**Сведения о выпускной квалификационной работе**

**квалификация - магистр**

студента **Васина Максима Васильевича**

**1. Вид работы, специальность (направление подготовки), название.**

Выпускная квалификационная работа по направлению 09.04.02 - Информационные системы и технологии, магистерская программа «Информационные технологии для цифрового проектирования»

на тему:

**«Квантово-химическое моделирование реакции гидрирования ацетофенона на энантиоселективных катализаторах»**

2. Аннотация.

В данной выпускной квалификационной работе проведено квантово-химическое моделирование стадии гидрирования ацетофенона на энантиоселективном катализаторе IrClCp\*TsDPEN по бифункциональному механизму металл-лиганд путём согласованного переноса водорода. Рассмотрены катализаторы, лиганды и основные механизмы протекания стадии гидрирования с переносом водорода. Представлены результаты поиска переходных состояний и расчётов энергий активаций для прямых и обратных реакций стадии гидрирования. Рассмотрены и изучены факторы, влияющие на образование энантиомерного избытка.

Данная выпускная квалификационная работа состоит из введения, перечня сокращений, принятых в работе, 3 глав, выводов по работе. Работа изложена на 87 страницах машинописного текста и включает 55 рисунков,18 таблиц, список литературы из 39 наименования и 4 приложения.

3. **Руководитель.**

Митричев Иван Игоревич, к.т.н., старший преподавателькафедры информационных компьютерных технологий кафедры РХТУ им. Д.И.Менделеева

4. **Рецензент**.

Гордиенко Мария Геннадьевна, кандидат технических наук, доцент кафедры кибернетики химико-технологических процессов (КХТП) РХТУ им. Д.И.Менделеева

**5. Результат проверки работы в системе «Антиплагиат»** 92.46 %

**6. Публикации обучающегося (изданные и принятые к печати), (ссылки оформляются по ГОСТу, как литература)**

1. Васин М. В. Квантово-химическое исследование механизма реакции гидрирования бензальдегида с переносом водорода // Успехи в химии и химической технологии. - 2020. - Т. 34. - No. 12. - С. 26-28

**6. Свидетельства о праве на объекты интеллектуальной собственности.**

Нет

**7. Выступления с докладами**.

Очный этап IV Всероссийского конкурса научно-исследовательских работ студентов и аспирантов ВУЗов и научных академических институтов России по естественным, техническим и гуманитарным наукам "ШАГ В НАУКУ" с НИР "Исследование механизма гидрирования бензальдегида во внутренней координационной сфере иридий содержащего катализатора", г. Томск. 2019.

**8. Награды.**

Диплом II степени за победу в I (заочном) туре IV Всероссийского конкурса научно-исследовательских работ студентов и аспирантов ВУЗов и научных академических институтов России по естественным, техническим и гуманитарным наукам "ШАГ В НАУКУ" с НИР "Исследование механизма гидрирования бензальдегида во внутренней координационной сфере иридийсодержащего катализатора", г. Томск. 2019.

Студент Васин М..В.

Руководитель работы

ст. преподаватель, к.т.н. Митричев И. И.

Заведующий кафедрой

д.т.н., профессор Кольцова Э. М