

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Тверской государственный технический университет»
(ТвГТУ)

УТВЕРЖДАЮ

Проректор по НИИД

А.А. Артемьев

2022 г.



РАБОЧАЯ ПРОГРАММА

дисциплины образовательного компонента
«Технология органических веществ»

Научная специальность подготовки научных и
научно-педагогических кадров в аспирантуре
2.6.10. Технология органических веществ

Форма обучения – очная.

Химико-технологический факультет.

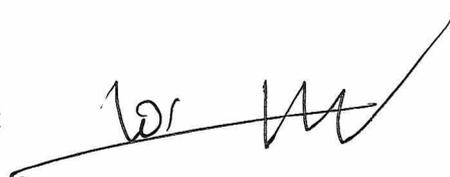
Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации».

Семестры 6, 7.

Тверь 2022

Рабочая программа дисциплины соответствует ОХОП подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре в части требований к результатам обучения по дисциплине и учебному плану.

Разработчик программы:
д.т.н., профессор кафедры БХС



Ю.Ю. Косивцов

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры БХС
«29» августа 2022 г., протокол № 1.

Заведующий кафедрой БХС



М.Г. Сульман

Согласовано
Начальник отдела аспирантуры
и докторантуры



О.И. Туманова

Начальник отдела
комплектования
зональной научной библиотеки



О.Ф. Жмыхова

1. Цели и задачи дисциплины

Целью дисциплины является углубленное изучение теоретических и методологических основ тонкого органического синтеза, химической технологии и механизмах органических реакций.

Задачами дисциплины являются:

- формирование способности к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач;
- углубленное изучение основ органического синтеза;
- формирование представления о теоретических основах химической технологии органических веществ;
- развитие и закрепление навыков профессиональной деятельности исследователя, способного адекватно решать исследовательские и практические задачи в своей профессиональной деятельности;
- приобретение навыков анализа и интерпретации данных, полученных в процессе исследований.

2. Место дисциплины в структуре ОП

Дисциплина относится к Компоненту 2 ОП ВО «Образовательный компонент» в соответствии с приказом Министерства науки и высшего образования Российской Федерации от 20.10.2021 № 951 «Об утверждении федеральных государственных требований к структуре программ подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре (адъюнктуре), условиям их реализации, срокам освоения этих программ с учетом различных форм обучения, образовательных технологий и особенностей отдельных категорий аспирантов (адъюнктов)» (Зарегистрирован в Минюсте РФ 23.11.2021 № 65943).

Приобретенные знания в рамках данной дисциплины необходимы для подготовки к сдаче кандидатского экзамена, а также при подготовке к итоговой аттестации.

Промежуточная аттестация осуществляется в 6 и 7 семестрах.

3. Планируемые результаты обучения

3.1 Компетенции, закрепленные в ОХОП:

ОК-5: готов к преподавательской деятельности по основным образовательным программам высшего образования.

3.2. Показатели достижения компетенций:

Знать:

31.1. Современные направления развития органического синтеза с теоретической и практической точек зрения;

31.2. Основные процессы органического синтеза;

31.3. Основы технологии органического синтеза.

Уметь:

У1.1. Выбирать метод и технологическую схему получения органических веществ.

У1.2. Использовать основные методы трактовки, графического представления и анализа полученных экспериментальных данных.

3.3. Технологии, обеспечивающие формирование компетенций

Проведение лекционных и практических занятий, самостоятельная работа под руководством преподавателя.

3. Трудоемкость и виды учебной работы

Таблица 1. Распределение трудоемкости по видам учебной работы

Вид учебной работы	Зачетные единицы	Академические часы
6 семестр		
Общая трудоемкость	2	72
Аудиторные занятия (всего)		
В том числе:		
Лекции		16
Практические занятия (ПЗ)		16
Лабораторные работы (ЛР)		не предусмотрены
Самостоятельная работа обучающихся (всего)		40
В том числе:		
Курсовая работа		не предусмотрена
Курсовой проект		не предусмотрен
Расчетно-графические работы		не предусмотрены
Реферат		не предусмотрен
Другие виды самостоятельной работы: - подготовка к практическим занятиям		30
Текущий контроль успеваемости и промежуточная аттестация (зачет)		10
7 семестр		
Общая трудоемкость	3	108
Аудиторные занятия (всего)		
В том числе:		
Лекции		16
Практические занятия (ПЗ)		16
Лабораторные работы (ЛР)		не предусмотрены
Самостоятельная работа обучающихся (всего)		40
В том числе:		
Курсовая работа		не предусмотрена
Курсовой проект		не предусмотрен
Расчетно-графические работы		не предусмотрены
Реферат		не предусмотрен
Другие виды самостоятельной работы: - подготовка к практическим занятиям		40
Текущий контроль успеваемости и промежуточная аттестация (экзамен)		36

5. Структура и содержание дисциплины

5.1. Структура дисциплины

Таблица 2. Модули, трудоемкость в часах и виды учебной работы

№	Наименование модуля	Труд-ть часы	Лекции	Практич. занятия	Лаб. работы	Сам. работа
6 семестр						
1	Теоретические основы органической химии и механизмы реакций органических соединений	22	6	6	-	10
2	Методы получения органических соединений	50	10	10	-	30
	6 семестр	72	16	16	-	40
7 семестр						
3	Принципы технологии органического синтеза	27	4	4	-	10+9(экз)
4	Физико-химические основы процессов органического синтеза	27	4	4	-	10+9(экз.)
5	Химические реакторы для процессов органического синтеза	27	4	4	-	10+9(экз.)
6	Теоретические основы и практика использования разделительных и реакционно-массообменных процессов в промышленности органического синтеза	27	4	4	-	10+9(экз.)
	7 семестр	108	16	16	-	40+36(экз)
Всего		180	32	32	-	80+36(экз)

5.2. Содержание дисциплины

МОДУЛЬ 1. «ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ ОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ И МЕХАНИЗМЫ РЕАКЦИЙ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ»

Определение понятия «механизм реакции». Факторы, от которых зависит осуществление элементарного акта между реагирующими частицами: электронные (возникновение реакционных центров) и пространственные (доступность реакционных центров).

Квантово-химические расчеты реакционной способности. Анализ реакционной способности органических соединений с помощью методов МО.

Классификация реагентов. Нуклеофильные, электрофильные и радикальные реагенты. Их особенности и основные типы.

Классификация реакций. Классификация по химическому характеру (реакции замещения, присоединения, отщепления, молекулярные перегруппировки) и по характеру изменения связей.

Реакции замещения. Общая характеристика. Особенности ароматических соединений. Правило Хюккеля. Ароматические карбокатионы и карбоанионы. Гетероциклические соединения.

Электрофильное замещение; σ - и π -комплексы. Механизм и кинетика реакций электрофильного замещения. Ориентация при электрофильном замещении. Влияние заместителей на распределение электронной плотности в основном и переходном состояниях. Относительная константа скорости. Пространственное влияние заместителей.

Нуклеофильное замещение. Особенности нуклеофильного замещения у ненасыщенного и насыщенного атомов углерода. Особенности реакций нуклеофильного замещения в ароматических соединениях.

Механизм реакций – мономолекулярный, бимолекулярный (присоединение–отщепление), ариновый, ионрадикальный. Радикальное замещение. Механизм реакции. Влияние различных факторов. Соотношение изомеров. Образование и устойчивость радикалов. Радикальные реакции, протекающие по цепным механизмам.

Реакции присоединения. Общая характеристика. Реакции нуклеофильного, электрофильного и радикального присоединения. Правило Марковникова и эффект Караша.

Реакции отщепления (элиминирования). Общая характеристика. Бимолекулярное и мономолекулярное отщепление.

МОДУЛЬ 2. «МЕТОДЫ ПОЛУЧЕНИЯ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ»

Галогенирование. Прямое галогенирование, основные методы и их сравнительная оценка. Использование галогенводородов, механизм и региоспецифичность реакции. Применение серо- и фосфорорганических галоидных соединений. Замена атома галогена на другие атомы и группы. Замена на гидроксильную группу, циан-группу и др.

Сульфирование. Введение сульфогруппы в алифатические и ароматические соединения. Сульфохлорирование. Сульфамиды, их получение и свойства. Сульфаниламидные препараты. Замена сульфогруппы на другие атомы и группы.

Нитрование. Введение нитрогруппы в алифатические и ароматические соединения. Реагенты, условия проведения реакции. Превращения нитрогруппы. Примеры использования реакции нитрования в синтезе биологически активных соединений.

Нитрозирование. Реагенты и условия проведения реакции. Применение реакции нитростворения, синтез пирамидона и анальгина. Нитростворение по атому азота. Диазометан и диазопарафины.

Диазотирование. Механизм реакции и условия проведения. Свойства диазосоединений, их анализ. Реакции азосочетания. Использование реакций азосочетания. Превращения диазогруппы. Синтез пиразолонов.

Деаминация, способ Грисса и новые модификации. Реакция Зандмейера. Замена диазогруппы на другие заместители.

Окисление. Общие закономерности. Реакции окисления по атому углерода. Окисление металлных и метиленовых групп до первичных и вторичных спиртов, альдегидов и кетонов, карбоновых кислот. Наиболее распространенные реагенты, условия проведения реакций. Реакции окисления и каталитического дегидрирования. Окисление кратных связей углерод–углерод. Реагенты для окисления двойных и тройных связей. Расщепление гликолей. Окислительное расщепление вторичных спиртов и кетонов.

Восстановление. Типы реакций восстановления. Гидрирование. Катализаторы, их получение и свойства. Гидрогенолиз. Образование новых связей при гидрировании. Реакции восстановления в результате передачи гидрид-иона. Нуклеофильные гидриды. Комплексные гидриды. Примеры восстановления. Восстановление с помощью металлоорганических соединений. Реактивы Гриньяра. Восстановление под действием металлов (Na, Mg, Zn). Условия проведения реакций, механизм, стереохимия.

Окислительно-восстановительные реакции. Реакции Оппенгауэра-Мейервейна-Пондорфа. Условия проведения и механизм. Реакция Канниццаро-Тищенко.

Реакции элементоорганических соединений (ЭОС). Классификация ЭОС. Методы синтеза и свойства. Особенности магний-, цинк-, кадмий-, алюминий-, литийорганических соединений. Использование ЭОС в тонком органическом синтезе. Способы получения ртути-, мышьяк- и фосфорорганических соединений. Их применение в химии биологически активных соединений. Соединения бора. Способы получения и реакции.

Ацилирование. Реакция Фриделя-Крафтса, условия проведения. Примеры использования в химии биологически активных соединений.

Формилирование ароматических соединений. Реакция Вильсмейера. Условия проведения, реагенты.

Фосфорилирование. Реакции фосфорилирования при создании моно-, ди- и триэфиров ортофосфорной кислоты. Механизм образования. Возможные побочные реакции. Стратегия синтеза. Методы активации фосфорной кислоты. Хлорфосфатный метод, использование смешанных ангидридов фосфорных кислот, дициклогексилкарбодиимидный метод, реакции с использованием фосфатинов. Достоинства и ограничения методов.

Использование защитных групп в тонком органическом синтезе и химии биологически активных соединений. Защиты С–Н-связей в ацетиленовых и ароматических соединениях. Защита N–H связей. Образование новой N–С-связи. Производные уретанового синтеза. Алкильные и арильные производные. Силильные

защиты. Защиты гидроксильной группы. Защиты карбоксильной группы. Способы получения различных эфиров, их устойчивость и методы деблокирования. Защита тиолов путем введения защитных групп за счет модификации сульфгидрильного заместителя. Методы защиты альдегидов и кетонов. Защита кратных углерод-углеродных связей.

Реакции конденсации. Типы реакций. Взаимодействие карбонильных соединений с С–Н-кислотами. Получение аминокислот по Штреккеру Альдольно-кратоновая конденсация. Условия проведения. Реакции Кневенагеля, Перкина и др. Синтез глицидных эфиров по Дарзану. Сложноэфирная кляйзеновская конденсация. Реакция Михаэля, использование в химии природных соединений. Реакция Манниха. Реакция Виттига, реагенты, условия проведения, регио- и стереоспецифичность. Реакция Дильса-Альдера. Конденсация Дэкина-Веста, Арндта-Эйстера. Реакция Кнорра. Конденсация Бишлера-Напиральского.

Перегруппировки. Классификация перегруппировок. Реакции, протекающие при образовании заряда, не сопряженного с кратными связями. Миграция углеродного остатка от атома углерода к другому атому углерода. Нуклеофильные и электрофильные перегруппировки. Образование положительного заряда на атоме углерода за счет поляризации двойной связи, отщепления галогена, гидроксила, диазогруппы. Положительный заряд на атоме азота, способы образования. Перегруппировки при образовании заряда на кислороде. Перегруппировки аллильного типа. Радикальные, нуклеофильные и электрофильные перегруппировки. Перенос остатка с углерод на углерод, с гетероатома на углерод.

Использование новых реагентов в тонком органическом синтезе. Реагенты на полимерных носителях, их применение и преимущества. Межфазный катализ с использованием гетерофазных реагентов. Краун-эфиры. Примеры использования новых реагентов в химии природных соединений.

МОДУЛЬ 3. «ПРИНЦИПЫ ТЕХНОЛОГИИ ОРГАНИЧЕСКОГО СИНТЕЗА»

Основные направления развития органического синтеза (ОС) как отрасли. Специфика и системные закономерности этой отрасли. Экологическая характеристика отрасли и ее отдельных производств. Проблемы, стоящие перед отраслью органического синтеза. Общие подходы к созданию безотходных энергосберегающих производств и перспективы развития последних. Ключевые принципы, используемые при создании безотходных производств и их классификация.

Методологические принципы. Роль системного подхода в создании безотходных производств.

Химические принципы. Создание малостадийных химических производств. Разработка методов получения продуктов из доступного и дешевого сырья. Разработка высокоэффективных процессов. Применение «сопряженных» методов получения продуктов. Разработка технологий, позволяющих достигать высоких конверсий. Совмещение нескольких реакций, направленных на получение одного и того же целевого продукта.

Технологические принципы. Использование рециркуляции по компонентам и потокам. Применение совмещенных процессов. Полнота выделения продуктов из реакционной смеси. Разработка процессов с низким энергопотреблением. Полнота использования энергии системы. Разработка технологии с минимальным расходом воды и использованием ее кругооборота. Полнота использования газовых потоков и очистка газовых выбросов. Применение аппаратов и технологических линий большой единичной мощности. Применение непрерывных процессов. Полнота использования жидких и твердых отходов. Высокая степень автоматизации. Обеспечение высокой надежности и стабильности работы химико-технологической системы.

Организационные принципы. Особенности применения принципов при создании безотходных производств. Необходимость использования полной совокупности принципов (т.е. системного подхода) для оценки эффективности технологии. Понятие предельно эффективной технологии. Экономическое обоснование безотходной технологии. Алгоритм разработки безотходного производства. Последовательность выбора оптимального варианта безотходной технологии.

МОДУЛЬ 4. «ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ ПРОЦЕССОВ ОРГАНИЧЕСКОГО СИНТЕЗА»

Основы термодинамики химических процессов и фазовых равновесий. Термодинамические закономерности химических и фазовых равновесий для реальных многокомпонентных систем. Характеристические функции, химические потенциалы. Понятие активности и коэффициентов активности, методы их расчета и экспериментального определения для реальных газов и жидкостей (растворов). Принципы расчета фазовых и химических равновесий для реальных многокомпонентных систем и сложных реакций. Закон действия масс. Стехиометрический анализ сложных реакций. Степень завершенности реакции. Термодинамический анализ важнейших реакций органического синтеза (хлорирования, окисления, гидрирования и дегидрирования, гидратации и дегидратации, этерификации и гидролиза, карбонилирования и алкилирования и др.) и выбор условий их проведения.

Математическое моделирование фазовых равновесий жидкость–пар, жидкость–жидкость, жидкость–жидкость–пар, жидкость–твердое тело. Явления азеотропии, хемиазеотропии и полиазеотропии. Предельные законы фазового равновесия (законы Рауля и Дальтона). Анализ статики многофазных реакционных систем с избирательным обменом с внешней средой. Основные понятия термодинамико-топологического анализа структура диаграмм фазового равновесия.

Кинетика, механизм и катализ органических реакций. Активные частицы (промежуточные соединения) в органическом синтезе. Ионы, радикалы, карбены, ион-радикалы, комплексы металлов, металлоорганические соединения. Основы теории реакционной способности органических соединений. Связь кинетики с термодинамикой. Принцип Белла-Эванса-Поляни. Уравнения Бренстеда, Гаммета, Тафта, Поляни-Семенова. Правила отбора элементарных стадий при выдвигении гипотез о механизме реакций.

Гетеролитические и гомолитические механизмы. Нуклеофильные и электрофильные реакции замещения, присоединения и отщепления в органическом синтезе. Кинетика и механизм этих реакций. Влияние среды. Кислотный и основной катализ в гетеролитических реакциях. Протонные и апротонные кислоты. Промышленные катализаторы. Механизм реакций и особенности кинетики процессов гидратации, дегидратации, алкилирования, полимеризации, гидролиза, этерификации, крекинга.

Радикально-цепные процессы в промышленном органическом синтезе. Механизм, инициаторы, катализаторы, ингибиторы. Кинетические модели реакций хлорирования, окисления, пиролиза и полимеризации.

Металлокомплексный катализ в промышленном органическом синтезе. Строение комплексов металлов. Природа и механизм основных стадий каталитических реакций с участием металлокомплексов. Особенности кинетики реакций в случае металлокомплексного катализа. Катализаторы и механизм реакции карбонилирования метанола, процесса оксосинтеза, процессов окисления олефинов кислородом и гидропероксидами, процессов гидрирования и полимеризации, метатезиса олефинов.

Гетерогенный катализ в промышленном органическом синтезе. Катализ металлами, оксидами и полифункциональными катализаторами. Механизм реакций гидрирования, окисления, окислительного аммонолиза, синтезов из CO и H₂. Влияние процессов массообмена на кинетику гетерогенно-каталитических реакций. Кинетика в условиях кинетической, внешне- и внутренидиффузионных областей. Гетерофазные процессы. Особенности кинетики в случае медленных и мгновенных химических реакций с учетом влияния диффузии.

Теоретические основы построения кинетических моделей сложных многомаршрутных реакций органического синтеза. Теория маршрутов. Методы анализа кинетических данных и математического описания состава продуктов и селективности для сложных реакций: последовательных, параллельных, последовательно-параллельных.

МОДУЛЬ 5. «ХИМИЧЕСКИЕ РЕАКТОРЫ ДЛЯ ПРОЦЕССОВ ОРГАНИЧЕСКОГО СИНТЕЗА»

Идеальные реакторы. Основные модели реальных реакторов. Экспериментальное определение структуры потоков и набор моделей химического реактора. Классификация химических реакторов. Особенности использования кинетических моделей химического процесса при построении математических моделей реактора. Принципы расчета размеров реакторов, состава продуктов и селективности по кинетическим данным с учетом модели реактора и уравнений теплового баланса.

Выбор типов реакторов с учетом их производительности, селективности реакций, тепловых и кинетических характеристик процесса. Принципы оптимизации параметров процесса по термодинамическим и кинетическим данным, использование экономических критериев оптимальности. Характеристика конструкций, материальных потоков, теплового режима и выбор варианта технологического оформления реакционного узла для основных гомогенных,

гетерогенно-каталитических и гетерофазных процессов промышленного органического синтеза. Применение реакторов с псевдооживленным слоем контакта, секционированных аппаратов, оптимизация потоков в реакторах. Вопросы утилизации тепла реакций и горячих потоков, энергетический и эксергетический КПД реакторных установок. Реакторы с совмещением химического и разделительного процессов.

МОДУЛЬ 6. «ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ И ПРАКТИКА ИСПОЛЬЗОВАНИЯ РАЗДЕЛИТЕЛЬНЫХ И РЕАКЦИОННО-МАССООБМЕННЫХ ПРОЦЕССОВ В ПРОМЫШЛЕННОСТИ ОРГАНИЧЕСКОГО СИНТЕЗА»

Научные основы типовых методов очистки сырья от вредных примесей и его осушки. Особенности схем подготовки сырья на примере процессов хлорирования, окисления, гидрирования и др.

Научные основы разделения реальных многокомпонентных смесей методами ректификации, экстракции, экстрактивной и азеотропной ректификации, жидкостной экстракции, абсорбции, адсорбции, хемосорбции и др. Принцип перераспределения полей концентраций между областями разделения. Вопросы выбора экстрагентов, экстрактивных и азеотропных агентов, сорбентов: характеристика их разделяющей способности. Основы статики разделительных процессов. Синтез и анализ технологических схем разделения. Разделение полиазеотропных многокомпонентных гомогенных и расслаивающихся смесей. Кинетика тепло- и массопереноса, моделирование разделительной аппаратуры, методы расчета.

Сравнительная оценка и выбор методов разделения многокомпонентных смесей, технологических схем разделения и аппаратуры для них. Оптимизация процессов разделения и технологических схем. Понятие разделительного комплекса функционального действия. Типовые комплексы и схемы переработки и разделения продуктов основного органического синтеза.

Сопоставление совмещенных и рециркуляционных вариантов оформления реакционно-массообменных процессов. Общая стратегия исследования и разработки реакционно-массообменных процессов. Оценка влияния разделения на степень конверсии и селективность химического превращения. Применение анализа статики для выделения оптимальных вариантов организации реакционно-ректификационных процессов.

Методы очистки сточных вод, отходящих газов в промышленности органического синтеза

5.3. Лабораторные работы

Учебным планом лабораторные работы не предусмотрены.

5.4. Практические занятия

Таблица 3. Тематика практических занятий и их трудоемкость

Порядковый номер модуля. Цели практических занятий	Примерная тематика практического занятия	Трудоемкость в часах
Модуль 1 Цель: расширить знания в области механизмов органических реакций	Квантово-химические расчеты реакционной способности. Анализ реакционной способности органических соединений с помощью методов МО. Механизм и кинетика реакций электрофильного замещения. Ориентация при электрофильном замещении. Особенности нуклеофильного замещения у ненасыщенного и насыщенного атомов углерода.	6
Модуль 2 Цель: расширить знания в области методов получения органических веществ	Галогенирование. Сульфирование. Нитрование. Диазотирование. Окисление Восстановление. Ацилирование. Формилирование Использование защитных групп в тонком органическом синтезе и химии биологически активных соединений Реакции конденсации Использование новых реагентов в тонком органическом синтезе	10
Модуль 3 Цель: расширить знания в области технологии органического синтеза	Основные направления развития органического синтеза (ОС) как отрасли. Общие подходы к созданию безотходных энергосберегающих производств и перспективы развития последних. Ключевые принципы, используемые при создании безотходных производств и их классификация.	4
Модуль 4 Цель: расширить знания в области физико-химических основ органического синтеза	Термодинамические закономерности химических и фазовых равновесий для реальных многокомпонентных систем. Стехиометрический анализ сложных реакций. Термодинамический анализ важнейших реакций органического синтеза Математическое моделирование фазовых равновесий жидкость–пар, жидкость–жидкость, жидкость–жидкость–пар, жидкость–твердое тело. Кинетика, механизм и катализ органических реакций. Теоретические основы построения кинетических моделей сложных многомаршрутных реакций органического синтеза.	4

Модуль 5 Цель: расширить знания в области химических реакторов для органического синтеза	Основные модели реальных реакторов. Особенности использования кинетических моделей химического процесса при построении математических моделей реактора. Выбор типов реакторов с учетом их производительности, селективности реакций, тепловых и кинетических характеристик процесса.	4
Модуль 6 Цель: расширить знания в области разделительных и реакционно-массообменных процессов	Особенности схем подготовки сырья на примере процессов хлорирования, окисления, гидрирования и др. Синтез и анализ технологических схем разделения. Оптимизация процессов разделения и технологических схем. Оценка влияния разделения на степень конверсии и селективность химического превращения.	4

6. Самостоятельная работа обучающихся и текущий контроль успеваемости

6.1. Цели самостоятельной работы

Формирование способностей к самостоятельному познанию и обучению, поиску литературы, обобщению, оформлению и представлению полученных результатов, их критическому анализу, поиску новых и неординарных решений, аргументированному отстаиванию своих предложений, умений подготовки выступлений и ведения дискуссий.

6.2. Организация и содержание самостоятельной работы

Самостоятельная работа заключается в проработке отдельных тем курса по заданию преподавателя по рекомендованной им учебной и научной литературе, методическим разработкам кафедры; подготовке докладов и презентации; подготовке к зачету и экзамену.

Тематика самостоятельной работы определяется ведущим преподавателем и имеет профессионально-ориентированный характер и непосредственную связь изучаемых вопросов с последующей профессиональной деятельностью выпускника.

В рамках промежуточной аттестации выполняется подготовка презентации и текста доклада по заданной теме. После вводных лекций, в которых обозначается содержание дисциплины, ее проблематика и практическая значимость, аспирантам выдаются возможные темы докладов в рамках предметной области дисциплины, из которых аспиранты выбирают тему своего доклада, при этом аспирантом может быть предложена и своя тематика. Тематика доклада должна иметь проблемный и профессионально ориентированный характер, требующей самостоятельной творческой работы аспиранта.

7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

7.1. Основная литература

1. Химическая технология лекарственных веществ. Основные процессы химического синтеза биологически активных веществ : учебное пособие : в составе учебно-методического комплекса / А.А. Иозеп [и др.]. - 3-е изд. ; стер. - Санкт-Петербург [и др.] : Лань, 2020. - (Учебники для вузов. Специальная литература) (УМК-У). - ЭБС Лань. - Текст : электронный. - Режим доступа: по подписке. - Дата обращения: 12.09.2022. - ISBN 978-5-8114-2037-7. - URL: <https://e.lanbook.com/book/130488> . - (ID=134195-0)
2. Лебедев, Н.Н. Химия и технология основного органического и нефтехимического синтеза : учебник для хим.-технол. спец. вузов / Н.Н. Лебедев. - 4-е изд. ; перераб. и доп. - М. : Альянс, 2013. - 589 с. - Текст : непосредственный. - ISBN 978-5-91872-035-6 : 750 р. - (ID=99617-2)
3. Тимофеев, В.С. Принципы технологии основного органического и нефтехимического синтеза : учебное пособие для вузов по напр. "Хим. технология и биотехнология" и напр. подгот. дипломир. специалистов по спец. "Хим. технология орган. веществ и топлив" / В.С. Тимофеев, Л.А. Серафимов. - 2-е изд. ; перераб. - Москва : Высшая школа, 2003. - 536 с. - Библиогр. : с. 534 - 536. - ISBN 5-06-004267-7 : 220 р. - (ID=14395-1)
4. Корытцева, А.К. Химические реакторы. Введение в теорию и практику : учебное пособие : в составе учебно-методического комплекса / А.К. Корытцева, В.И. Петьков. - Санкт-Петербург : Лань, 2022. - (Учебники для вузов. Специальная литература) (УМК-У). - ЭБС Лань. - Текст : электронный. - Режим доступа: по подписке. - Дата обращения: 19.08.2022. - ISBN 978-5-8114-3501-2. - URL: <https://e.lanbook.com/book/206207> . - (ID=134188-0)
5. Гумеров, А.М. Математическое моделирование химико-технологических процессов : учебное пособие для вузов по направлениям подготовки "Химическая технология" и "Энерго- и ресурсообеспечивающие процессы в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии" : в составе учебно-методического комплекса / А.М. Гумеров. - 2-е изд. ; перераб. - Санкт-Петербург [и др.] : Лань, 2022. - (Учебники для вузов. Специальная литература) (УМК-У). - ЭБС Лань. - Текст : электронный. - Режим доступа: по подписке. - Дата обращения: 25.07.2022. - ISBN 978-5-8114-1533-5. - URL: <https://e.lanbook.com/book/211445> . - (ID=106016-0)

7.2. Дополнительная литература

1. Ошанина, И.В. Альтернативные методы получения продуктов основного органического синтеза : учебное пособие / И.В. Ошанина, Л.Г. Брук; МИРЭА - Российский технологический университет. - Москва : МИРЭА - Российский технологический университет, 2021. - ЭБС Лань. - Текст : электронный. - Режим доступа: по подписке. - Дата обращения: 09.01.2023. - URL: <https://e.lanbook.com/book/176550> . - (ID=153127-0)
2. Механизмы гетерогенно-каталитических процессов с участием наночастиц палладия : учеб. пособие / Л.Ж. Никошвили [и др.]; Тверской гос. техн.

ун-т. - Тверь : ТвГТУ, 2017. - 79 с. : ил. - Сервер. - Текст : электронный. - ISBN 978-5-7995-0909-5 : 0-00. - URL: <https://elib.tstu.tver.ru/MegaPro/GetDoc/Megapro/122633> . - (ID=122633-1)

3. Механизмы гетерогенно-каталитических процессов с участием наночастиц палладия : учебное пособие для магистров по направлению подготовки 18.04.01 "Химическая технология" и 04.04.01 "Химия" / Л.Ж. Никошвили [и др.]; Тверской гос. техн. ун-т. - Тверь : ТвГТУ, 2017. - 79 с. - Текст : непосредственный. - ISBN 978-5-7995-0909-5 : [б. ц.]. - (ID=123454-75)

4. Матвеева, В.Г. Современные металлополимерные катализаторы : монография : в составе учебно-методического комплекса / В.Г. Матвеева, Э.М. Сульман; Тверской гос. техн. ун-т. - Тверь : ТвГТУ, 2001. - 93 с. : ил. - (УМК-У). - Текст : непосредственный. - ISBN 5-7995-0168-3 : 44 р. - (ID=7480-10)

5. Бухаров, С.В. Химия и технология продуктов тонкого органического синтеза : учебное пособие / С.В. Бухаров, Н.Г. Нугуманова; Казанский национальный исследовательский технологический университет. - Казань : Казанский национальный исследовательский технологический университет, 2013. - ЭБС Лань. - Текст : электронный. - Режим доступа: по подписке. - Дата обращения: 09.01.2023. - ISBN 978-5-7882-1436-8. - URL: <https://e.lanbook.com/book/73483> . - (ID=153128-0)

6. Москвичев, Ю.А. Продукты органического синтеза и их применение : учеб. пособие для вузов по напр. подготовки дипломированных специалистов "Химическая технология органических веществ и топлива" / Ю.А. Москвичев, В.Ш. Фельдблюм. - СПб. : Проспект Науки, 2009. - 376 с. - Текст : непосредственный. - ISBN 978-5-903090-20-4 : 700 р. - (ID=84664-2)

7. Косивцов, Ю.Ю. Применение ЭВМ в химии, химической технологии и биотехнологии : учеб. пособие : в составе учебно-методического комплекса / Ю.Ю. Косивцов, А.И. Сидоров, В.В. Алферов; Тверской гос. техн. ун-т. - Тверь : ТвГТУ, 2005. - 142 с. : ил. - (УМК-У). - Библиогр. : с. 142. - Текст : непосредственный. - ISBN 5-7995-0313-9 : [б. ц.]. - (ID=59422-107)

8. Батунер, Л.М. Процессы и аппараты органического синтеза и биохимической технологии (Методы расчета) / Л.М. Батунер. - Москва ; Ленинград : Химия, 1966. - 520 с. - Текст : непосредственный. - 1 р. 66 к. - (ID=112277-1)

9. Промышленный катализ в лекциях : [сборник]. Вып. 2 : Введение в физическую химию формирования текстуры гетерогенных катализаторов. Кн. 2 / Б.В. Фенелонов, В.А. Пармон. Нанесенные металлические катализаторы / В.А. Семиколенов / под общ. ред. А.С. Носкова. - Москва : Калвис, 2005. - 115 с. - (Коллекция издательства). - Библиогр. в конце лекций. - Текст : непосредственный. - ISBN 5-89530-004-9 : 130 р. - (ID=58978-2)

10. Химические реакторы : учебное пособие : в составе учебно-методического комплекса / Тверской гос. техн. ун-т ; составители: В.Ю. Долуда, А.В. Быков, М.Е. Григорьев, Л.Ж. Никошвили, Э.М. Сульман. - Тверь : ТвГТУ, 2019. - 159 с. : ил. - (УМК-У). - Сервер. - Текст : электронный. - ISBN 978-5-7995-1061-9 : 0-00. - URL: <https://elib.tstu.tver.ru/MegaPro/GetDoc/Megapro/135454> . - (ID=135454-1)

11. Химические реакторы : учебное пособие / Тверской гос. техн. ун-т ; составители: В.Ю. Долуда, А.В. Быков, М.Е. Григорьев, Л.Ж. Никошвили, Э.М. Сульман. - Тверь : ТвГТУ, 2019. - 159 с. - Текст : непосредственный. - ISBN 978-5-7995-1061-9 : [б. ц.]. - (ID=135604-75)

7.3 Методические материалы

1. Методы тонкого органического синтеза. Металлорганические соединения переходных металлов : метод. указ. к самост. работе по курсу "Методы тонкого орган. синтеза" для магистрантов спец. 580800 "Хим. технология и биотехнология" : в составе учебно-методического комплекса. Ч. 1 / Тверской гос. техн. ун-т, Каф. БТиХ ; сост. Т.И. Самсонова. - Тверь : ТвГТУ, 2009. - (УМК-У). - Дискета. - Сервер. - Текст : электронный. - 0-00. - URL: <https://elib.tstu.tver.ru/MegaPro/GetDoc/Megapro/79251> . - (ID=79251-2)

2. Учебно-методический комплекс дисциплины, в том числе элективных, факультативных дисциплин и направленных на подготовку к сдаче кандидатских экзаменов образовательного компонента "Технология органических веществ". Научная специальность подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре 2.6.10. - Технология органических веществ : ФГОС 3++ / сост.: Ю.Ю. Косивцов ; Каф. Биотехнология, химия и стандартизация. - 2022. - (УМК). - Текст : электронный. - URL: <https://elib.tstu.tver.ru/MegaPro/GetDoc/Megapro/157493> . - (ID=157493-0)

7.4 Программное обеспечение дисциплины

1. Операционная система Microsoft Windows: лицензии № ICM-176609 и № ICM-176613 (Azure Dev Tools for Teaching).
2. Microsoft Office 2019 Russian Academic: OPEN No Level: лицензия № 41902814.

7.5. Специализированные базы данных, справочные системы, электронно-библиотечные системы, профессиональные порталы в Интернет

ЭБС и лицензионные ресурсы ТвГТУ размещены:

1. Ресурсы: <https://lib.tstu.tver.ru/header/obr-res>
2. ЭКТвГТУ: <https://elib.tstu.tver.ru/MegaPro/Web>
3. ЭБС "Лань": <https://e.lanbook.com/>
4. ЭБС "Университетская библиотека онлайн": <https://www.biblioclub.ru/>
5. ЭБС «IPRBooks»: <https://www.iprbookshop.ru/>
6. Электронная образовательная платформа "Юрайт" (ЭБС «Юрайт»): <https://urait.ru/>
7. Научная электронная библиотека eLIBRARY: <https://elibrary.ru/>
8. Информационная система "ТЕХНОРМАТИВ". Конфигурация "МАКСИМУМ" : сетевая версия (годовое обновление): [нормативно-технические, нормативно-правовые и руководящие документы (ГОСТы, РД, СНИПы и др.). Диск 1,2,3,4. - М. :Технорматив, 2014. - (Документация для профессионалов). - CD. - Текст : электронный. - 119600 р. – (105501-1)
9. База данных учебно-методических комплексов: <https://lib.tstu.tver.ru/header/umk.html>

УМК размещен: <https://elib.tstu.tver.ru/MegaPro/GetDoc/Megapro/157493>

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины

При изучении дисциплины «Физическая химия» используются современные средства обучения, возможна демонстрация лекционного материала с помощью проектора. Аудитория для проведения лекционных и практических занятий оснащена современной компьютерной и офисной техникой, необходимым программным обеспечением, электронными учебными пособиями и законодательно-правовой поисковой системой, имеющий выход в глобальную сеть.

9. Оценочные средства для проведения промежуточной аттестации

9.1. Оценочные средства для проведения промежуточной аттестации в форме экзамена

1. Экзаменационный билет соответствует форме, утвержденной Положением о рабочих программах дисциплин и в соответствии с приказом Министерства науки и высшего образования Российской Федерации от 20.10.2021 № 951 «Об утверждении федеральных государственных требований к структуре программ подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре (адъюнктуре), условиям их реализации, срокам освоения этих программ с учетом различных форм обучения, образовательных технологий и особенностей отдельных категорий аспирантов (адъюнктов)» (Зарегистрирован в Минюсте РФ 23.11.2021 № 65943).

Число экзаменационных билетов – 10. Число вопросов (заданий) в экзаменационном билете – 3 (1 вопрос для категории «знать» и 2 вопроса для категории «уметь»).

Продолжительность экзамена – 60 минут.

2. Шкала оценивания промежуточной аттестации в форме экзамена – «отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно».

3. Критерии оценки за экзамен:

для категории «знать»:

выше базового – 2;

базовый – 1;

ниже базового – 0;

критерии оценки и ее значения для категории «уметь»:

отсутствие умения – 0 баллов;

наличие умения – 2 балла.

«отлично» - при сумме баллов 5 или 6;

«хорошо» - при сумме баллов 4;

«удовлетворительно» - при сумме баллов 3;

«неудовлетворительно» - при сумме баллов 0, 1 или 2.

4. Вид экзамена – письменный экзамен, включающий решение задач с использованием справочного материала и непрограммируемого калькулятора.

5. База заданий, предъявляемая обучающимся на экзамене:

1) Общие подходы к созданию безотходных энергосберегающих производств и перспективы развития последних. Ключевые принципы, используемые при создании безотходных производств и их классификация.

2) Роль системного подхода в создании безотходных производств.

- 3) Создание малостадийных химических производств.
- 4) Разработка методов получения продуктов из доступного и дешевого сырья.
- 5) Разработка высокоэффективных процессов.
- 6) Применение «сопряженных» методов получения продуктов.
- 7) Совмещение нескольких реакций, направленных на получение одного и того же целевого продукта.
- 8) Использование рециркуляции по компонентам и потокам.
- 9) Применение совмещенных процессов.
- 10) Полнота выделения продуктов из реакционной смеси.
- 11) Разработка процессов с низким энергопотреблением. Полнота использования энергии системы.
- 12) Разработка технологии с минимальным расходом воды и использованием ее кругооборота. Полнота использования газовых потоков и очистка газовых выбросов.
- 13) Применение аппаратов и технологических линий большой единичной мощности.
- 14) Применение непрерывных процессов. Полнота использования жидких и твердых отходов.
- 15) Высокая степень автоматизации. Обеспечение высокой надежности и стабильности работы химико-технологической системы.
- 16) Особенности применения принципов при создании безотходных производств.
- 17) Понятие предельно эффективной технологии. Алгоритм разработки безотходного производства. Последовательность выбора оптимального варианта безотходной технологии.
- 18) Основы термодинамики химических процессов и фазовых равновесий. Термодинамические закономерности химических и фазовых равновесий для реальных многокомпонентных систем.
- 19) Характеристические функции, химические потенциалы. Понятие активности и коэффициентов активности, методы их расчета и экспериментального определения для реальных газов и жидкостей (растворов).
- 20) Принципы расчета фазовых и химических равновесий для реальных многокомпонентных систем и сложных реакций. Закон действия масс.
- 21) Стехиометрический анализ сложных реакций. Степень завершенности реакции.
- 22) Термодинамический анализ важнейших реакций органического синтеза (хлорирования, окисления, гидрирования и дегидрирования, гидратации и дегидратации, этерификации и гидролиза, карбонилирования и алкилирования и др.) и выбор условий их проведения.
- 23) Математическое моделирование фазовых равновесий жидкость–пар, жидкость–жидкость, жидкость–жидкость–пар, жидкость–твердое тело. Явления азеотропии, хемиазеотропии и полиазеотропии.
- 24) Предельные законы фазового равновесия (законы Рауля и Дальтона).

- 25) Анализ статистики многофазных реакционных систем с избирательным обменом с внешней средой.
- 26) Основные понятия термодинамико-топологического анализа структура диаграмм фазового равновесия.
- 27) Кинетика, механизм и катализ органических реакций.
- 28) Активные частицы (промежуточные соединения) в органическом синтезе. Ионы, радикалы, карбены, ион-радикалы, комплексы металлов, металлоорганические соединения.
- 29) Основы теории реакционной способности органических соединений. Связь кинетики с термодинамикой. Принцип Белла-Эванса-Поляни. Уравнения Бренстеда, Гаммета, Тафта, Поляни-Семенова.
- 30) Правила отбора элементарных стадий при выдвижении гипотез о механизме реакций.
- 31) Гетеролитические и гомолитические механизмы.
- 32) Нуклеофильные и электрофильные реакции замещения, присоединения и отщепления в органическом синтезе. Кинетика и механизм этих реакций. Влияние среды.
- 33) Кислотный и основной катализ в гетеролитических реакциях. Протонные и апротонные кислоты.
- 34) Промышленные катализаторы. Механизм реакций и особенности кинетики процессов гидратации, дегидратации, алкилирования, полимеризации, гидролиза, этерификации, крекинга.
- 35) Радикально-цепные процессы в промышленном органическом синтезе. Механизм, инициаторы, катализаторы, ингибиторы. Кинетические модели реакций хлорирования, окисления, пиролиза и полимеризации.
- 36) Металлокомплексный катализ в промышленном органическом синтезе. Строение комплексов металлов. Природа и механизм основных стадий каталитических реакций с участием металлокомплексов.
- 37) Особенности кинетики реакций в случае металлокомплексного катализа.
- 38) Катализаторы и механизм реакции карбонилирования метанола, процесса оксосинтеза, процессов окисления олефинов кислородом и гидропероксидами, процессов гидрирования и полимеризации, метатезиса олефинов.
- 39) Гетерогенный катализ в промышленном органическом синтезе. Катализ металлами, оксидами и полифункциональными катализаторами.
- 40) Механизм реакций гидрирования, окисления, окислительного аммонолиза, синтезов из CO и H₂.
- 41) Влияние процессов массообмена на кинетику гетерогенно-каталитических реакций.
- 42) Кинетика в условиях кинетической, внешне- и внутреннедиффузионных областей.
- 43) Особенности кинетики в случае медленных и мгновенных химических реакций с учетом влияния диффузии.
- 44) Теоретические основы построения кинетических моделей сложных многомаршрутных реакций органического синтеза. Теория маршрутов.

- 45) Методы анализа кинетических данных и математического описания состава продуктов и селективности для сложных реакций: последовательных, параллельных, последовательно-параллельных.
- 46) Идеальные реакторы. Основные модели реальных реакторов.
- 47) Экспериментальное определение структуры потоков и набор моделей химического реактора.
- 48) Классификация химических реакторов.
- 49) Особенности использования кинетических моделей химического процесса при построении математических моделей реактора.
- 50) Принципы расчета размеров реакторов, состава продуктов и селективности по кинетическим данным с учетом модели реактора и уравнений теплового баланса.
- 51) Выбор типов реакторов с учетом их производительности, селективности реакций, тепловых и кинетических характеристик процесса.
- 52) Принципы оптимизации параметров процесса по термодинамическим и кинетическим данным, использование экономических критериев оптимальности.
- 53) Характеристика конструкций, материальных потоков, теплового режима и выбор варианта технологического оформления реакционного узла для основных гомогенных, гетерогенно-каталитических и гетерофазных процессов промышленного органического синтеза.
- 54) Применение реакторов с псевдооживленным слоем контакта, секционированных аппаратов, оптимизация потоков в реакторах.
- 55) Реакторы с совмещением химического и разделительного процессов.
- 56) Особенности схем подготовки сырья на примере процессов хлорирования, окисления, гидрирования и др.
- 57) Научные основы разделения реальных многокомпонентных смесей методами ректификации, экстракции, экстрактивной и азеотропной ректификации, жидкостной экстракции, абсорбции, адсорбции, хемосорбции и др.
- 58) Вопросы выбора экстрагентов, экстрактивных и азеотропных агентов, сорбентов: характеристика их разделяющей способности.
- 59) Синтез и анализ технологических схем разделения. Разделение полиазеотропных многокомпонентных гомогенных и расслаивающихся смесей.
- 60) Кинетика тепло- и массопереноса, моделирование разделительной аппаратуры, методы расчета.
- 61) Сравнительная оценка и выбор методов разделения многокомпонентных смесей, технологических схем разделения и аппаратуры для них.
- 62) Оптимизация процессов разделения и технологических схем.
- 63) Понятие разделительного комплекса функционального действия. Типовые комплексы и схемы переработки и разделения продуктов основного органического синтеза.
- 64) Сопоставление совмещенных и рециркуляционных вариантов оформления реакционно-массообменных процессов.
- 65) Оценка влияния разделения на степень конверсии и селективность химического превращения.

Типовой образец задания приведен в Приложении 1.

Пользование различными техническими устройствами, кроме ЭВМ компьютерного класса и программным обеспечением, необходимым для решения поставленных задач, не допускается. При желании аспиранта покинуть пределы аудитории во время экзамена экзаменационный билет после его возвращения заменяется.

Преподаватель имеет право после проверки письменных ответов на экзаменационные вопросы и решенных на компьютере задач задавать аспиранту в устной форме уточняющие вопросы в рамках содержания экзаменационного билета, выданного аспиранту.

Иные нормы, регламентирующие процедуру проведения экзамена, представлены в Положении о текущем контроле успеваемости и промежуточной аттестации студентов.

9.2. Оценочные средства для проведения промежуточной аттестации в форме зачета

1. Вид промежуточной аттестации в форме зачета.

Вид промежуточной аттестации устанавливается преподавателем:

по результатам текущего контроля успеваемости обучающегося без дополнительных контрольных испытаний;

по результатам дополнительного итогового контрольного испытания при наличии у аспирантов задолженностей по текущему контролю.

2. При промежуточной аттестации без выполнения дополнительного итогового контрольного испытания аспиранту в обязательном порядке описываются критерии проставления зачёта:

«зачтено» - выставляется обучающемуся при условии выполнения им всех контрольных мероприятий: посещение лекций в объеме не менее 80% контактной работы с преподавателем, выполнения и защиты заданий на практических занятиях.

При промежуточной аттестации с выполнением заданий дополнительного итогового контрольного испытания аспиранту выдается билет с вопросами и задачами.

Число заданий для дополнительного итогового контрольного испытания – 10.

Число вопросов – 3 (2 вопроса для категории «знать» и 1 вопрос для категории «уметь»).

Продолжительность 60 минут.

3. Шкала оценивания промежуточной аттестации - «зачтено», «не зачтено».

4. Критерии выполнения контрольного испытания и условия проставления зачета:

Для категории «знать» (бинарный критерий)

Ниже базового – 0 баллов;

Базовый уровень – 1 балл;

Критерии оценки и ее значение для категории «уметь» (бинарный критерий):

Отсутствие умения – 0 баллов;

Наличие умения – 1 балл.

Критерии итоговой оценки за зачет:

«зачтено» - при сумме баллов 2 или 3;

«не зачтено» - при сумме баллов 0 или 1.

5. Для дополнительного итогового испытания аспиранту в обязательном порядке предоставляется:

База заданий, предназначенных для предъявления обучающемуся на дополнительном итоговом контрольном испытании (типовой образец задания приведен в Приложении 2);

Методические материалы, определяющие процедуру проведения дополнительного итогового испытаний и проставления зачета.

6. Задание выполняется письменно и с использованием ЭВМ.

7. База заданий, предъявляемая обучающимся на зачете:

1) Определение понятия «механизм реакции». Факторы, от которых зависит осуществление элементарного акта между реагирующими частицами: электронные (возникновение реакционных центров) и пространственные (доступность реакционных центров).

2) Квантово-химические расчеты реакционной способности. Анализ реакционной способности органических соединений с помощью методов МО.

3) Классификация реагентов. Нуклеофильные, электрофильные и радикальные реагенты. Их особенности и основные типы.

4) Классификация реакций. Классификация по химическому характеру (реакции замещения, присоединения, отщепления, молекулярные перегруппировки) и по характеру изменения связей.

5) Реакции замещения. Общая характеристика. Особенности ароматических соединений. Правило Хюккеля.

6) Электрофильное замещение; σ - и π -комплексы. Механизм и кинетика реакций электрофильного замещения. Ориентация при электрофильном замещении. Влияние заместителей на распределение электронной плотности в основном и переходном состояниях.

7) Нуклеофильное замещение. Особенности нуклеофильного замещения у ненасыщенного и насыщенного атомов углерода. Особенности реакций нуклеофильного замещения в ароматических соединениях.

8) Радикальное замещение. Механизм реакции. Влияние различных факторов. Соотношение изомеров.

9) Реакции присоединения. Общая характеристика. Реакции нуклеофильного, электрофильного и радикального присоединения. Правило Марковникова и эффект Караша.

10) Реакции отщепления (элиминирования). Общая характеристика. Бимолекулярное и мономолекулярное отщепление.

11) Галогенирование. Прямое галогенирование, основные методы и их сравнительная оценка.

12) Использование галогенводородов, механизм и региоспецифичность реакции.

13) Замена атома галогена на другие атомы и группы. Замена на гидроксильную группу, циан-группу и др.

14) Сульфирование. Введение сульфогруппы в алифатические и ароматические соединения.

- 15) Сульфохлорирование. Сульфамиды, их получение и свойства. Сульфаниламидные препараты.
- 16) Нитрование. Введение нитрогруппы в алифатические и ароматические соединения. Реагенты, условия проведения реакции.
- 17) Превращения нитрогруппы. Примеры использования реакции нитрования в синтезе биологически активных соединений.
- 18) Нитрозирование. Реагенты и условия проведения реакции. Нитрозирование по атому азота.
- 19) Диазотирование. Механизм реакции и условия проведения. Свойства диазосоединений, их анализ.
- 20) Реакции азосочетания. Использование реакций азосочетания. Превращения диазогруппы.
- 21) Дезаминирование, способ Грисса и новые модификации. Реакция Зандмейера. Замена диазогруппы на другие заместители.
- 22) Окисление. Общие закономерности. Реакции окисления по атому углерода.
- 23) Окисление метильных и метиленовых групп до первичных и вторичных спиртов, альдегидов и кетонов, карбоновых кислот. Наиболее распространенные реагенты, условия проведения реакций.
- 24) Реакции окисления и каталитического дегидрирования. Окисление кратных связей углерод-углерод. Реагенты для окисления двойных и тройных связей.
- 25) Расщепление гликолей. Окислительное расщепление вторичных спиртов и кетонов.
- 26) Восстановление. Типы реакций восстановления. Гидрирование. Катализаторы, их получение и свойства.
- 27) Гидрогенолиз. Образование новых связей при гидрировании.
- 28) Реакции восстановления в результате передачи гидрид-иона. Нуклеофильные гидриды. Комплексные гидриды.
- 29) Восстановление с помощью металлоорганических соединений. Реактивы Гриньяра.
- 30) Восстановление под действием металлов (Na, Mg, Zn). Условия проведения реакций, механизм, стереохимия.
- 31) Окислительно-восстановительные реакции. Реакции Оппенгауэра-Мейервейна-Пондорфа. Реакция Канниццаро-Тищенко.
- 32) Реакции элементоорганических соединений (ЭОС). Классификация ЭОС. Методы синтеза и свойства. Особенности магний-, цинк-, кадмий-, алюминий-, литийорганических соединений.
- 33) Ацилирование. Реакция Фриделя-Крафтса, условия проведения. Примеры использования в химии биологически активных соединений.
- 34) Формилирование ароматических соединений. Реакция Вильсмейера. Условия проведения, реагенты.
- 35) Фосфорилирование. Реакции фосфорилирования при создании моно-, ди- и триэфиров ортофосфорной кислоты. Механизм образования. Возможные побочные реакции.

36) Хлорфосфатный метод, использование смешанных ангидридов фосфорных кислот, дициклогексилкарбодиимидный метод, реакции с использованием фосфатинов. Достоинства и ограничения методов.

37) Использование защитных групп в тонком органическом синтезе и химии биологически активных соединений. Защиты С–Н-связей в ацетиленовых и ароматических соединениях. Защита N–H связей. Образование новой N–С-связи.

38) Силильные защиты. Защиты гидроксильной группы. Защиты карбоксильной группы.

39) Защита тиолов путем введения защитных групп за счет модификации сульфгидрильного заместителя. Методы защиты альдегидов и кетонов. Защита кратных углерод-углеродных связей.

40) Реакции конденсации. Типы реакций. Взаимодействие карбонильных соединений с С–N-кислотами. Получение аминокислот по Штреккеру

41) Альдольно-кетоновая конденсация. Условия проведения.

42) Сложноэфирная кляйзеновская конденсация.

43) Реакция Михаэля, использование в химии природных соединений.

Реакция Манниха.

44) Реакция Виттига, реагенты, условия проведения, регио- и стереоспецифичность.

45) Реакция Дильса-Альдера.

46) Конденсация Дэкина-Веста, Арндта-Эйстера.

47) Реакция Кнорра.

48) Конденсация Бишлера-Напиральского.

49) Реакции, протекающие при образовании заряда, не сопряженного с кратными связями. Миграция углеродного остатка от атома углерода к другому атому углерода.

50) Нуклеофильные и электрофильные перегруппировки. Образование положительного заряда на атоме углерода за счет поляризации двойной связи, отщепления галогена, гидроксила, диазогруппы.

51) Положительный заряд на атоме азота, способы образования. Перегруппировки при образовании заряда на кислороде.

52) Перегруппировки аллильного типа.

53) Радикальные, нуклеофильные и электрофильные перегруппировки.

54) Перенос остатка с углерод на углерод, с гетероатома на углерод.

Использование новых реагентов в тонком органическом синтезе. Реагенты на полимерных носителях, их применение и преимущества. Межфазный катализ с использованием гетерофазных реагентов. Краун-эфиры. Примеры использования новых реагентов в химии природных соединений. Преподаватель имеет право после проверки письменных ответов задавать аспиранту в устной форме уточняющие вопросы в рамках задания, выданного аспиранту.

9.3. Оценочные средства для проведения промежуточной аттестации в форме курсового проекта или курсовой работы

Учебным планом курсовая работа (проект) по дисциплине не предусмотрены.

10. Методические рекомендации по организации изучения дисциплины

Аспиранты перед началом изучения дисциплины ознакомлены с системами кредитных единиц и балльно-рейтинговой оценки, которые должны быть опубликованы и размещены на сайте вуза или кафедры.

В учебный процесс внедрена субъект-субъектная педагогическая технология, при которой в расписании каждого преподавателя определяется время консультаций аспирантов по закрепленному за ним модулю дисциплины.

Аспиранты, изучающие дисциплину, обеспечены учебной и научной литературой для выполнения всех видов самостоятельной работы, и учебно-методическим комплексом по дисциплине.

11. Внесение изменений и дополнений в рабочую программу дисциплины

Кафедра ежегодно обновляет содержание рабочих программ дисциплин, которые оформляются протоколами заседаний дисциплин, форма которых утверждена Положением о рабочих программах дисциплин.

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«Тверской государственный технический университет»

Научная специальность – 2.6.10. Технология органических веществ
Кафедра Биотехнологии, химии и стандартизации
Дисциплина «Технология органических веществ»
Семестр 7

ЭКЗАМЕНАЦИОННЫЙ БИЛЕТ № 1

1. Задание для категории «знать» – или 0, или 1, или 2 балла:

1) Общие подходы к созданию безотходных энергосберегающих производств и перспективы развития последних. Ключевые принципы, используемые при создании безотходных производств и их классификация.

3. Задание для категории «уметь» – или 0, или 2 балла:

Опишите принципы расчета фазовых и химических равновесий для реальных многокомпонентных систем и сложных реакций.

4. Задача для категории «уметь» – или 0, или 2 балла:

Предложите вариант проведения сульфирования бензола с соблюдением принципов безотходного производства.

Критерии итоговой оценки за экзамен:

«отлично» – при сумме баллов 5 или 6;

«хорошо» – при сумме баллов 4;

«удовлетворительно» – при сумме баллов 3;

«неудовлетворительно» – при сумме баллов 0, 1 или 2.

Составитель: д.т.н., профессор кафедры БХС  Ю.Ю. Косивцов

Заведующий кафедрой БХС, д.х.н., профессор  М.Г. Сульман

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Тверской государственный технический университет»

Научная специальность – 2.6.10. Технология органических веществ
Кафедра Биотехнологии, химии и стандартизации
Дисциплина «Технология органических веществ»
Семестр 6

**ЗАДАНИЕ ДЛЯ ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ИТОВОГО
КОНТРОЛЬНОГО ИСПЫТАНИЯ № 1**

1. Задание для категории «знать» – или 0, или 1 балл:

Электрофильное замещение; σ - и π -комплексы. Механизм и кинетика реакций электрофильного замещения. Ориентация при электрофильном замещении. Влияние заместителей на распределение электронной плотности в основном и переходном состояниях.

2. Задание для категории «знать» – или 0, или 1 балл:

Реакция Виттига, реагенты, условия проведения, регио- и стереоспецифичность.

3. Задача для категории «уметь» – или 0, или 1 балл:

Предложите схему получения стрептоцида, как представителя сульфаниламидных препаратов.

Критерии итоговой оценки за зачет:

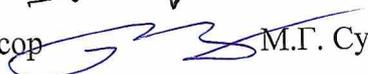
«зачтено» - при сумме баллов 2 или 3;

«не зачтено» - при сумме баллов 0 или 1.

Составитель: д.т.н., профессор кафедры БХС

 Ю.Ю. Косивцов

Заведующий кафедрой БХС, д.х.н., профессор

 М.Г. Сульман