

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

**Аннотированная рабочая программа дисциплины
Математические методы в органической химии**

Направление подготовки
04.04.01 Химия

Магистерская программа
Фундаментальная и прикладная химия веществ и материалов

Квалификация (степень) выпускника
Магистр

Форма обучения
очная

Томск – 2016

1. Код и наименование дисциплины Б1.В.ДВ.4.3 Математические методы в органической химии

2. Цель изучения дисциплины: 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 и семестр обучения: 2 год, 3 семестр.

4. Общая трудоемкость дисциплины 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, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы

Формируемые компетенции (код компетенции, уровень (этап) освоения)	Планируемые результаты обучения по дисциплине
ПК-2, II уровень Владение теорией и навыками практической работы в избранной области химии	З(ПК-2) – II <i>Знать</i> константы описывающие количественно электронные, пространственные, сольватационные эффекты. У (ПК-2) – II <i>Уметь</i> применить константы для описания конкретных химических процессов. Применит математические приёмы обработки результатов измерений.
СПК-4, II уровень способность проводить направленный синтез органических соединений с полезными свойствами и исследовать структуру и реакционную способность органических соединений	У (СПК-4) – II <i>Уметь</i> объяснить протекание химических реакций на основе корреляционного анализа

6. Содержание дисциплины и структура учебных видов деятельности

6.1. Структура учебных видов деятельности

Наименование разделов и тем	Всего (час.)	Контактная работа (час.)		Самостоятельная работа (час.)
		лекции	практические занятия	
Количественные закономерности в органической химии. Индуктивный эффект и эффект поля. Уравнение Тафта. σ -Константы для индуктивного эффекта и эффекта поля.	10	2	2	6
Мезомерный эффект и эффект прямого полярного сопряжения. Уравнение Гаммета. σ -Константы для мезомерных эффектов.	14	2	2	10
Принцип линейности свободной энергии, границы его применения. Уравнения Юкава-Цуна. Многообразие σ -констант.	14	2	2	10
Стерические эффекты. Теория графов. Топологические индексы. Ван-дер-Ваальсовы	24	2	2	20

радиусы.				
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. σ -Константы для описания полярного эффекта - σ_I σ_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 σ -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

7.1. 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.

7.2. Список дополнительной литературы

Марч Дж. Органическая химия. – М.: Мир, 1987. Т. 1. С. 129-215.

1. Терней А. Современная органическая химия. – М.: Мир, 1981. В 2-х томах.

2. Ингольд К.К. Теоретические основы органической химии. – М.: Мир, 1973. 1055 с.

3. Кери Ф. Углублённый курс органической химии. В 2-х кн. / Ф. Кери, Р. Сандберг. – М.: Химия, 1981.

4. Днепровский А.С. Теоретические основы органической химии. / А.С. Днепровский, Т.И. Темникова. – Л.: Химия, 1991. 560 с.

5. 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.

6. Айвазян С.А. Статистическое исследование зависимостей. – М.: Metallurgia, 1968. – 227 с.

7. 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.

8. Скатецкий В.Г. Математические методы в химии / В.Г. Скатецкий. – Минск: Тетра-Системс, 2006. 368 с.

7.3. 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/>

8. Автор программы: Прялкин Борис Сергеевич, канд. хим. наук, доцент кафедры органической химии ХФ ТГУ.