

**Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт металлоорганической химии им. Г.А. Разуваева
Российской академии наук
(ИМХ РАН)**

УТВЕРЖДАЮ



Директор
Чл.-корр. РАН

И.Л. Федюшкин

«04» *сентября* 2015 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

«МЕТАЛЛОКОМПЛЕКСНЫЙ КАТАЛИЗ В ОРГАНИЧЕСКОМ СИНТЕЗЕ»

Б1.В.ДВ.2 «Вариативная часть»; раздел «Дисциплины по выбору» основной профессиональной образовательной программы высшего образования - программы подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре по направлению подготовки кадров высшей квалификации **04.06.01 Химические науки**

Направленность (профиль) **02.00.04 «Физическая химия»**

Форма обучения **очная**

Нижний Новгород

2015

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

Разработчики:

Зав. лабораторией МОК, д.х.н., профессор

Л.Н. Бочкарев

Программа принята на заседании Ученого совета ИМХ РАН

Протокол № 10 от « 24 » июня 2015 г.

Ученый секретарь, к.х.н.



К.Г. Шальнова

1. Цели и задачи освоения дисциплины

Цели дисциплины:

Формирование знаний о новейшем и интенсивно развивающемся направлении современной химии – каталитический органический синтез, получение представлений о механизмах гомогенных и гетерогенных каталитических реакций.

Задачи дисциплины:

- Рассмотреть научные основы катализа в органическом синтезе (типы гомогенных и гетерогенных катализаторов, применяемых в органическом синтезе, классификация каталитических органических реакций, элементарные стадии каталитических циклов);
- Изучить теоретические основы механизмов каталитических органических реакций;
- Овладеть практическими навыками по проведению кинетических исследований,
- Дать информацию о практическом использовании катализа в тонком органическом синтезе, а также в различных промышленных процессах, в том числе фармацевтических производствах;

2. Место дисциплины в структуре ООП

Данная дисциплина относится к группе дисциплин по выбору в Вариативной части образовательной компоненты 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*.

Для успешного усвоения дисциплины аспирант должен знать основные теоретические положения следующих дисциплин:

- "Органическая химия" (теоретические представления органической химии, знания о составе, строении и свойствах основных классов органических соединений, владение основами органического синтеза, основные положения о механизмах органических реакций);
- "Физические методы исследования" (ИК, ЯМР, ЭПР).

3. Требования к результатам освоения дисциплины

В рамках данной дисциплины углубляются и развиваются следующие компетенции:

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

УК-4 - готовностью использовать современные методы и технологии научной коммуникации на государственном и иностранном языках;

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

ПК-2 - способность ставить и решать инновационные задачи, связанные с разработкой новых химических технологий, изучением свойств веществ с использованием глубоких фундаментальных и специальных знаний, аналитических методов и сложных моделей в условиях неопределенности, умение работать с аппаратурой, выполненной на базе микропроцессорной техники и персональных компьютеров для решения практических задач физической химии;

ПК-3 - умение проводить анализ, самостоятельно ставить задачу исследования наиболее актуальных проблем, имеющих значение для химической отрасли, грамотно планировать эксперимент и осуществлять его на практике владение базовыми представлениями о теоретических основах органической химии, механизмах органических реакций, стереохимии, химии элементоорганических и высокомолекулярных соединений;

Аспиранты, завершившие изучение данной дисциплины, должны:

Знать: теоретические основы механизмов органических реакций, протекающих в условиях металлокомплексного гомогенного катализа и катализа металлами, нанесенными на различные носители.

Уметь: проводить кинетические исследования, анализировать полученные кинетические кривые.

Владеть: информацией об использовании металлокомплексного гомогенного и гетерогенного, а также органокатализа в тонком органическом синтезе и в различных промышленных процессах, в том числе фармацевтических производствах.

4. Структура и содержание дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 зачетные единицы (72 часа). Дисциплина изучается в 5 семестре (3 год обучения). Дисциплина состоит из 3 разделов.

4.1. Структура дисциплины

№ п/п	Наименование дисциплины	Объем учебной работы (в часах)						Вид итогового контроля	
		Всего	Всего аудит.	Из аудиторных					Сам. работа
				Лекц.	Лаб/ сем.	Прак.	КСР.		
1	Металлокомплексный катализ в органическом синтезе	72	36	-	35	-	1	36	Зачет

4.2 Содержание дисциплины

4.2.1 Разделы дисциплины и виды занятий

№ п/п	Раздел Дисциплины	Виды учебной работы и трудоемкость (в часах)				Самостоят. работа
		Лек.	Лаб./ сем.	Пр.	КСР	
1	Введение в каталитический органический синтез.	-	12	-	-	12
2	Гомогенный металлокомплексный катализ.	-	12	-	-	12
3	Гетерогенный катализ металлами, нанесенными на различные носители.	-	11	-	1	12

4.2.2 Содержание разделов дисциплины

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела (темы)	Форма проведения занятий (лекции, семинары и т.д.)
1	Введение в каталитический органический синтез.	Роль катализа в органической химии. Концепция экономии атомов. Типы катализаторов, применяемых в органическом синтезе. Классификация каталитических органических реакций.	Семинары, самостоятельная работа
2	Гомогенный металлокомплексный катализ.	Характеристика гомогенных катализаторов. Эффект лигандов. Классификация лигандов в соответствии с донорным атомом. Моно- и бидентатные лиганды. Элементарные стадии каталитического цикла. Превращение алкенов и алкинов. Асимметрическое гидрирование алкенов (катализатор Уилкинсона). Гидроборирование алкенов.	Семинары, самостоятельная работа

		<p>Гидроцианирование и гидроаминирование алкенов. Полимеризация олефинов в присутствии катализаторов Циглера-Натта. Метатезис алкенов, алкинов и циклоалкенов. Димиризация, олигомеризация и изомеризация алкенов.</p> <p>Окисление олефинов. Вакер-процесс. Эпоксидирование олефинов. Гидроксिलирование метал-оксо-комплексами. Межфазный катализ в окислении.</p> <p>Реакции карбонилирования и карбоксилирования. Карбонилирование метанола (Монсанто-процесс). BASF-процесс. Гидроформилирование олефинов (оксо-процесс). Карбонилирование алкенов и алкинов в присутствии нуклеофилов (реакция Реппе). Палладий катализируемое карбонилирование алкенов. Карбонилирование арилгалогенидов в присутствии нуклеофилов. Катализ в превращении CO₂. Гидроформилирование, катализируемое кобальтом и родием.</p> <p>Каталитические реакции кросс-сочетания. Основные методы формирования связей углерод-углерод и углерод-гетероатом.</p> <p>C-H-активация и функционализация алканов и аренов. Электрон-насыщенные металлы. Реакции переноса водорода. Борирование алканов и аренов. Реакция Мураи. Электрофильные катализаторы. Металл-дисульфидные интермедиаты в реакциях селективного окисления C-H связей в углеводородах.</p>	
3	<p>Гетерогенный катализ металлами, нанесенными на различные носители.</p>	<p>Гетерогенные металлокомплексные катализаторы. Носители для металлокомплексных катализаторов. Адсорбционная, ионообменная, координационная и ковалентная гетерогенизация. Специальные методы гетерогенизации. Топологическое закрепление комплексов переходных металлов. Катализ металлополимерами. Концепции гетерогенного катализа. Гидрогенирование CO и CO₂. Процесс Фишера-Тропша. Метатезис алканов, алкенов, и алкинов. Окисление углеводородов. Достоинства и недостатки гетерогенных металлокомплексных катализаторов. Нанокатализ на границе гомогенного и гетерогенного катализа.</p>	<p>Семинары, самостоятельная работа</p>

5. Образовательные технологии

1. Лекции проводят с использованием современных мультимедийных возможностей (слайды подготовлены с помощью программного пакета Microsoft Office PowerPoint) и проекционного оборудования.
2. Использование специального программного обеспечения и Интернет-ресурсов для обучения в ходе самостоятельных работ.

6. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы аспирантов.

Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины.

Целью самостоятельной работы является овладение навыками работы с литературой (в читальном зале библиотеки, с доступом к ресурсам Интернет), более углубленное изучение отдельных разделов дисциплины при подготовке к лабораторным занятиям, лекциям, при выполнении индивидуальных заданий. Самостоятельная работа подкрепляется учебно-методическим и информационным обеспечением, включающим учебники, учебно-методические пособия, конспекты лекций.

Текущий контроль успеваемости осуществляется в форме контроля самостоятельной работы. Итоговый контроль проводится в виде зачета.

По итогам освоения дисциплины в конце семестра предусмотрен зачет.

Критерии освоения дисциплины:

Зачтено	Знание основного содержания разделов дисциплины, допускаются неточности, нарушения в последовательности изложения материала. Правильное применение теоретических знаний для решения практических задач. Допускаются незначительные ошибки в решении расчетных задач.
Незачтено	Не знает значительной части основного содержания разделов дисциплины. Имеющихся знаний недостаточно для освоения дисциплин последующих курсов. Не может решать простые основные расчетные и качественные задачи.

Вопросы для самоконтроля:

1. Классификация каталитических органических реакций.
2. Типы катализаторов, применяемых в органическом синтезе. Характеристика гомогенных и гетерогенных катализаторов.
3. Асимметрическое гидрирование олефинов.
4. Гидроборирование, гидроцианирование и гидроаминирование алкенов.
5. Полимеризация олефинов в присутствии катализаторов Циглера-Натта.
6. Метатезис алканов, алкенов, алкинов и циклоалкенов.
7. Каталитическое окисление углеводородов.
8. Реакции карбонилирования и карбоксилирования (промышленные процессы синтеза).
9. Каталитические реакции формирования связей углерод-углерод и углерод-гетероатом.
10. Каталитические реакции C-H-активации и функционализации алканов и аренов.
11. Методы получения и основные характеристики гетерогенных металлокомплексных катализаторов.
12. Гидрогенирование моно- и диоксида углерода.
13. Процесс Фишера-Тропша.
14. Катализ наночастицами. Сходства и различия с классическим гомогенным и гетерогенным катализом.

7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

а) основная литература:

1. Б.Н. Долгов. Катализ в органической химии. Государственное научно-техническое изд-во химической литературы, Ленинград, 1959, 810 с.
2. Катализ в органической химии. Под редакцией проф. А. М. Рубинштейна, Изд-во иностранной литературы, Москва, 1953, 320 с.
3. D. Astruc. Organometallic Chemistry and Catalysis. Springer, 2007, 609 p.
4. S. Bhaduri, D. Mukesh Homogeneous catalysis: mechanisms and industrial applications. John Wiley & Sons, Inc., 2000, 256 p.
5. G.V. Smith, F. Notheisz. Heterogeneous catalysis in organic chemistry. Academic Press, 1999, 346 p.

б) дополнительная литература:

1. P. W. N. M. Leeuwen. Homogeneous catalysis: understanding the art. Kluwer academic publishers, New York, 2004, 407 p.

2. R.A. Sheldon. Atom efficiency and catalysis in organic synthesis. Pure Appl. Chem., 2000, 72 (7), 1233.
3. U. Heiz, U. Landman. Nanocatalysis. Springer, 2009, 503 p.
4. Metal-Catalyzed Cross-Coupling Reactions. Edited by A. de Meijere, F. Diederich, Wiley-VCH, 2004, 932 p.
5. E.M. Carreira, L. Kvaerno. Classics in stereoselective synthesis. Wiley-VCH, 2009, 632 p.
6. F. Joó. Aqueous organometallic catalysis. Kluwer academic publishers, New York, 2002, 305 p.

в) программное обеспечение и Интернет-ресурсы:

<http://pubs.acs.org>

<http://www3.interscience.wiley.com/cgi-bin/home>

<http://www.thieme-connect.com/ejournals/home>

<http://search.tandf.co.uk/results.asp>

<http://www.rsc.org/Publishing/Journals/articlefinder.asp>

<http://springer.metapress.com>

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины

ИМХ РАН располагает материально-технической базой, обеспечивающей проведение всех видов теоретической подготовки, предусмотренных учебным планом: читальный зал для проведения лекций оснащен компьютером и проектором для демонстрации презентаций. Компьютеры, объединенные в локальную сеть с выходом в Интернет, имеют доступ к международным и российским научным базам данных и электронным библиотекам с основными международными научными журналами.