

**Федеральное государственное автономное образовательное  
учреждение высшего образования  
«Московский физико-технический институт  
(национальный исследовательский университет)»**

**УТВЕРЖДЕНО**

**Директор физтех-школы  
электроники, фотоники и  
молекулярной физики  
А.С. Батурин**

	<b>Рабочая программа дисциплины (модуля)</b>
<b>по дисциплине:</b>	Современные синтетические и препаративные методы в химии
<b>по направлению:</b>	Прикладные математика и физика
<b>профиль подготовки:</b>	Физика перспективных технологий: альтернативная энергетика, научное программирование и функциональные материалы Физтех-школа Электроники, Фотоники и Молекулярной Физики кафедра химической физики функциональных материалов
<b>курс:</b>	4
<b>квалификация:</b>	бакалавр

Семестр, формы промежуточной аттестации: 7 (осенний) - Дифференцированный зачет

Аудиторных часов: 60 всего, в том числе:

лекции: 30 час.

семинары: 0 час.

лабораторные занятия: 30 час.

Самостоятельная работа: 75 час.

Всего часов: 135, всего зач. ед.: 3

Программу составили:

А.А. Анисимов, канд. хим. наук

В.В. Новиков, д-р хим. наук

Программа обсуждена на заседании кафедры химической физики функциональных материалов 03.03.2023

## Аннотация

Курс предусматривает ознакомление студентов с работой с высоковакуумными системами и с препаративными хроматографическими методами для очистки органических соединений, основными принципами разделения на колонках и других препаративных установках, с новыми подходами к сублимации и кристаллизации органических соединений, с принципами кинетических исследований протекания реакций.

### 1. Цели и задачи

#### Цель дисциплины

Ознакомление студентов с работой с высоковакуумными системами и с препаративными хроматографическими методами для очистки органических соединений. Основные принципы разделения на колонках и других препаративных установках. Ознакомление студентов с новыми подходами к сублимации и кристаллизации органических соединений. Ознакомление студентов с принципами кинетических исследований протекания реакций.

#### Задачи дисциплины

Формирование у студентов навыков работы с оборудованием, предназначенным для проведения синтеза при высоком давлении. Приобретение навыков работы на препаративных установках. Изучение работы с линиями Шленка и глоу боксом и в абсолютно инертных средах.

### 2. Перечень формируемых компетенций

Освоение дисциплины направлено на формирование следующих компетенций:

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
УК-1 Способен осуществлять поиск, критический анализ и синтез информации, применять системный подход для решения поставленных задач	УК-1.2 Находит, критически анализирует и выбирает информацию, необходимую для решения поставленной задачи
	УК-1.1 Анализирует задачу, выделяя этапы ее решения, действия по решению задачи
	УК-1.3 Рассматривает различные варианты решения задачи, оценивает их преимущества и недостатки
ПК-1 Способен планировать и проводить научные эксперименты (в избранной предметной области) и (или) теоретические (аналитические и имитационные) исследования	ПК-1.3 Владеет культурой постановки научной задачи и моделирования естественнонаучных объектов и систем
ПК-3 Способен выбирать и применять подходящее оборудование, инструменты и методы исследований для решения задач в избранной предметной области	ПК-3.1 Знает принципы работы и диапазоны рабочих параметров используемого научного оборудования
	ПК-3.2 Знает области и критерии применимости используемых теоретических подходов и умение оценивать точность приближенных аналитических методов вычислений
	ПК-3.3 Умеет производить оценку точности численных методов, используемых на ЭВМ, вычислительной сложности используемых алгоритмов и объема требуемых вычислительных ресурсов
ПК-4 Способен критически оценивать применимость используемых методик и методов	ПК-4.3 Способен обосновать причинно-следственные отношения используемых понятий и моделей
	ПК-4.2 Знает источники происхождения и умеет производить оценку погрешности измерений и достоверности экспериментальных результатов

### 3. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю)

В результате освоения дисциплины обучающиеся должны знать:

- принципы и методы планирования сложных многоэтапных экспериментов;
- принципы работы с оборудованием, предназначенным для проведения синтезов при высоком давлении;
- теоретические основы принципов кинетических исследований протекания реакций;
- современные подходы к сублимации и кристаллизации органических соединений;
- принципы работы в абсолютно инертных средах;
- основы препаративных хроматографических методов очистки органических соединений;
- принципы работы на автоматических препаративных установках;

уметь:

- самостоятельно планировать оптимальное проведение эксперимента в лабораторных условиях;
- самостоятельно работать с оборудованием, предназначенным для проведения синтезов при высоком давлении;
- обеспечить и оценить достоверность получаемых результатов;
- работать с линиями Шленка и глос боксом;
- работать на автоматических препаративных установках: ВЭЖХ, ГПХ, флеш;

владеть:

- методами работы с оборудованием, предназначенным для проведения синтезов при высоком давлении;
- методологией совместного использования различных подходов и лабораторных приборов;
- основными принципами разделения на колонках с прямой и обращенной фазой;
- методами составления и решения кинетических уравнений для реагирующих систем;
- основными навыками работы с высоковакуумными системами для очистки органических соединений.

#### 4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий

##### 4.1. Разделы дисциплины (модуля) и трудоемкости по видам учебных занятий

№	Тема (раздел) дисциплины	Трудоемкость по видам учебных занятий, включая самостоятельную работу, час.			
		Лекции	Семинары	Лаборат. работы	Самост. работа
1	Высоковакуумные системы для очистки химических соединений	6		4	21
2	Хроматографические методы анализа и разделения веществ	8		10	18
3	Кинетические исследования химических реакций	6		4	18
4	Современные подходы к проведению химических реакций	10		12	18
Итого часов		30		30	75
Подготовка к экзамену		0 час.			
Общая трудоёмкость		135 час., 3 зач.ед.			

##### 4.2. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам)

Семестр: 7 (Осенний)

###### 1. Высоковакуумные системы для очистки химических соединений

Основные принципы перегонки. Термодинамика дистилляции. Принципы работы под вакуумом. Выкуумная перегонка. Перегонка веществ из тонкой пленки. Основное оборудование для вакуумных перегонок.

## 2. Хроматографические методы анализа и разделения веществ

Определение хроматографии. Основные параметры хроматограммы. Селективность и эффективность хроматографического разделения. Теория теоретических тарелок. Размывание хроматографической зоны и его физические причины. Разрешение как фактор оптимизации хроматографического процесса. Классификация хроматографических методов. Методы оптимизации хроматографического эксперимента. Пробоподготовка в хроматографическом анализе. Варианты, достоинства и недостатки. Сравнение селективности сорбентов в ВЭЖХ на примере разделения ароматических соединений.

## 3. Кинетические исследования химических реакций

Основные понятия химической кинетики: элементарные (простые) и сложные реакции, молекулярность, скорость химической реакции. Прямые и обратные задачи в химической кинетике. Модельные и эмпирические подходы. Кинетическое уравнение, кинетическая кривая. Феноменологическая кинетика (прямая и обратная задачи) простых химических реакций. Среднее время жизни, период полупревращения. Экспериментальные методы определения скорости реакции. Порядок реакции и способы его определения. Наблюдаемая (кажущаяся) константа скорости. Кинетика химических реакций в статическом, проточном и безградиентном реакторах. Зависимость скорости химических реакций от температуры. Уравнение Аррениуса. Энергия активации, предэкспоненциальный множитель. Методы определения энергии активации, наблюдаемая (кажущаяся) и истинная энергия активации. Неизотермическая кинетика.

## 4. Современные подходы к проведению химических реакций

Разновидности специального оборудования для проведения химических реакций. Принцип работы в абсолютно инертных средах. Оборудование для работы в абсолютно инертных средах. Принципы работы в системах высокого давления. Аппаратурное оформление автоклавных систем. Правила безопасности при работе с аппаратами высокого давления.

## 5. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)

- стальные автоклавы
- роторные испарители фирмы BUCHI и Heidolph
- высоковакуумные перчаточные боксы VBOX SS
- сублиматоры и кристаллизаторы фирмы BUCHI
- гель-проникающие хроматографы фирмы Shimadzu
- препаративный хроматограф фирмы BUCHI
- высоковакуумный роторный испаритель фирмы BUCHI
- лабораторная посуда фирмы Schott Duran

## 6. Перечень рекомендуемой литературы

Основная литература

1. Айвазов Б.В. "Практическое руководство по хроматографии" М.:Высшая школа 1968
2. Гуревич А.Л., Русинов Л.А., Сягаев Н.А. "Автоматический хроматографический анализ" Л.:Химия 1980
3. Валиахметов Д.Р. Хроматографический метод анализа / Д.Р. Валиахметов, Т. Ф. Дехтярь // Наука и инновации в современных условиях : сб. ст. междунар. науч.-практ. конф. - Казань, 2017. - С. 17-19.
4. Байрамов, В. М. Основы химической кинетики и катализа : учеб. пособие для студ. высш. учеб. заведений / В. М. Байрамов. – М. : Издат. центр «Академия», 2003. – 256 с.
5. Байрамов, В. М. Химическая кинетика и катализ: Примеры и задачи с решениями : учеб. пособие для студ. высш. учеб. заведений / В. М. Байрамов. – М. : Издат. центр «Академия», 2003. – 320 с.
6. Кидяров Б.И. Кинетика образования кристаллов из жидкой фазы. Новосиб., 1979;
7. Гельперин Н.И., Носов Г.А. Основы техники фракционной кристаллизации. М., 1986.

#### Дополнительная литература

1. Титце, Л. Препаративная органическая химия: Реакции и синтезы в практикуме органической химии и научно-исследовательской лаборатории / Л. Титце. - М.: Мир, 2013. - 704 с.
2. Грандберг, И.И. Органическая химия: Учебник для бакалавров / И.И. Грандберг, Н.Л. Нам. - М.: Юрайт, 2013. - 608 с.
3. Теренин, В.И. Практикум по органической химии / В.И. Теренин. - М.: Бином. Лаборатория знаний, 2014. - 314 с.

#### **7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)**

Не используются

#### **8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень необходимого программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)**

База данных Национального института стандартизации и технологии США по свойствам соединений - <http://webbook.nist.gov/chemistry/>

Научная электронная библиотека РФФИ [www.elibrary.ru](http://www.elibrary.ru)

Единое окно доступа к образовательным ресурсам Федерального портала Российское образование <http://www.window.edu.ru>

#### **9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)**

Студент, изучающий дисциплину, должен с одной стороны, овладеть общим понятийным аппаратом, а с другой стороны, должен научиться применять теоретические знания на практике. В результате изучения дисциплины студент должен знать основные определения дисциплины, уметь применять полученные знания для решения различных задач.

Успешное освоение курса требует:

- посещения всех занятий, предусмотренных учебным планом по дисциплине;
- ведения конспекта занятий;
- напряжённой самостоятельной работы студента.

Самостоятельная работа включает в себя:

- чтение рекомендованной литературы;
- проработку учебного материала, подготовку ответов на вопросы, предназначенных для самостоятельного изучения;
- решение задач, предлагаемых студентам на занятиях;
- подготовку к выполнению заданий текущей и промежуточной аттестации.

Показателем владения материалом служит умение без конспекта отвечать на вопросы по темам дисциплины.

Важно добиться понимания изучаемого материала, а не механического его запоминания. При затруднении изучения отдельных тем, вопросов, следует обращаться за консультациями к преподавателю.

Возможен промежуточный контроль знаний студентов в виде решения задач в соответствии с тематикой занятий.

**ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ПО ДИСЦИПЛИНЕ (МОДУЛЮ)**

<b>по направлению:</b>	Прикладные математика и физика
<b>профиль подготовки:</b>	Физика перспективных технологий: альтернативная энергетика, научное программирование и функциональные материалы Физтех-школа Электроники, Фотоники и Молекулярной Физики кафедра химической физики функциональных материалов
<b>курс:</b>	<u>4</u>
<b>квалификация:</b>	бакалавр

Семестр, формы промежуточной аттестации: 7 (осенний) - Дифференцированный зачет

**Разработчики:**

А.А. Анисимов, канд. хим. наук

В.В. Новиков, д-р хим. наук

## 1. Компетенции, формируемые в процессе изучения дисциплины

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
УК-1 Способен осуществлять поиск, критический анализ и синтез информации, применять системный подход для решения поставленных задач	УК-1.2 Находит, критически анализирует и выбирает информацию, необходимую для решения поставленной задачи
	УК-1.1 Анализирует задачу, выделяя этапы ее решения, действия по решению задачи
	УК-1.3 Рассматривает различные варианты решения задачи, оценивает их преимущества и недостатки
ПК-1 Способен планировать и проводить научные эксперименты (в избранной предметной области) и (или) теоретические (аналитические и имитационные) исследования	ПК-1.3 Владеет культурой постановки научной задачи и моделирования естественнонаучных объектов и систем
ПК-3 Способен выбирать и применять подходящее оборудование, инструменты и методы исследований для решения задач в избранной предметной области	ПК-3.1 Знает принципы работы и диапазоны рабочих параметров используемого научного оборудования
	ПК-3.2 Знает области и критерии применимости используемых теоретических подходов и умение оценивать точность приближенных аналитических методов вычислений
	ПК-3.3 Умеет производить оценку точности численных методов, используемых на ЭВМ, вычислительной сложности используемых алгоритмов и объема требуемых вычислительных ресурсов
ПК-4 Способен критически оценивать применимость используемых методик и методов	ПК-4.3 Способен обосновать причинно-следственные отношения используемых понятий и моделей
	ПК-4.2 Знает источники происхождения и умеет производить оценку погрешности измерений и достоверности экспериментальных результатов

## 2. Показатели оценивания компетенций

В результате изучения дисциплины «Современные синтетические и препаративные методы в химии» обучающийся должен:

### знать:

- принципы и методы планирования сложных многоэтапных экспериментов;
- принципы работы с оборудованием, предназначенным для проведения синтезов при высоком давлении;
- теоретические основы принципов кинетических исследований протекания реакций;
- современные подходы к сублимации и кристаллизации органических соединений;
- принципы работы в абсолютно инертных средах;
- основы препаративных хроматографических методов очистки органических соединений;
- принципы работы на автоматических препаративных установках;

### уметь:

- самостоятельно планировать оптимальное проведение эксперимента в лабораторных условиях;
- самостоятельно работать с оборудованием, предназначенным для проведения синтезов при высоком давлении;
- обеспечить и оценить достоверность получаемых результатов;
- работать с линиями Шленка и глоу боксом;
- работать на автоматических препаративных установках: ВЭЖХ, ГПХ, флеш;

### владеть:



- методами работы с оборудованием, предназначенным для проведения синтезов при высоком давлении;
- методологией совместного использования различных подходов и лабораторных приборов;
- основными принципами разделения на колонках с прямой и обращенной фазой;
- методами составления и решения кинетических уравнений для реагирующих систем;
- основными навыками работы с высоковакуумными системами для очистки органических соединений.

### 3. Перечень типовых (примерных) вопросов, заданий, тем для подготовки к текущему контролю

В начале каждого занятия проводится краткий опрос по теме предыдущего занятия

### 4. Перечень типовых (примерных) вопросов и тем для проведения промежуточной аттестации обучающихся

Вопросы к дифференцированному зачету:

1. Основные принципы работы в лаборатории.
2. Методы установления структуры химических соединений.
3. Вакуумная перегонка. Основные принципы.
4. Методы кристаллизации и сублимации для очистки химических соединений.
5. Основные принципы при работе с реакторами при высоком давлении.
6. Дайте понятия сущности хроматографического метода анализа органических веществ.
7. Объясните и укажите различие эксклюзионной хроматографии по сравнению с другими видами хроматографии.
8. Изложите основные классификаций хроматографии по способу относительного перемещения фаз.
9. Раскройте сущность жидкостной хроматографии. Укажите преимущества и недостатки.
10. Опишите спецификацию метода жидкостно-жидкостной хроматографии
11. Опишите колоночную хроматографию. Адсорбционная и гель-хроматография. Природа сорбентов и элюентов. Укажите преимущества и недостатки.
12. Опишите высокоэффективную жидкостную хроматографию. Теория хроматографической колонки.
13. Опишите особенность ВЭЖХ. Природа сорбентов. Область применения ВЭЖХ.
14. Опишите гель-хроматографию. Гель-фильтрация
15. Укажите количество сорбента и анализируемой смеси. Способы заполнения хроматографической колонки.
16. Оцените высокоэффективную жидкостную хроматографию (ВЭЖХ) в анализе органических веществ.
17. Приведите примеры количественной обработки и расшифровки хроматограмм. Применение газовой хроматографии для решения ряда практических задач.
18. Приведите методы идентификации компонентов анализируемых смесей, приемы количественного анализа в хроматографии.
19. Приведите пример анализа органических веществ с помощью жидкостной хроматографиями.
20. Покажите разделение и анализ неполярных и полярных соединений с помощью колоночной хроматографии.
21. Покажите на примере ВЭЖХ анализ органических веществ.
22. Скорость химической реакции. Изобразите схематически кинетические кривые для реагента и продукта реакции. Основной постулат химической кинетики. Константа скорости гомогенной реакции, размерность константы скорости. Что такое порядок реакции? Что такое молекулярность реакции?
23. Для каких реакций молекулярность и порядок реакции совпадают?
24. Приведите дифференциальную и интегральную формы кинетического уравнения односторонней гомогенной реакции первого порядка, протекающей при постоянных температуре и объеме. Выведите выражение для времени полу-превращения исходного вещества в данной реакции.

25. Дайте определение терминов «частный порядок», «полный порядок», «молекулярность» химической реакции. Связаны ли между собой молекулярность и порядок реакции, если да, то каким образом и в каком случае?
26. Основной постулат химической кинетики. Что такое порядок реакции и константа скорости реакции, как она зависит от концентрации реагентов и температуры? Единицы измерения констант скорости реакций нулевого, первого, n-го порядка.
27. Приведите кинетическое уравнение для реакций нулевого порядка в дифференциальной и интегральной формах. Как а) аналитически и б) графически рассчитать константу скорости реакции и установить её порядок?
28. В каких единицах измеряется константа скорости и каков её физический смысл?
29. Приведите кинетическое уравнение для реакций первого порядка в дифференциальной и интегральной формах. Как а) аналитически и б) графически рассчитать константу скорости реакции и установить её порядок?
30. В каких единицах измеряется константа скорости реакции первого порядка?
31. Как рассчитать  $t_{1/2}$  и концентрацию исходного вещества за время  $t_i$ ?
32. Приведите кинетическое уравнение для реакций второго порядка (при условии  $C_A = C_B$ ) в дифференциальной и интегральной формах. Как а) аналитически и б) графически рассчитать константу скорости реакции и установить её порядок? В каких единицах измеряется константа скорости реакции второго порядка? Как рассчитать  $t_{1/2}$  и концентрацию исходного вещества за время  $t_i$ ?
33. Реакции 3-го порядка с равными начальными концентрациями.
34. Кинетическое уравнение в дифференциальной и интегральной формах.
35. Линейная интерпретация кинетической кривой, определение величины константы скорости реакции.
36. Для простых необратимых реакции n-го порядка приведите уравнения для расчёта константы скорости и времени полу-превращения реагента.
37. Методы определения порядка реакции. Интегральный метод (аналитический и графический варианты).

#### Критерии оценивания

Оценка отлично 10 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины, проявляющему интерес к данной предметной области, продемонстрировавшему умение уверенно и творчески применять их на практике при решении конкретных задач, свободное и правильное обоснование принятых решений.

Оценка отлично 9 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины и умение уверенно применять их на практике при решении конкретных задач, свободное и правильное обоснование принятых решений.

Оценка отлично 8 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины и умение уверенно применять их на практике при решении конкретных задач, правильное обоснование принятых решений, с некоторыми недочётами.

Оценка хорошо 7 баллов - выставляется студенту, если он твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но недостаточно грамотно обосновывает полученные результаты.

Оценка хорошо 6 баллов - выставляется студенту, если он твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но допускает в ответе или в решении задач некоторые неточности.

Оценка хорошо 5 баллов - выставляется студенту, если он в основном знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но допускает в ответе или в решении задач достаточно большое количество неточностей.

Оценка удовлетворительно 4 балла - выставляется студенту, показавшему фрагментарный, разрозненный характер знаний, недостаточно правильные формулировки базовых понятий, нарушения логической последовательности в изложении программного материала, но при этом он освоил основные разделы учебной программы, необходимые для дальнейшего обучения, и может применять полученные знания по образцу в стандартной ситуации.

Оценка удовлетворительно 3 балла - выставляется студенту, показавшему фрагментарный, разрозненный характер знаний, допускающему ошибки в формулировках базовых понятий, нарушения логической последовательности в изложении программного материала, слабо владеет основными разделами учебной программы, необходимыми для дальнейшего обучения и с трудом применяет полученные знания даже в стандартной ситуации.

Оценка неудовлетворительно 2 балла - выставляется студенту, который не знает большей части основного содержания учебной программы дисциплины, допускает грубые ошибки в формулировках основных принципов и не умеет использовать полученные знания при решении типовых задач.

Оценка неудовлетворительно 1 балл - выставляется студенту, который не знает основного содержания учебной программы дисциплины, допускает грубейшие ошибки в формулировках базовых понятий дисциплины и вообще не имеет навыков решения типовых практических задач.

## **5. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности**

Оценка за дифференцированный зачет выставляется как средняя арифметическая оценок за все практические задания и оценку за теопрос по теоретической части курса.