

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова»
Химический факультет

УТВЕРЖДАЮ

Декан химического факультета,
Акад. РАН, профессор



/В.В. Лунин/

«27» февраля 2017 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

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

Уровень высшего образования:
Специалитет

Направление подготовки (специальность):
04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

Направленность (профиль) ОПОП:
Химия ионных и молекулярных систем

Форма обучения:
очная

Рабочая программа рассмотрена и одобрена
Учебно-методической комиссией факультета
(протокол №1 от 27.01.2017)

Москва 2017

Рабочая программа дисциплины разработана в соответствии с самостоятельно установленным МГУ образовательным стандартом (ОС МГУ) для реализуемых основных профессиональных образовательных программ высшего образования по направлению подготовки / специальности 04.05.01 «Фундаментальная и прикладная химия» (программа специалитета), утвержденного приказом МГУ от 22 июля 2011 года № 729 (в редакции приказов МГУ от 22 ноября 2011 года № 1066, от 21 декабря 2011 года № 1228, от 30 декабря 2011 года № 1289, от 27 апреля 2012 года № 303, от 30 декабря 2016 года № 1671).

Год (годы) приема на обучение

2014/2015, 2015/2016, 2016/2017, 2017/2018, 2018/2019

1. Наименование дисциплины (модуля) **Изучение реакций на молекулярном и наноразмерном уровнях современными физико-химическими методами**

2. Уровень высшего образования – **специалитет.**

3. Направление подготовки: **04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия.**

4. Место дисциплины (модуля) в структуре ООП: вариативная часть ООП, блок ПД.

5 Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников)

Компетенция	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)
ОПК-3.С. Способность использовать методы регистрации и обработки результатов экспериментов, в том числе, полученных на современном научном оборудовании	Уметь: проводить математическую обработку физико-химических данных, обобщать полученные результаты
СПК-1.С. Способность на основе фундаментальных химических знаний охватывать полную схему межпредметных и междисциплинарных взаимодействий при планировании и проведении научного эксперимента, на практике используя информационные и вычислительные технологии, современные методы и оборудование для синтеза и анализа	Знать: теоретические основы современных физико-химических методов исследования структуры и свойств веществ и материалов Знать: возможности и ограничения применения физических методов исследования химических объектов Уметь: проводить измерения на научном оборудовании по разработанным методикам
СПК-4.С. Способность анализировать информацию при планировании эксперимента и обсуждении полученных результатов, включая аналитические и спектральные данные, в том числе с привлечением информационных баз данных; применять полученные в результате анализа данные для развития исследований, для докладов на конференциях, в научных публикациях	Знать: современные способы обработки и представления литературных и других данных Владеть: методами обработки качественных и количественных результатов спектральных исследований для интерпретации результатов эксперимента, в том числе для направленного синтеза

6. Объем дисциплины в зачетных единицах с указанием количества академических или астрономических часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся:

Объем дисциплины (модуля) составляет 3 зачетных единицы, всего 108 часов, из которых 74 часа составляет контактная работа студента с преподавателем (28 часов занятия лекционного типа, 28 часов- занятия семинарского типа, 14 часов – групповые консультации, 4 часа – промежуточный контроль успеваемости), 34 часа составляет самостоятельная работа студента.

7. Входные требования для освоения дисциплины (модуля), предварительные условия.

Обучающийся должен

Знать: фундаментальные основы физической химии;

Уметь: применять информационные технологии в анализе экспериментальных данных;

Владеть: навыками в достижении практически важных результатов в области органической химии и приложений нанотехнологии в химии.

8. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам.

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины (модуля), форма промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)	Всего (часы)	В том числе								
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы из них						Самостоятельная работа обучающегося, часы из них		
		Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа	Групповые консультации	Индивидуальные консультации	Учебные занятия, направленные на проведение текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации	Всего	Выполнение домашних заданий	Подготовка рефератов и т.п.	Всего
Тема 1. Эволюция физико-химических методов исследования в изучении молекул и реакций. Уровни молекулярной сложности	4	2	2				4			

химических систем, методы экспериментальной характеристики.										
Тема 2. Сравнение спектроскопии ЯМР, масс-спектрометрии и электронной микроскопии в изучении химических систем в газовой фазе, растворе и твердом теле	6	2	2	2			6			
Тема 3. Изучение химических реакций в растворе комплексом физико-химических методов.	6	2	2	2			6			
Тема 4. Современная микроскопия на службе химии - смена парадигмы последнего десятилетия. Электронная микроскопия SEM, TEM и STEM в исследовании твердых тел и растворов.	6	2	2	2			6			
Тема 5. Металлокомплексный катализ в органическом синтезе: физико-химические методы для создания гомогенных и гетерогенных каталитических систем	6	2	2	2			6			
Тема 6. Наноразмерные катализаторы: достоинства и недостатки	6	2	2	2			6			

Тема 7. Органокатализ: физико-химические методы исследования. Изучение реакций асимметрического синтеза, определение энантиомерного избытка и абсолютной конфигурации.	6	2	2	2			6			
Тема 8. Супрамолекулярная организация в химических системах и методы экспериментального изучения	4	2	2				4			
Тема 9. Эффект растворителя и его роль в химических процессах на молекулярном и наноразмерном уровнях.	4	2	2				4			
Тема 10. Реакции в микрореакторах и миниатюризация аналитического оборудования.	4	2	2				4			
Тема 11. Реализации высокоэффективных химических превращений: эффект микроволнового и ультразвукового воздействия.	4	2	2				4			
Тема 12. Самоорганизация, самосборка и образование наноразмерных систем по ходу химических реакций	4	2	2				4			

Тема 13. Комплекс аналитических методов для исследования строения и свойств органических наноматериалов.	4	2	2				4			
Тема 14. Физико-химический мониторинг в оптимизации селективности и выходов химических реакций: как воплотить в жизнь принципы "Зеленой химии". Управление химическими реакциями на молекулярном и наноразмерном уровнях.	8	2	2	2			6	2		2
Промежуточная аттестация <i>экзамен</i>	36					4	4			32
Итого	108	28	28	14		4	74	2		34

9. Образовательные технологии:

- применение компьютерных симуляторов, обработка данных на компьютерах, использование компьютерных программ, управляющих приборами;
- использование средств дистанционного сопровождения учебного процесса;
- преподавание дисциплин в форме авторских курсов по программам, составленным на основе результатов исследований научных школ МГУ.

10. Учебно-методические материалы для самостоятельной работы по дисциплине (модулю):

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. Материал курса базируется на современной литературе из общепризнанных международных источников.

11. Ресурсное обеспечение:

- Перечень основной и вспомогательной учебной литературы ко всему курсу

Основная литература

- А.Т.Лебедев, Масс-спектрометрия в органической химии, Москва: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2003. - 493 с.
- Казицына Л.А., Куплетская Н.Б. Применение ИК-, УФ-, ЯМР-спектроскопии в органической химии. Учеб. пособие для вузов. - М.:Высш. школа, 1971. - 264 с.
- В.А. Смит, А.Д. Дильман, Основы современного органического синтеза, Бином. Лаборатория знаний, 2009.
- В.А. Смит, А.Ф. Бочков, Р. Кэйпл, Органический синтез, М.:Мир, 2001.
- Дж. Марч., Органическая химия, М.: Мир, 1987.

Дополнительная литература

- Mechanisms in homogeneous catalysis. A spectroscopic approach. B.Heaton (Ed.), 2005 Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim.
- Organic synthesis on solid phase. F.Z.Dorwald, 2002, Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim.
- New methodologies and techniques for a sustainable organic chemistry. A.Mordini and F.Faigl (Eds.), 2008, Springer, Dordrecht.
- Handbook of pharmaceutical catalysis. Johnson Matthey Catalysis, 2009, JM Plc.
- Материально-техническое обеспечение: специальных требований нет, занятия проводятся в обычной аудитории, оснащенной доской и мелом (маркерами)

12. Язык преподавания – русский

13. Преподаватели:

Член-корр. РАН, проф. Анаников В.П., val@ioc.ac.ru

Фонды оценочных средств, необходимые для оценки результатов обучения

Образцы оценочных средств для текущего контроля усвоения материала и промежуточной аттестации - экзамена. На экзамене проверяется достижение промежуточных индикаторов компетенций, перечисленных в п.5.

Вопросы к экзамену:

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).
3. Эволюция физико-химических методов исследования (на что направлена, результаты).
4. Физико-химические методы исследования хиральных молекул. Различия в спектрах ЯМР энантиомеров и диастереомеров.
5. Сравнение ЯМР-спектроскопии, масс-спектрометрии и РСА по количеству и типу образца, необходимого для анализа.
6. Достоинства и недостатки гомогенных металлсодержащих каталитических систем, методы экспериментального изучения. Тесты на природу каталитической системы (гомогенная и гетерогенная каталитические системы).
7. Химические сдвиги ^1H и ^{13}C по классам органических соединений.
8. Супрамолекулярная организации в растворах и методы ее изучения. Сравнение супрамолекулярных и ковалентных взаимодействий при изучении физико-химическими методами.
9. ЯМР-эксперимент DOSY (принцип действия и область приложения).
10. Физико-химические особенности реакций в микрореакторах.
11. Характеристики сигнала ЯМР. Зачем нужен дейтерированный растворитель при съемке спектров ЯМР?
12. Определение микроскопа и микроскопии, виды микроскопии. Принцип работы микроскопа в просвечивающем и отражающем режимах.
13. Базовые двумерные эксперименты ЯМР (перечисление и область приложения). Области приложения констант спин-спинового взаимодействия ЯМР в изучении молекул.
14. Виды электронной микроскопии и получаемая с их помощью информация.
15. Методы ионизации и анализа в масс-спектрометрии (виды и области приложения).
16. Определение органокатализа, физико-химические методы исследования.
17. Принцип работы масс-спектрометрической ионизации электрораспылением. Особенности ESI-MS мониторинга каталитических реакций.
18. Спектроскопия ЯМР в изучении селективности реакций в растворах и природа нелинейных эффектов в температурных зависимостях.
19. Методы определения морфологии наночастиц в газовой фазе, растворе и твердом теле.
20. Различия в масс-спектрах энантиомеров и диастереомеров.
21. ЯМР-спектроскопия, масс-спектрометрия и электронная микроскопия в изучении химических систем в жидкой фазе (сравнение информативности и области приложения).
22. Пример реакции в микрореакторе и графическая диаграмма.
23. ЯМР-спектроскопия, масс-спектрометрия и электронная микроскопия в изучении химических систем в твердой фазе (сравнение информативности и области приложения).
24. ХДА – определение, строение и примеры использования.
25. Определение чувствительности и разрешения в спектрах ЯМР.

26. Масс-спектрометрия в изучении супрамолекулярных систем.
27. Сравнение типа анализируемых объектов и требований к образцу для ЯМР-спектроскопии и масс-спектрометрии.
28. Эффект микроволнового воздействия на химические системы, физико-химическая природа явления.
29. Эффект ультразвукового воздействия на химические системы, физико-химическая природа явления.
30. Электронная микроскопия в микрореакторах.
31. Как связаны между собой чувствительность, разрешение и интегральная интенсивность сигналов ЯМР?
32. Минатюризация аналитического оборудования (примеры, области приложения, реакций в микрореакторах).
33. Анализ абсолютной конфигурации методами ЯМР-спектроскопии и масс-спектрометрии.
34. Системы LC-NMR и LC-NMR-MS (принцип работы и общая схема).
35. Чувствительность ЯМР-спектроскопии и масс-спектрометрии при определении энантиомерного избытка.
36. Эффект инкапсулирования молекул в спектрах ^1H ЯМР.
37. Применение диффузионных ЯМР измерений в изучении супрамолекулярных систем.
38. Природа слабых взаимодействий и органокатализ.
39. Эффект микроволнового воздействия на химические системы, физико-химическая природа явления.
40. Сравнение ЯМР-спектроскопии, масс-спектрометрии и РСА по количеству и типу образца, необходимого для анализа.

Методические материалы для проведения процедур оценивания результатов обучения

Шкала оценивания знаний, умений и навыков является единой для всех дисциплин (приведена в таблице ниже)

ШКАЛА И КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТА ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)				
Оценка \ Результат	2	3	4	5
Знания	Отсутствие знаний	Фрагментарные знания	Общие, но не структурированные знания	Сформированные систематические знания
Умения	Отсутствие умений	В целом успешное, но не систематическое умение	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы умение (допускает неточности неприципиального характера)	Успешное и систематическое умение
Навыки (владения)	Отсутствие навыков	Наличие отдельных навыков	В целом, сформированные навыки, но не в активной форме	Сформированные навыки, применяемые при решении задач

РЕЗУЛЬТАТ ОБУЧЕНИЯ	ФОРМА ОЦЕНИВАНИЯ
---------------------------	-------------------------

по дисциплине (модулю)	
<p>Знать: теоретические основы современных физико-химических методов исследования структуры и свойств веществ и материалов</p> <p>Знать: возможности и ограничения применения физических методов исследования химических объектов</p> <p>Знать: современные способы обработки и представления литературных и других данных</p>	<p>мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на зачете</p>
<p>Уметь: проводить математическую обработку физико-химических данных, обобщать полученные результаты</p>	<p>мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на зачете</p>
<p>Владеть: методами обработки качественных и количественных результатов спектральных исследований для интерпретации результатов эксперимента, в том числе для направленного синтеза</p>	<p>мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на зачете</p>