



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

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)

Специальность 02.00.15 – Кинетика и катализ

Москва

2014 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

Рецензент:

К.х.н. Ройтерштейн Д.М

Программа принята на заседании Ученого совета ИОХ РАН
Протокол № 5 от «25» сентября 2014 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 02.00.15 – 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 контроля
		Всего	Всего аудит.	Из аудиторных			Контроль	Сам. работа	
				Лекц.	Лаб.	Прак.			
1	Изучение реакций на молекулярном и наноразмерном уровнях современными физико-химическими методами	108	64	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
Всего		32	32	18

4.2.2 Содержание разделов дисциплины

№ п/п	Раздел дисциплины	Содержание раздела (темы)	Форма проведения занятий
1	Лекция 1	Эволюция физико-химических методов исследования в изучении молекул и реакций.	Лекция, 2 часа
2	Лекция 2	Уровни молекулярной сложности химических систем, методы экспериментальной характеристики.	Лекция, 2 часа
3	Лекция 3	Сравнение спектроскопии ЯМР, масс-спектрометрии и электронной микроскопии в изучении химических систем в газовой фазе, растворе и твердом теле.	Лекция, 2 часа
4	Лекция 4	Изучение химических реакций в растворе комплексом физико-химических методов.	Лекция, 2 часа
5	Лекция 5	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	Лекция 6	Металлокомплексный катализ в органическом синтезе: физико-химические методы для создания гомогенных и гетерогенных каталитических систем.	Лекция, 2 часа
7	Лекция 7	Наноразмерные катализаторы: достоинства и недостатки.	Лекция, 2 часа
8	Лекция 8	Органокатализ: физико-химические методы исследования. Изучение реакций асимметрического синтеза, определение энантиомерного избытка и абсолютной конфигурации.	Лекция, 2 часа
9	Лекция 9	Супрамолекулярная организация в химических системах и методы экспериментального изучения.	Лекция, 2 часа
10	Лекция 10	Эффект растворителя и его роль в химических процессах на молекулярном и наноразмерном уровнях.	Лекция, 2 часа
11	Лекция 11	Реакции в микрореакторах и миниатюризация аналитического оборудования.	Лекция, 2 часа
12	Лекция 12	Реализации высокоэффективных химических превращений: эффект микроволнового и ультразвукового воздействия.	Лекция, 2 часа
13	Лекция 13	Самоорганизация, самосборка и образование наноразмерных систем по ходу химических реакций.	Лекция, 2 часа
14	Лекция 14	Комплекс аналитических методов для исследования строения и свойств органических наноматериалов.	Лекция, 2 часа
15	Лекция 15	Физико-химический мониторинг в оптимизации селективности и выходов химических реакций: как воплотить в жизнь принципы “Зеленой химии”.	Лекция, 2 часа
16	Лекция 16	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 ^1H и ^{13}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 ^1H 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 материалом 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 (CSCD), 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 ^1H и ^{13}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-

- спектрологии 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) Миниатюризация аналитического оборудования (примеры, области приложения, реакций в микрореакторах).
-

Билет 17

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

Билет 18

- 1) Чувствительность ЯМР-спектрологии и масс-спектрометрии при определении энантиомерного избытка.
 - 2) Эффект инкапсулирования молекул в спектрах ^1H ЯМР.
-

Билет 19

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

Билет 20

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

7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

Рекомендуемая литература:

3. *Nanoscale materials in chemistry*. K.J. Klabunde (Ed.), 2001, John Wiley & Sons, Inc., NY.
4. *Carbon materials and nanotechnology*. A. Krueger, 2010, Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim.
5. *Introduction to surface chemistry and catalysis*. 2010, G.A.Somorjai and Y.Li, John Wiley & Sons, Inc. Hoboken.
6. *Structure elucidation by NMR in organic chemistry: a practical guide*. E.Breitmaier, 2002 John Wiley & Sons, Ltd., Chichester.
7. *New horizons of applied scanning electron microscopy*. K.Shimizu, T.Mitani, 2010, Springer, Berlin.
8. *Mass spectrometry. Principles and applications*. E. de Hoffmann and V. Stroobant, 2002, John Wiley & Sons, Ltd., Chichester.
9. *Mechanisms in homogeneous catalysis. A spectroscopic approach*. B.Heaton (Ed.), 2005 Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim.
10. *Organic synthesis on solid phase*. F.Z.Dorwald, 2002, Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim.
11. *New methodologies and techniques for a sustainable organic chemistry*. A.Mordini and F.Faigl (Eds.), 2008, Springer, Dordrecht.
12. *Handbook of pharmaceutical catalysis*. Johnson Matthey Catalysis, 2009, JM Plc.