

RTU studiju kurss "Fizikālā organiskā ķīmija"**32000 Dabaszinātņu un tehnoloģiju fakultāte****Vispārējā informācija**

Kods	DA3227
Nosaukums	Fizikālā organiskā ķīmija
Studiju kursa statuss programmā	Obligātais/Ierobežotās izvēles
Atbildīgais mācītājs	Māris Turks - Doktors, Dekāns
Apjoms daļās un kredītpunktos	1 daļa, 6.0 kredītpunkti
Studiju kursa īstenošanas valodas	LV, EN
Anotācija	Studiju kurss parāda, kā piemērot termodinamikas un kinētikas teorētiskos pamatprincipus, lai noteiktu un izprastu organisko savienojumu reakciju mehānismus, reakcijas rezultātu un selektivitāti. Studiju kursā tiek apskatīti pamati kvantu ķīmiskajiem aprēķiniem, kurus lieto vielu konformēru līdzsvara un reakcijas pārejas stāvokļu noteikšanai. Tāpat studiju kurss sniedz ieskatu nekovalentās saistīšanās noteikšanai, kas ir pamatā liganda-proteīna dokingam medicīnas ķīmijas vajadzībām.
Mērķis un uzdevumi, izteikti kompetencēs un prasmēs	Studiju kursa mērķis ir radīt izpratni par fizikālās ķīmijas pamatprincipu un organisko savienojumu stereoelektronisko efektu saistību ar organisko sintēzi. Studiju kursa uzdevumi ir: 1) iemācīt novērtēt organisko savienojumu pārvērtības termokīmisko iespējamību, 2) skaidrot kinētisko un termodinamisko parametru mijiedarbību un ietekmi uz reakcijas iznākumu, 3) sniegt priekšstatu par kvantu ķīmiskajiem aprēķiniem reakciju mehānismu noteikšanā, 4) sniegt priekšstatu par liganda-proteīna dokingu.
Patstāvīgais darbs, tā organizācija un uzdevumi	Patstāvīgais darbs ar literatūru. Gatavošanās praktiskajiem darbiem, kontroldarbiem un eksāmenam.
Literatūra	Anslyn, Eric V.. Modern physical organic chemistry / Eric V. Anslyn, Dennis A. Dougherty. Sausalito (Cal.) : University Science Books, c2006., xxviii, 1099 lpp. : il. Pierre Vogel, Kendall N. Houk. Organic Chemistry: Theory, Reactivity and Mechanisms in Modern Synthesis Weinheim: Wiley-VCH, 2019., xxx, 1352 lpp Ian Fleming. Molecular Orbitals and Organic Chemical Reactions Reference Edition 2010 John Wiley & Sons, Ltd Singh, Maya Shankar. Reactive intermediates in organic chemistry : structure, mechanism, and reactions / Maya Shankar Singh. Weinheim : Wiley-VCH, ©2014., x, 283 lpp. : il. ; 25 cm. Carey, Francis A.,. Advanced organic chemistry / Frank A. Carey and Richard J. Sundberg. New York : Springer, c2007., 2 sēj. : il. ; 26 cm. Carroll, Felix A.. Perspectives on structure and mechanism in organic chemistry / Felix A. Carroll. Pacific Grove [etc.] : Brooks/Cole, c1998., xxiv, 919 lpp. : il. Eusebio Juaristi, Gabriel Cuevas. The Anomeric Effect CRC Press, 1994 Jaemoon Yang. SixMembered Transition States in Organic Synthesis John Wiley & Sons, Inc., 2008
Nepieciešamās priekšzināšanas	Organiskā ķīmija, fizikālā ķīmija.

Studiju kursa saturs

Saturs	Pilna un nepilna laika klātienes studijas		Nepilna laika neklātienes studijas	
	Kontakt stundas	Patstāv. darbs	Kontakt stundas	Patstāv. darbs
1. Ievads. Ķīmiskais līdzsvars un termokīmija. Saišu disociācijas enerģija. Molekulāro grupu termodinamisko parametru inkrementi, to summēšanas likumi organisko savienojumu iegūstamības paredzēšanai.	2	4	0	0
2. Termodinamika organiskajā ķīmijā I. Entalpijas, entropijas un Gibbsa brīvās enerģijas ietekme uz reakciju līdzsvaru. Reakcijas līdzsvara konstanšu aprēķins.	2	5	0	0
3. Termodinamika organiskajā ķīmijā II. Entropija kā sintēzes rīks. Līdzsvara reakcijas fizikālo parametru aprēķins un eksperimentāla noteikšana ar KMR.	4	6	0	0
4. Kinētika organiskajā ķīmijā I. Ķīmisko pārvērtību realizēšanai nepieciešamās enerģijas izvērtēšana. Vairāku stadiju ķīmisko pārvērtību kinētika.	4	6	0	0
5. Kinētika organiskajā ķīmijā II. Reakcijas kinētikas eksperimentāla noteikšana ar spektroskopiskajām metodēm. Ātrumu noteicošās stadijas atrašana.	4	6	0	0
6. Reakcijas kinētika un tās mehānisma izpēte I. Kinētiskie izotopu efekti, krusteniskās reakcijas, radikāļu pulksteņi.	4	6	0	0
1. Kontroldarbs.	2	0	0	0
7. Reakcijas kinētika un tās mehānisma izpēte II. Katalīzes veidi organiskajā ķīmijā. Mazstabilu intermediātu pētīšanas metodes. Katalīzes mehānisma izpēte.	4	6	0	0
8. Kinētikas un termodinamikas principu mijiedarbība I. Hamonda postulāts, Kērtina-Hameta princips, Bella-Evansa- Polanī princips.	3	6	0	0
9. Kinētikas un termodinamikas principu mijiedarbība II. Lineārās brīvās entalpijas korelācijas: Hameta vienādojums. Maira nukleofilu un elektrofilu klasifikācija.	4	6	0	0

10. Stereoelektroniskie efekti: konformāciju līdzsvari, anomērais efekts, Boldvina likumības. Reakcijas spējas atkarība no konformācijas.	4	6	0	0
11. Vides efekti. Solvatācija. Skābju bāzu līdzsvari neūdens vidēs. Šķīdinātāja ietekme uz ķīmiskā līdzsvara attiecību un reakcijas ātrumu.	3	6	0	0
2. Kontrol darbs.	2	0	0	0
12. Ab initio kvantu ķīm. aprēķinu pamatprincipi I. Gaussian, Schroedinger un Gamess darbības pamatprincipi, uzdevumu sastādīšana/rezultātu apstrāde. Org.vielu konformāciju lokālie un globālie minimumi	8	12	0	0
13. Ab initio kvantu ķīm. aprēķinu pamatprinc. II. Reakciju pārejas stāvokļi. Infrasarkanā frekvenču aprēķini. Lādiņu sadalījums molekulā. HOMO un LUMO orbitāļu enerģiju aprēķināšana un vizualizēšana.	8	12	0	0
14. Nekovalentās saistīšanās veidi. Liganda un proteīnu dokinga aprēķinu pamati. "Autodock" darbības pamatprincipi.	6	9	0	0
Kopā:	64	96	0	0

Sasniedzamie studiju rezultāti un to vērtēšana

Sasniedzamie studiju rezultāti	Rezultātu vērtēšanas metodes
Pārzina organiskajai ķīmiķim nepieciešamos termodinamikas un kinētikas konceptus, stereoelektroniskos un vides efektus, to kopējo ietekmi uz reakcijas reģio- un stereoselektivitāti.	Praktisko darbu ieskaite, kontrol darbi, eksāmens.
Prot apkopot pieejamos eksperimentālos datus un/vai ieteikt eksperimentus, lai noteiktu līdzsvara procesu parametrus, daudzpakāpju reakcijas ātrumu limitējošo stadiju. Prot noteikt termodinamisko un kinētisko produktu.	Praktisko darbu ieskaite, kontrol darbi, eksāmens.
Prot sastādīt ab initio kvantu ķīmisko aprēķinu uzdevumu nosacījumus un sagatavot ligandu-proteīnu saistības ievadfailus. Izprot mūsdienu zinātniskajā literatūrā aprakstītos reakciju mehānismu noskaidrošanai vērtētos eksperimentus un teorētiskos aprēķinus.	Praktisko darbu ieskaite, kontrol darbi, eksāmens.
Spēj ieteikt risinājumus no preparatīvas organiskās sintēzes izrietošām problēmām: teorētiski un praktiski nosaka reakcijas mehānismu, iesaka risinājumus iznākuma, reģio- un stereoselektivitātes uzlabošanai. Iesaka nepieciešamās modifikācijas liganda struktūrā, tā labākai saistībai ar mērķproteīnu.	Praktisko darbu ieskaite, kontrol darbi, eksāmens.

Studiju rezultātu vērtēšanas kritēriji

Kritērijs	% no kopējā vērtējuma
1. Kontrol darbs	20
2. Kontrol darbs	20
Praktisko darbu ieskaite	20
Eksāmens	40
Kopā:	100

Studiju kursa plānojums

Daļa	KP	Stundas			Pārbaudījumi		
		Lekcijas	Prakt d.	Laborat	Ieskaite	Eksām.	Darbs
1.	6.0	32.0	32.0	0.0		*	