



**Федеральное агентство научных организаций (ФАНО)  
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки  
Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского  
Российской академии наук (ИОХ РАН)**



«УТВЕРЖДАЮ»

Директор Института

М.П. Егоров

академик РАН

«13» *июль* 2017 г.

**Рабочая программа дисциплины**

**Изучение реакций на молекулярном и наноразмерном уровнях  
современными физико-химическими методами**

по направлению подготовки - 04.06.01 Химические науки  
(уровень подготовки кадров высшей квалификации)

Направленность (профиль)

**02.00.04 Физическая химия**

**02.00.15 - Кинетика и катализ**

Москва

2017 год

Рабочая программа составлена на основании федерального государственного образовательного стандарта высшего образования по направлению подготовки кадров высшей квалификации 04.06.01 Химические науки, утвержденного приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от 30.07.2014 № 869.

**Разработчик:**

член-корр. РАН Анаников В.П.,  
зав. лабораторией ИОХ РАН

Программа принята на заседании Ученого совета ИОХ РАН  
Протокол № от «13» июля 2017 г.

Ученый секретарь:

Кандидат химических наук  И.К. Коршевец

## **1. Цели и задачи освоения дисциплины**

Цели дисциплины: дать представление о том, какие физико-химические методы наиболее эффективны для изучения химических превращений в молекулярных и наноразмерных системах. Ознакомить с современными аналитическими технологиями, их применением для практики проведения научного исследования.

Задачи дисциплины:

Уделить особое внимание вопросу взаимосвязи между молекулярными и наноразмерными системами, который активно изучается в последние годы благодаря стремительному прогрессу инструментальных методов и усовершенствованию научного оборудования.

Рассмотреть широкий набор приложений ЯМР-спектроскопии, масс-спектрометрии, микроскопии и ряда других методов в изучении строения и химических превращений.

## **2. Место дисциплины в структуре ООП**

Настоящая дисциплина «Изучение реакций на молекулярном и наноразмерном уровнях современными физико-химическими методами» - модуль основной профессиональной образовательной программы высшего образования – программы подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре по направлению подготовки 04.06.01 – Химические науки, по специальности 02.00.04 - Физическая химия, 02.00.15 - Кинетика и катализ.

Обучающийся по данной дисциплине должен иметь фундаментальные представления по физической химии. Для изучения данной дисциплины необходимо высшее образование с освоением курса физической химии для химических специальностей.

Подробное рассмотрение базовых вопросов и теоретических основ конкретных физико-химических методов анализа не является предметом рассмотрения. Курс лекций ориентирован на развитие навыков в достижении практически важных результатов в области органической химии и приложений нанотехнологии в химии. Рассматриваются ключевые вопросы по физико-химическому сопровождению высоко-импактных междисциплинарных проектов.

Курс состоит из вводной лекции и нескольких логически связанных тематических блоков. Материал курса базируется на современной литературе из общепризнанных международных источников.

### **3. Требования к результатам освоения дисциплины**

В рамках данной дисциплины углубляются и развиваются следующие компетенции:

#### ***Общепрофессиональные компетенции:***

способностью самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий (ОПК-1)

#### ***Профессиональные компетенции:***

способность приобретать новые знания с использованием современных научных методов и владение ими на уровне, необходимом для решения задач, возникающих при выполнении профессиональных функций (ПК-2).

#### ***Универсальные компетенции:***

способностью к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях (УК-1).

### **4. Структура и содержание дисциплины**

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетных единицы (108 часов).

Дисциплина изучается на 2-м году аспирантуры.

#### **4.1. Структура дисциплины:**

№ п/п	Наименование дисциплины	Объем учебной работы (в часах)			Вид итогового
		Всег	Всего	Из аудиторных	

		о	аудит	Лекц.	Лаб.	Прак.	Контр оль	работ а	контроля
1	Изучение реакций на молекулярном и наноразмерном уровнях современными физико-химическими методами	108	82	32	-	32	18	26	экзамен

## 4.2 Содержание дисциплины.

### 4.2.1 Разделы дисциплины и виды занятий.

№	Наименование раздела	Лекции	Семинары	Контроль знаний
1.	Лекционно-семинарский курс	32	32	3
2.	Контрольные работы, экзамен	—	—	15
<b>Всего</b>		<b>32</b>	<b>32</b>	<b>18</b>

### 4.2.2 Содержание разделов дисциплины

№ п/п	Раздел дисциплины	Содержание раздела (темы)	Форма проведения занятий
1	<b>Лекция 1</b>	Эволюция физико-химических методов исследования в изучении молекул и реакций.	Лекция, 2 часа
2	<b>Лекция 2</b>	Уровни молекулярной сложности химических систем, методы экспериментальной характеристики.	Лекция, 2 часа

3	<b>Лекция 3</b>	Сравнение спектроскопии ЯМР, масс-спектрометрии и электронной микроскопии в изучении химических систем в газовой фазе, растворе и твердом теле.	Лекция, 2 часа
4	<b>Лекция 4</b>	Изучение химических реакций в растворе комплексом физико-химических методов.	Лекция, 2 часа
5	<b>Лекция 5</b>	Современная микроскопия на службе химии - смена парадигмы последнего десятилетия. Электронная микроскопия SEM, TEM и STEM в исследовании твердых тел и растворов.	Лекция, 2 часа
6	<b>Лекция 6</b>	Металлокомплексный катализ в органическом синтезе: физико-химические методы для создания гомогенных и гетерогенных каталитических систем.	Лекция, 2 часа
7	<b>Лекция 7</b>	Наноразмерные катализаторы: достоинства и недостатки.	Лекция, 2 часа
8	<b>Лекция 8</b>	Органокатализ: физико-химические методы исследования. Изучение реакций асимметрического синтеза, определение энантиомерного избытка и абсолютной конфигурации.	Лекция, 2 часа
9	<b>Лекция 9</b>	Супрамолекулярная организация в химических системах и методы экспериментального изучения.	Лекция, 2 часа
10	<b>Лекция 10</b>	Эффект растворителя и его роль в химических процессах на молекулярном и наноразмерном уровнях.	Лекция, 2 часа
11	<b>Лекция 11</b>	Реакции в микрореакторах и миниатюризация аналитического оборудования.	Лекция, 2 часа
12	<b>Лекция 12</b>	Реализации высокоэффективных химических превращений: эффект микроволнового и ультразвукового воздействия.	Лекция, 2 часа
13	<b>Лекция 13</b>	Самоорганизация, самосборка и образование наноразмерных систем по ходу химических реакций.	Лекция, 2 часа
14	<b>Лекция 14</b>	Комплекс аналитических методов для исследования строения и свойств органических	Лекция, 2 часа

		наноматериалов.	
15	<b>Лекция 15</b>	Физико-химический мониторинг в оптимизации селективности и выходов химических реакций: как воплотить в жизнь принципы “Зеленой химии”.	Лекция, 2 часа
16	<b>Лекция 16</b>	Управление химическими реакциями на молекулярном и наноразмерном уровнях.	Лекция, 2 часа

## ПЕРЕЧЕНЬ ОСНОВНЫХ СЕМИНАРСКИХ ЗАНЯТИЙ (по 2 ч.)

№ п/п	№ раздела дисциплины	Тема практических занятий
1	Семинар 1.	Прямая и обратная спектральная задача (определение). Эволюция физико-химических методов исследования (на что направлена, результаты). Сравнение ЯМР-спектроскопии, масс-спектрометрии и РСА по количеству и типу образца, необходимого для анализа.
2	Семинар 2.	Химические сдвиги $^1\text{H}$ и $^{13}\text{C}$ по классам органических соединений. ЯМР-эксперимент DOSY (принцип действия и область приложения).
3	Семинар 3.	Базовые двумерные эксперименты ЯМР (перечисление и область приложения). Области приложения констант спин-спинового взаимодействия ЯМР в изучении молекул.
4	Семинар 4.	Методы ионизации и анализа в масс-спектрометрии (виды и области приложения). Принцип работы масс-спектрометрической ионизации электрораспылением. Особенности ESI-MS мониторинга каталитических реакций.
5	Семинар 5.	Определение микроскопа и микроскопии, виды микроскопии. Принцип работы микроскопа в просвечивающем и отражающем режимах.
6	Семинар 6.	Виды электронной микроскопии и получаемая с их помощью информация. Методы определения морфологии наночастиц в газовой фазе, растворе и твердом теле.
7	Семинар 7.	ЯМР-спектроскопия, масс-спектрометрия и электронная микроскопия в изучении химических систем в газовой фазе (сравнение информативности и области приложения).
8	Семинар 8.	ЯМР-спектроскопия, масс-спектрометрия и электронная микроскопия в изучении химических систем в жидкой фазе (сравнение информативности и области приложения).



9	Семинар 9.	ЯМР-спектроскопия, масс-спектрометрия и электронная микроскопия в изучении химических систем в твердой фазе (сравнение информативности и области приложения).
10	Семинар 10.	Характеристики сигнала ЯМР. Зачем нужен дейтерированный растворитель при съемке спектров ЯМР? Определение чувствительности и разрешения в спектрах ЯМР.
11	Семинар 11.	Сравнение типа анализируемых объектов и требований к образцу для ЯМР-спектроскопии и масс-спектрометрии. Как связаны между собой чувствительность, разрешение и интегральная интенсивность сигналов ЯМР?
12	Семинар 12.	Физико-химические методы исследования хиральных молекул. Различия в спектрах ЯМР энантиомеров и диастереомеров. Различия в масс-спектрах энантиомеров и диастереомеров. Анализ абсолютной конфигурации методами ЯМР-спектроскопии и масс-спектрометрии. Чувствительность ЯМР-спектроскопии и масс-спектрометрии при определении энантиомерного избытка. ХДА – определение, строение и примеры использования.
13	Семинар 13.	Достоинства и недостатки гомогенных металлсодержащих каталитических систем, методы экспериментального изучения. Тесты на природу каталитической системы (гомогенная и гетерогенная каталитические системы).

14	Семинар 14.	Супрамолекулярная организации в растворах и методы ее изучения. Сравнение супрамолекулярных и ковалентных взаимодействий при изучении физико-химическими методами. Спектроскопия ЯМР в изучении селективности реакций в растворах и природа нелинейных эффектов в температурных зависимостях. Эффект инкапсулирования молекул в спектрах $^1\text{H}$ ЯМР. Применение диффузионных ЯМР измерений в изучении супрамолекулярных систем. Масс-спектрометрия в изучении супрамолекулярных систем.
15	Семинар 15.	Физико-химические особенности реакций в микрореакторах. Электронная микроскопия в микрореакторах. Пример реакции в микрореакторе и графическая диаграмма. Мониторинг реакций в микрореакторах (методы и области приложения). Миниатюризация аналитического оборудования (примеры, области приложения, особенности). Системы LC-NMR и LC-NMR-MS (принцип работы и общая схема).
16	Семинар 16.	Эффект микроволнового воздействия на химические системы, физико-химическая природа явления. Эффект ультразвукового воздействия на химические системы, физико-химическая природа явления.

## 5. Образовательные технологии

1. Активные образовательные технологии: лекции и практические работы.
2. Сопровождение лекций визуальным материалов в виде слайдов, подготовленных с использованием современных компьютерных технологий (программный пакет презентаций Microsoft Office Powerpoint), проецируемых на экран с помощью видеопроектора, а также результатов компьютерного моделирования физико-химических процессов.

3. Проведение практических работ в компьютерном практикуме, участие обучаемых в научной работе в области вычислительной химии и выполнении исследовательских проектов.
4. Использование специального программного обеспечения и интернет-ресурсов для обучения в ходе практических и самостоятельных работ.

**6. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы аспирантов. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины.**

Виды самостоятельной работы: в домашних условиях, в читальном зале библиотеки, на компьютерах с доступом к базам данных и ресурсам Интернет, в лабораториях с доступом к лабораторному оборудованию и приборам.

Самостоятельная работа подкрепляется учебно-методическим и информационным обеспечением, включающим учебно-методические пособия, конспекты лекций, учебное и научное программное обеспечение, ресурсы Интернет.

Форма контроля знаний – контроль знаний в процессе семинарских занятий и экзамен в конце курса, включающий теоретический и практический вопросы.

**Средства обеспечения освоения дисциплины**

Материал курса базируется на современной литературе из общепризнанных международных источников. Все источники имеются в библиотеке ИОХ РАН.

**Материально-техническое обеспечение дисциплины**

Для проведения учебного процесса имеется оборудованный 16-ю современными компьютерами класс, с подключением к Интернету, а также

*Доступ к базам данных:*

- Chemical Abstracts (CAS on CD, 1996-2011);
- Кембриджский структурный банк данных (CASCDB), обновление ежегодное;
- REAXYS, база данных органических и неорганических реакций, доступ обновляется ежегодно;
- SCIFinder, база данных органических и неорганических реакций, доступ обновляется ежегодно.

## Содержание методов контроля:

### ЭКЗАМЕНАЦИОННЫЕ БИЛЕТЫ

#### Билет 1

1. Прямая и обратная спектральная задача (определение).
2. ЯМР-спектроскопия, масс-спектрометрия и электронная микроскопия в изучении химических систем в газовой фазе (сравнение информативности и области приложения).

#### Билет 2

- 1) Эволюция физико-химических методов исследования (на что направлена, результаты).
- 2) Физико-химические методы исследования хиральных молекул. Различия в спектрах ЯМР энантиомеров и диастереомеров.

#### Билет 3

- 1) Сравнение ЯМР-спектроскопии, масс-спектрометрии и РСА по количеству и типу образца, необходимого для анализа.
- 2) Достоинства и недостатки гомогенных металлсодержащих каталитических систем, методы экспериментального изучения. Тесты на природу каталитической системы (гомогенная и гетерогенная каталитические системы).

#### Билет 4

- 1) Химические сдвиги  $^1\text{H}$  и  $^{13}\text{C}$  по классам органических соединений.
- 2) Супрамолекулярная организации в растворах и методы ее изучения. Сравнение супрамолекулярных и ковалентных взаимодействий при изучении физико-химическими методами.

#### Билет 5

- 1) ЯМР-эксперимент DOSY (принцип действия и область приложения).
- 2) Физико-химические особенности реакций в микрореакторах.

#### Билет 6

- 1) Характеристики сигнала ЯМР. Зачем нужен дейтерированный растворитель при съемке спектров ЯМР?
- 2) Определение микроскопа и микроскопии, виды микроскопии. Принцип работы микроскопа в просвечивающем и отражающем режимах.

#### Билет 7

- 1) Базовые двумерные эксперименты ЯМР (перечисление и область

приложения). Области приложения констант спин-спинового взаимодействия ЯМР в изучении молекул.

- 2) Виды электронной микроскопии и получаемая с их помощью информация.

#### **Билет 8**

- 1) Методы ионизации и анализа в масс-спектрометрии (виды и области приложения).
- 2) Определение органокатализа, физико-химические методы исследования.

#### **Билет 9**

- 1) Принцип работы масс-спектрометрической ионизации электрораспылением. Особенности ESI-MS мониторинга каталитических реакций.
- 2) Спектроскопия ЯМР в изучении селективности реакций в растворах и природа нелинейных эффектов в температурных зависимостях.

#### **Билет 10**

- 1) Методы определения морфологии наночастиц в газовой фазе, растворе и твердом теле.
- 2) Различия в масс-спектрах энантиомеров и диастереомеров.

#### **Билет 11**

- 1) ЯМР-спектроскопия, масс-спектрометрия и электронная микроскопия в изучении химических систем в жидкой фазе (сравнение информативности и области приложения).
- 2) Пример реакции в микрореакторе и графическая диаграмма.

#### **Билет 12**

- 1) ЯМР-спектроскопия, масс-спектрометрия и электронная микроскопия в изучении химических систем в твердой фазе (сравнение информативности и области приложения).
- 2) ХДА – определение, строение и примеры использования.

#### **Билет 13**

- 1) Определение чувствительности и разрешения в спектрах ЯМР.
- 2) Масс-спектрометрия в изучении супрамолекулярных систем.

#### **Билет 14**

- 1) Сравнение типа анализируемых объектов и требований к образцу для ЯМР-спектроскопии и масс-спектрометрии.
- 2) Эффект микроволнового воздействия на химические системы, физико-химическая природа явления.

#### **Билет 15**

- 1) Эффект ультразвукового воздействия на химические системы, физико-химическая природа явления.
- 2) Электронная микроскопия в микрореакторах.

#### **Билет 16**

- 1) Как связаны между собой чувствительность, разрешение и интегральная интенсивность сигналов ЯМР?
- 2) Минатюризация аналитического оборудования (примеры, области приложения, реакций в микрореакторах).

#### **Билет 17**

- 1) Анализ абсолютной конфигурации методами ЯМР-спектроскопии и масс-спектрометрии.
- 2) Системы LC-NMR и LC-NMR-MS (принцип работы и общая схема).

#### **Билет 18**

- 1) Чувствительность ЯМР-спектроскопии и масс-спектрометрии при определении энантиомерного избытка.
- 2) Эффект инкапсулирования молекул в спектрах  $^1\text{H}$  ЯМР.

#### **Билет 19**

- 1) Применение диффузионных ЯМР измерений в изучении супрамолекулярных систем.
- 2) Природа слабых взаимодействия и органокатализ.

#### **Билет 20**

- 1) Эффект микроволнового воздействия на химические системы, физико-химическая природа явления.
- 2) Сравнение ЯМР-спектроскопии, масс-спектрометрии и РСА по количеству и типу образца, необходимого для анализа.

### **7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины**

Рекомендуемая литература:

1. А.Д. Помогайло, Г.И. Джардималиева, Металлополимерные гибридные наноконкомпозиты, М., Наука 2015, 489 С.
2. *Nanoscale materials in chemistry*. K.J. Klabunde (Ed.), 2001, John Wiley

& Sons, Inc., NY.

3. *Carbon materials and nanotechnology*. A. Krueger, 2010, Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim.
4. *Introduction to surface chemistry and catalysis*. 2010, G.A.Somorjai and Y.Li, John Wiley & Sons, Inc. Hoboken.
5. *Structure elucidation by NMR in organic chemistry: a practical guide*. E.Breitmaier, 2002 John Wiley & Sons, Ltd., Chichester.
6. *New horizons of applied scanning electron microscopy*. K.Shimizu, T.Mitani, 2010, Springer, Berlin.
7. *Mass spectrometry. Principles and applications*. E. de Hoffmann and V. Stroobant, 2002, John Wiley & Sons, Ltd., Chichester.
8. *Mechanisms in homogeneous catalysis. A spectroscopic approach*. B.Heaton (Ed.), 2005 Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim.
9. *Organic synthesis on solid phase*. F.Z.Dorwald, 2002, Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim.
10. *New methodologies and techniques for a sustainable organic chemistry*. A.Mordini and F.Faigl (Eds.), 2008, Springer, Dordrecht.
11. *Handbook of pharmaceutical catalysis*. Johnson Matthey Catalysis, 2009, JM Plc.