

МИНОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ  
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

**Аннотированная рабочая программа дисциплины**

**Математические методы в органической химии**

**Специальность – 04.05.01**

**Фундаментальная и прикладная химия**

**Профиль подготовки  
Химическое образование**

**Квалификация (степень) выпускника  
Специалист**

**Форма обучения  
очная**

Томск – 2016

### 1. Код и наименование дисциплины (модуля)

Дисциплина «Математические методы в органической химии» является компонентом Б1.В.ДВ.1.5 вариативной части учебного плана ООП специальности 040501 Фундаментальная и прикладная химия.

### 2. Цель изучения дисциплины (модуля)

**Цель курса:** Развитие понятий, знаний и навыков по органической химии у студентов с учётом количественных оценок электронных, пространственных и сольватационных эффектов. Применение математических методов обработки результатов измерений.

### 3. Год/годы и семестр/семестры обучения.

2 год, 1 семестр.

**4. Общая трудоёмкость дисциплины (модуля)** составляет 3 зачётных единицы, 108 часов, из которых 36 часов составляет контактная работа обучающегося с преподавателем (18 часов – занятия лекционного типа, 18 часов – занятия семинарского типа) 72 часа составляет самостоятельная работа обучающегося.

**5. Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (заполняется в соответствии с картами компетенций)**

Формируемые компетенции (код компетенции, уровень (этап) освоения)	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)
СК-3 - владение методами синтеза, анализа и физико-химического исследования органических веществ	З(СК-3) – I <b>Знать</b> - Константы описывающие количественно электронные, пространственные, сольватационные эффекты. У1 (СК-3) – I <b>Уметь</b> применить константы для описания конкретных химических процессов. Применит математические приёмы обработки результатов измерений. У2 (СК-3) – I <b>Уметь</b> _объяснить протекание химических реакций на основе корреляционного анализа

### 6. Содержание дисциплины (модуля) и структура учебных видов деятельности

#### 6.1. Структура учебных видов деятельности

Наименование разделов и тем	Всего (час.)	Контактная работа (час.)		Само-стоя- тельная работа (час.)
		лекции	семинары консультации	
Количественные закономерности в органической химии. Индуктивный эффект и эффект поля. Уравнение Тафта. $\sigma$ -Константы для индуктивного эффекта и эффекта поля.	10	2	2	6
Мезомерный эффект и эффект прямого полярного сопряжения. Уравнение Гаммета. $\sigma$ -Константы для мезомерных эффектов.	14	2	2	10
Принцип линейности свободной энергии, границы его применения. Уравнения Юкава-Цуна. Многообразие $\sigma$ -констант.	14	2	2	10

Стерические эффекты. Теория графов. Топологические индексы. Ван-дер-Ваальсовы радиусы.	24	2	2	20
Влияние растворителей. Константы для оценки солевых эффектов.	14	2	2	10
Математическое обоснование корреляционного анализа. Проверка условий для проведения корреляционного анализа.	32	8	8	16
Итого	108	18	18	72

## 6.2. Содержание дисциплины

Количественные закономерности в органической химии. Физический смысл электронных эффектов. Индуктивные эффекты: индуктивный эффект и эффект поля. Свойства эффектов. Уравнение Тафта. Аддитивность индуктивного эффекта. Трансмиссионный коэффициент.  $\sigma$ -Константы для описания полярного эффекта -  $\sigma_I$   $\sigma_N$  – константы.

Мезомерные эффекты: мезомерный эффект и эффект прямого полярного сопряжения. Свойства мезомерных эффектов. Уравнение Гаммета. Константы Брауна. Нуклеофильные и электрофильные константы. Уравнение Юкава-Цуна. Применение  $\sigma$ -констант Гамета для описания свойств полициклических ароматических систем: дифенил, терфенилы, нафталин, антрацен, фенантрен. Проблема *орто*-заместителей.

Применение корреляционного анализа к описанию физических, физико-химических и химических свойств органических соединений: возможности и ограничения. Примеры применения корреляционного анализа для описания физических, физико-химических и химических свойств. Принцип линейности свободной энергии. Уравнение Дьюара-Грисдейла.

Пространственные эффекты. Ван-дер-Ваальсовы радиусы и их использование. Топологические индексы. Топология, элементы теории графов. Матрица расстояний и матрица связности. Информационные индексы. Применение топологических индексов в химии.

Нуклеофильные константы. Уравнение Свена-Скотта. Уравнение Эдвардса.

Количественный учёт влияния среды. Классификация растворителей. Константы растворителей. Примеры применения констант растворителей для изучения механизмов органических реакций.

Численная обработка результатов наблюдений: интегрирование, численное дифференцирование и сглаживание. Проверка условий для проведения корреляционного анализа.

## 6.3. Форма промежуточной аттестации:

Зачёт.

## 7. Ресурсное обеспечение: в соответствии со списком, переданным в НБ

### 11.1. Список основной литературы

1. Реутов О. А. Органическая химия Ч. 1-4. [учебник для вузов по направлению и специальности “Химия”]. / О.А. Реутов, А.А. Курц, К.П. Бутин. – М.: БИНОМ. Лаб. знаний. 2007-2014.
2. Шабаров Ю.С. Органическая химия. – М.: Лань, 2011. - 566 с.
1. Прялкин Б.С. Теоретические основы органической химии. / Б.С. Прялкин / Томск. гос. ун-т. – Томск, 2017. Вып. 5. Топологические индексы. 40 с. (Пособие подготовлено для печати, включено в план печати на 2017 г.).

### 11.2. Список дополнительной литературы

1. Марч Дж. Органическая химия. – М.: Мир, 1987. Т. 1. С. 129-215.
2. Терней А. Современная органическая химия. – М.: Мир, 1981. В 2-х томах.
3. Ингольд К.К. Теоретические основы органической химии. – М.: Мир, 1973. 1055 с.
4. Кери Ф. Углублённый курс органической химии. В 2-х кн. / Ф. Кери, Р. Сандберг. – М.:

- Химия, 1981.
5. Днепровский А.С. Теоретические основы органической химии. / А.С. Днепровский, Т.И. Темникова. – Л.: Химия, 1991. 560 с.
  6. Прялкин Б.С. Применение ЭВМ в лабораторном практикуме по физико-химическим методам исследования органических соединений: методические указания. /Б.С. Прялкин. /Томск. гос. ун-т им. В.В. Куйбышева. - Томск, 1986. Вып. 4. Определение адиабатических потенциалов ионизации органических соединений из электронных спектров молекулярных комплексов. 30 с.
  7. Айвазян С.А. Статистическое исследование зависимостей. – М.: Металлургия, 1968. – 227 с.
  8. МУ 6/113-30-19-83. Нормируемые показатели точности измерений в методиках выполнения измерений, регламентированных в документах на химическую продукцию: Утв. Минхимпромом СССР 15.08.1983 и Министерством по производству удобрений 09.08.1983. – Черкассы, ОНИИТЭХим, 1985. – 65 с.
  9. Скатецкий В.Г. Математические методы в химии / В.Г. Скатецкий. – Минск: Тетра-Системс, 2006. 368 с.

### *11.3. Список электронных ресурсов*

1. Издательство «Лань» [Электронный ресурс]: электрон.-библиотечная система. – Электрон. дан. – СПб, 2010-. – URL: <http://e.lanbook.com/>
2. Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU [Электронный ресурс]. – Электрон. дан. – М., 2000-. – URL: <http://elibrary.ru/defaultx.asp?>
3. Научная библиотека Томского государственного университета [Электронный ресурс] / НИ ТГУ, Научная библиотека ТГУ. – Электрон. дан. – Томск, 1997-. – URL: <http://www.lib.tsu.ru/ru>
4. Google Scholar [Electronic resource] / Google Inc. – Electronic data. – [S. l. : s. n.]. – URL: <http://scholar.google.com/>

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО с учётом рекомендаций и ПрООП ВПО по направлению 04.04.01- Химия.

### **8. Преподаватель (преподаватели).**

Автор, кандидат химических наук, доцент кафедры органической химии Б.С Прялкин.