические методы» и «Неэмпирические квантово-химические методы» проходят во время лабораторных работ. Студенты сначала готовятся к ответу по индивидуальным билетам и затем беседуют с преподавателем и отвечают на дополнительные вопросы.
3.	Защита лабораторной работы	Проходит как собеседование с преподавателем. Оценивается качество проведения эксперимента, оформление отчета и знание теории по теме работы.
4.	Защита ИДЗ	Индивидуальное домашнее задание проверяется преподавателем и при необходимости обсуждается со студентом.
5.	Решение задач повышенной сложности	Решение сложных задач, требующих глубоких знаний и владения логикой проводится во время практических занятий и как дополнительные задания при выполнении контрольных работ.
6.	Экзамен	Студенты сдают экзамен во время сессии по критериям шкалы оценочных мероприятий ТПУ.

КАЛЕНДАРНЫЙ РЕЙТИНГ-ПЛАН ДИСЦИПЛИНЫ 2019/2020 учебный год

ОЦЕНКИ			Дисциплина <i>«Проектирование современных фармацевтических производств»</i> по направлению <u>18.04.01 Химическая технология</u>	Лекции	8	час.
«Отлично»	A	90 - 100 баллов		Практ. занятия	8	час.
				Лаб. занятия	32	час.
«Хорошо»	B	80 – 89 баллов		Всего ауд. работа	48	час.
	C	70 – 79 баллов		CPC	168	час.
«Удовл.»	D	65 – 69 баллов		ИТОГО	216	час.
	E	55 – 64 баллов			6	зе.
Зачтено	P	55 - 100 баллов				
Неудовлетворительно / незачтено	F	0 - 54 баллов				

Результаты обучения по дисциплине:

РД-1	Применять знания об основных типах механизмов органических реакций и методов их изучения.
РД-2	Применять экспериментальные и теоретические методы для качественной и количественной оценки влияния строения на реакционную способность органических соединений
РД -3	Уметь предсказывать качественное и количественное влияние растворителей на скорость и равновесие химической реакции

Оценочные мероприятия:

Для дисциплин с формой контроля - экзамен			
Оценочные мероприятия			Баллы
Текущий контроль:			80
ТК1	Индивидуальное домашнее задание	1	10
ТК2	Контрольная работа	3	30
ТК3	Колоквиум	2	10
ТК4	Выполнение и защита лабораторного практикума	1	30
Промежуточная аттестация:			20
ПА1	Экзамен	1	20
ИТОГО			100

Дополнительные баллы			
Учебная деятельность / оценочные мероприятия			Баллы
ДП1	Решение задач повышенной сложности	10	10
ИТОГО			10

Неделя	Дата начала недели	Результат обучения по дисциплине	Учебная деятельность	Кол-во часов		Оценочное мероприятие	Кол-во баллов	Информационное обеспечение		
				Ауд.	Сам.			Учебная литература	Интернет-ресурсы	Видео-ресурсы
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
1		РД1	Лекция 1. Энергетический профиль реакции, энтальпия, энтропия и энергия Гиббса, переходные состояния. Постулат Хэммонда. Кинетический и термодинамический контроль органических реакций.	2				ОСН 1		
			Лабораторная работа 1. Освоение работы программ Gaussian, GausView и HyperChem 1	2				ОСН 1	ЭР 1	
			Выполнение мероприятий в рамках самостоятельной работы студента:							
			Подготовка к лабораторной работе		1				ЭР 1	
2		РД1	Практика 1. Экспериментальные и теоретические методы исследований механизмов органических реакций	2				ОСН 1		
			Выполнение мероприятий в рамках самостоятельной работы студента:							
			Подготовка к практическому занятию		1			ДОП 1		
3		РД1	Лекция 2. Основные методы изучения механизмов органических реакций	2				ДОП 1		
			Лабораторная работа 2. Освоение работы программ Gaussian, GausView и HyperChem 2	2				ОСН 1	ЭР 1	
			Выполнение мероприятий в рамках самостоятельной работы студента:							
			Подготовка к лабораторной работе		1				ЭР 1	
4		РД1	Практика 2. Механизмы типичных реакций органического синтеза	2				ОСН 1 ДОП 1		
			Выполнение мероприятий в рамках самостоятельной работы студента:							
			Подготовка к практическому занятию		1					
5		РД1 РД2	Лекция 3. Использование уравнения Гаммета для интерпретации механизмов органических реакций. Составление корреляционных уравнений, связывающих влияния заместителей на скорости и равновесия органических реакций	2				ОСН 2 ДОП 1		
			Лабораторная работа 3. Освоение работы программ Gaussian, GausView и HyperChem 3	2				ДОП 1	ЭР 1	
			Выполнение мероприятий в рамках самостоятельной работы студента:							
			Подготовка к лабораторной работе		1			ДОП 1	ЭР 1	
6		РД1 РД2	Практика 3. Механизмы типичных реакций органического синтеза.	2				ОСН 2		
			Выполнение мероприятий в рамках самостоятельной работы студента:							
			Подготовка к контрольной работе №1		6			ОСН 1 ДОП 1		
7		РД2 РД3	Лекция 4. Влияние растворителей на скорость и равновесие химической реакции Контрольная работа №1.	2		ТК2	10	ОСН 2 ДОП 2		
			Лабораторная работа 4. Определение параметров строения органических веществ (длины связей, валентные и диэдральные углы) полуэмпирическими квантово-химическими вычислениями с использованием программ Gaussian и HyperChem	2				ДОП 2	ЭР 1	
			Выполнение мероприятий в рамках самостоятельной работы студента:							
			Подготовка к лабораторной работе		1			ДОП 2	ЭР 1	
8		РД1 РД2 РД3	Практика 4. Методы количественного определения влияния строения реагентов и субстратов на скорости и равновесия органических реакций	2				ОСН 1		
			Выполнение мероприятий в рамках самостоятельной работы студента:							

Неделя	Дата начала недели	Результат обучения по дисциплине	Учебная деятельность	Кол-во часов		Оценочное мероприятие	Кол-во баллов	Информационное обеспечение		
				Ауд.	Сам.			Учебная литература	Интернет-ресурсы	Видео-ресурсы
			Выполнение ИДЗ		10	ТК1	10	ОСН 1 ДОП 1		
9			Конференц-неделя 1							
			Консультации по заданиям							
			Всего по контрольной точке (аттестации) 1				37			
10		РД1 РД2	Практика 5. Методы количественного определения влияния строения реагентов и субстратов на скорости и равновесия органических реакций	2		ТК3	5	ОСН 1 ДОП 1		
			Лабораторная работа 5. 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					ЭР 1	
			Выполнение мероприятий в рамках самостоятельной работы студента:							
			Подготовка к коллоквиуму		6			ОСН 2 ДОП 1		
11		РД2	Лабораторная работа 6. Определение спектральных характеристик органических веществ с помощью квантово-химических расчетов	2				ОСН 2	ЭР 1	
			Выполнение мероприятий в рамках самостоятельной работы студента:							
			Подготовка к лабораторной работе		1			ОСН 2	ЭР 1	
12		РД2	Практика 6. Принцип линейного соотношения свободных энергий и уравнение Гаммета	2						
			Лабораторная работа 7. Определение термодинамических характеристик органических веществ с помощью квантово-химических расчетов	2		ТК2	10	ОСН 2 ДОП 1	ЭР 1	
			Контрольная работа №2.							
			Выполнение мероприятий в рамках самостоятельной работы студента:							
			Подготовка к контрольной работе №2		6			ОСН 2 ДОП 1		
13		РД2 РД3	Лабораторная работа 8. Определение влияний растворителей на структурные, спектральные и термодинамические характеристики органического соединений квантово-химическими методами	2				ОСН 1	ЭР 1	
			Выполнение мероприятий в рамках самостоятельной работы студента:							
			Подготовка к лабораторной работе		1			ОСН 1	ЭР 1	
14		РД3	Практика 7. Вычисление скоростей и равновесий органических реакций с использованием уравнений Гаммета	2		ТК3	5	ОСН 1		
			Лабораторная работа 9. Определение строения и энергии переходных состояний органической реакции квантово-химическими методами	2				ДОП 1	ЭР 1	
			Выполнение мероприятий в рамках самостоятельной работы студента:							
			Подготовка к коллоквиуму		6			ОСН 2		
15		РД3	Лабораторная работа 10. Определение профиля изменений свободной энергии органической реакции, вычисление константы скорости и термодинамических параметров.	2				ОСН 2	ЭР 1	
			Выполнение мероприятий в рамках самостоятельной работы студента:							
			Подготовка к лабораторной работе		1			ОСН 2		
16		РД1 РД2 РД3	Практика 8. Вычисления энтальпии, свободной энергии и энтропии органической реакции.	2				ОСН 1 ДОП 1		
			Сравнение вычисленных значений с							

Неделя	Дата начала недели	Результат обучения по дисциплине	Учебная деятельность	Кол-во часов		Оценочное мероприятие	Кол-во баллов	Информационное обеспечение		
				Ауд.	Сам.			Учебная литература	Интернет-ресурсы	Видео-ресурсы
			экспериментальными и определение влияний методов вычислений на точности расчетов.							
			Лабораторная работа 11. Квантово-химическое моделирование кислотно- и основно-катализируемой органической реакции.	2				ДОП 1	ЭР 1	
			Выполнение мероприятий в рамках самостоятельной работы студента:							
			Подготовка отчёта по лабораторному практикуму.		11	ТК4	30	ОСН 1 ДОП 1		
17	21.12.2020	РД1 РД3	Лабораторная работа 12. Контрольная работа №3.	2		ТК2	10			
			Выполнение мероприятий в рамках самостоятельной работы студента:							
			Подготовка к контрольной работе №3		6			ОСН 2		
18	28.12.2020		Конференц-неделя 2							
			Подведение итогов курса							
			Всего по контрольной точке (аттестации) 2				80			
		РД1 РД2 РД3	Экзамен			ПА1	20	ОСН 1 ОСН 2 ДОП 1		
			Общий объем работы по дисциплине	48	60		100			

Информационное обеспечение:

№ (код)	Основная учебная литература (ОСН)	№ (код)	Название электронного ресурса (ЭР)	Адрес ресурса
ОСН 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.	ЭР 1	Introduction to Gaussain program:	https://www.tau.ac.il/~ephraim/Gaussian_manual.pdf
ОСН 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.			
№ (код)	Дополнительная учебная литература (ДОП)	№ (код)	Видеоресурсы (ВР)	Адрес ресурса
ДОП 1	Сайкс, Питер. Механизмы реакций в органической химии : пер. с англ. / П. Сайкс. — Москва: Химия, 1991. — 446 с.: ил. — ISBN 5724501910.			
ДОП 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.			

Составил:

«26» июня 2019 г.

 (Филимонов В.Д.)

Согласовано:

Заведующий кафедрой-руководитель
НОЦ Н.М. Кижнера (на правах кафедры)
«26» июня 2019 г.

 (Краснокутская Е.А.)