

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)
Металлокомплексный катализ в органической химии

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) **Металлокомплексный катализ в органической химии**
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-4.С. Способность критически оценивать применимость концепций, моделей, методов, способов и инструментов в избранной предметной области (химия)	Знать: основные механизмы каталитических реакций Знать: многообразии лигандов и катализаторов Уметь: использовать знания о металлокомплексном катализе при планировании органического синтеза
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 межпредметных и междисциплинарных областей химии для планирования и проведения научного эксперимента Уметь: решать междисциплинарные задачи с использованием информационных и вычислительных технологий, синтетического и аналитического оборудования, Владеть: современными методами решения междисциплинарных задач
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: возможности получения информации по тематике проекта из открытых источников и информационных баз данных Владеть: навыками планирования эксперимента, анализа полученных результатов и использования их для развития исследований, для докладов на конференциях, в научных публикациях; Владеть: основными методами, способами и средствами получения и обработки информации с привлечением информационных баз данных

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 2 зачетных единицы, всего 72 часа, из которых 42 часа составляет контактная работа студента с преподавателем (18 часов - занятия лекционного типа, 18 часов - занятия семинарского типа, 4 часа – групповые консультации, 2 часа - мероприятия промежуточной аттестации), 30 часов составляет самостоятельная работа студента.

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

Обучающийся должен

Знать: основы органической химии и способы описания механизмов реакций

Уметь: применять элементарные законы физической химии (кинетика реакций целого порядка, связь свободной энергии с константой равновесия, уравнение Нернста).

Владеть: навыками анализа и предсказания строения и реакционной способности комплексных соединений переходных металлов

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. Строение и реакционная	22	6	6				12	10		10

способность координационных соединений переходных металлов										
Тема 2. Механизмы реакций в металлокомплексном катализе и методы их изучения	24	6	6	2			14	10		10
Тема 3. Синтетическое применение металлокомплексного катализа	24	6	6	2			14	10		10
Промежуточная аттестация <u>зачет</u>	2					2	2			
Итого	72	18	18	4		2	42	30		30

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):

Литература из списка основной и дополнительной литературы по курсу, материалы научных статей, предоставляемые на лекциях.

11. Ресурсное обеспечение:

- Перечень основной и вспомогательной учебной литературы ко всему курсу

Основная литература

1. Ярославцев А.Б. Основы физической химии.

Дополнительная литература

1. R.H. Crabtree, The Organometallic Chemistry of the Transition Metals, John Wiley & Sons, 2005
2. J. Hartwig, Organotransition Metal Chemistry: From Bonding to Catalysis, University Science Books; 2010

3. L. Hegedus, B. Soderberg, Transition Metals in the Synthesis of Complex Organic Molecules, Univ Science Books, 2009

- Материально-техническое обеспечение: специальных требований нет, занятия проводятся в обычной аудитории, оснащенной доской и мелом (маркерами)

12. Язык преподавания – русский

13. Преподаватели:

Ромашов Л.В., к.х.н., l.v.romashov@gmail.com

Фонды оценочных средств, необходимые для оценки результатов обучения

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

Вопросы для зачета:

1. Строение комплексных соединений. Типы комплексов. Гаптность и дентатность ли-гандов. Понятие о групповой электроотрицательности. Координационные числа. Основные степени окисления переходных металлов и соответствующие электронные конфигурации. Подсчет электронов в комплексах: ионная и ковалентная модель.
2. Электронное строение комплексных соединений. Теория кристаллического поля. Спектрохимический ряд. Теория поля лигандов. Описание комплексов в рамках метода молекулярных орбиталей. Донирование и обратное донирование. Модель Дьюара-Чатта-Дункансона. Транс-влияние лигандов.
3. Основные лиганды в металлокомплексном катализе. Фосфиновые лиганды. Фосфи-ны Баквальда. N-Гетероциклические карбены. Азот, кислород и сера-содержащие ли-ганды. Металлоцены. Карбонильные и изонитрильные комплексы. Катионные комплексы. Некоординирующие анионы. Хиральные лиганды для асимметрического катализа.
4. Элементарные стадии каталитических реакций. Обмен лигандов. Ассоциативный и диссоциативный механизм. Окислительное присоединение. Восстановительное элиминирование. Реакции внедрения. Трансметаллирование. Внешняя атака на лиганд. Циклометаллирование.
5. Экспериментальные методы изучения каталитических реакций. Кинетические методы. Спектроскопия ЯМР. ИК-спектроскопия. Масс-спектрометрия. Тесты на гетерогенный катализ. Выделение интермедиатов. Кинетический изотопный эффект. Стереохимические закономерности. Уравнение Гаммета. Электрохимические методы.
6. Теоретические методы изучения каталитических реакций. Теория функционала плотности. Геометрия и энергия переходных состояний. Маршруты реакций. Упрощения в моделях и их последствия. Верификация моделей.

7. Реакции кросс-сочетания. Реакции Стилле, Кумады, Негиши, Сузуки. Реакция Соно-гаширы. Реакция Хека. Синтетическое применение реакций кросс-сочетания.
8. Гомогенное гидрирование. Катализатор Уилкинсона. Катализатор Крабтри. Направленное гидрирование. Асимметрическое гидрирование. Катализатор Ноулса. Гидрирование с переносом водорода.
9. Создание связи углерод-гетероатом. Гидрофункционализация кратных связей. Гид-росилилирование, гидроборирование, гидростаннирование, гидроаминирование. Катализ комплексами золота. Присоединение дисульфидов и диселенидов. Кросс-сочетание углерод-гетероатом. Реакция Баквальда-Хартвига. Реакция Либскинда-Срогла.
10. Реакции метатезиса. Гомометатезис. Метатезис с замыканием цикла. Полимеризация с раскрытием цикла. Кросс-метатезис. Ениновый метатезис.
11. Реакции с участием CO. Карбонилирование. Синтез производных карбоновых кислот из арилгалогенидов. Гидроформилирование. Кросс-сочетание в атмосфере CO.
12. C-H активация и функционализация. Направленная активация. Активация алканов.
13. Фоторедокс-катализ. Основы фотохимии. Применение в органическом синтезе.
14. Металлокомплексный катализ и экологически безопасные методы синтеза.
15. Основные принципы "зеленой химии". Атом-экономичные реакции. Реакции без растворителей. Синтез под действием микроволнового излучения. Применение ультразвука. Реакции в среде ионных жидкостей.
16. Асимметрический катализ. Общие представления. Лиганды для асимметрического синтеза. Асимметрическое гидрирование. Асимметрическое гидроксिलирование и эпок-сидирование. Примеры синтетически важных реакций. Синтез природных и биологически активных соединений.
17. Эффективность металлокомплексного катализа. Понятия TON и TOF. Способы измерения данных параметров. Экспериментальное оформление металл-катализируемых реакций в органическом синтезе.

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)	Успешное и систематическое умение

			непринципиального характера)	
Навыки (владения)	Отсутствие навыков	Наличие отдельных навыков	В целом, сформированные навыки, но не в активной форме	Сформированные навыки, применяемые при решении задач

РЕЗУЛЬТАТ ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)	ФОРМА ОЦЕНИВАНИЯ
<p>Знать: актуальные направления исследований в области современной химии ионных и молекулярных систем</p> <p>Знать: теоретические основы междисциплинарных областей химии для планирования и проведения научного эксперимента</p> <p>Знать: возможности получения информации по тематике проекта из открытых источников и информационных баз данных</p>	<p>мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на зачете</p>
<p>Уметь: решать междисциплинарные задачи с использованием информационных и вычислительных технологий, синтетического и аналитического оборудования,</p>	<p>мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на зачете</p>
<p>Владеть: современными методами решения междисциплинарных задач</p> <p>Владеть: навыками планирования эксперимента, анализа полученных результатов и использования их для развития исследований, для докладов на конференциях, в научных публикациях;</p> <p>Владеть: основными методами, способами и средствами получения и обработки информации с привлечением информационных баз данных</p>	<p>мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на зачете</p>