**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

доцент, к.т.н. Митричев И.И.

Заведующий кафедрой

д.т.н., профессор Кольцова Э.М.