

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

УТВЕРЖДАЮ  
Декан химического факультета,  
Академик РАН, профессор



«30» августа 2022 г.

## РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Асимметрический катализ

*Asymmetric catalysis*

**Уровень высшего образования:**

Программа подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре  
Органическая химия (104-01-00-143-хн)

Москва 2022

Рабочая программа дисциплины разработана в соответствии с Требованиями к основным программам подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре, самостоятельно устанавливаемыми Московским государственным университетом имени М.В.Ломоносова (приказ №1216 от 24 ноября 2021 г.).

Краткая аннотация:

**Название дисциплины** - Асимметрический катализ (Asymmetric catalysis)

**Цель** изучения дисциплины – Изучение одной из наиболее высокотехнологичных областей современной синтетической химии – гомогенным асимметрическим катализом.

1. Уровень высшего образования – подготовка кадров высшей квалификации
2. Научная специальность: **1.4.3** Органическая химия, область науки: 1. Естественные науки
3. Место дисциплины (модуля) в структуре Программы аспирантуры: Обязательные дисциплины (модули) – Обязательная дисциплина по выбору.
4. *Объем дисциплины (модуля) составляет 2 зачетных единицы, всего 72 часа, из которых 52 часа составляет контактная работа аспиранта с преподавателем (40 часов занятия лекционного типа, 12 часов мероприятия текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации), 20 часов составляет самостоятельная работа обучающегося.*
5. Входные требования для освоения дисциплины (модуля), предварительные условия: на предыдущих уровнях высшего образования должны быть освоены общие курсы:
  1. Органическая химия
  2. Физическая химия
  3. Синтетические методы органической химии,
  4. Введение в стереоселективный синтез,
  5. Стратегия органического синтеза,
  6. Методы органической химии в создании лекарств

7. 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 к коллоквиумам	Всего
<b>Тема 1.</b> Дизайн и синтез хиральных катализаторов <ul style="list-style-type: none"> <li>• Возможные структуры хиральных катализаторов</li> <li>• Дифосфиновые лиганды, их синтез</li> <li>• Хиральные лиганды с другими донорными атомами и группами</li> </ul>	<b>20</b>	12				2	<b>14</b>	4	2	6
<b>Тема 2.</b> Область применимости гомогенного асимметрического катализа <ul style="list-style-type: none"> <li>• Асимметрическое гидрирование, катализируемое комплексами благородных металлов</li> <li>• Асимметрическое гидрирование, катализируемое комплексами металлов, распространенных в земной коре</li> <li>• Другие примеры гомогенного асимметрического катализа (алкилирование, Реакции Михаэля, Манниха и т.д.)</li> </ul>	<b>10</b>	6				2	<b>8</b>	1	1	2
<b>Тема 3.</b> Механизм асимметрического катализа. Эксперимент <ul style="list-style-type: none"> <li>• Методы экспериментального исследования механизмов каталитических реакций</li> </ul>	<b>18</b>	12				2	<b>14</b>	2	2	4

<ul style="list-style-type: none"> <li>• Непредельный механизм асимметрического гидрирования и генерации хиральности.</li> <li>• Дигидридный механизм асимметрического гидрирования</li> </ul>										
<b>Тема 4.</b> Механизм асимметрического катализа. Расчеты <ul style="list-style-type: none"> <li>• Основные принципы квантово-химических расчетов</li> <li>• Особенности расчетов каталитических циклов</li> <li>• Критерии успешных расчетов энантиоселективных реакций</li> </ul>	<b>10</b>	6				2	<b>8</b>	1	1	<b>2</b>
<b>Тема 5.</b> Спонтанная генерация хиральности <ul style="list-style-type: none"> <li>• Нелинейные эффекты в катализе</li> <li>• Асимметрический автокатализ – реакция Соаи</li> <li>• Спонтанная генерация хиральности – возможная причина возникновения хиральной жизни</li> </ul>	<b>8</b>	4				2	<b>6</b>	1	1	<b>2</b>
Промежуточная аттестация: <u>зачет</u>	<b>6</b>					2	<b>2</b>	2	2	4
<b>Итого</b>	<b>72</b>	<b>40</b>	<b>0</b>	<b>0</b>	<b>0</b>	<b>12</b>	<b>52</b>	<b>11</b>	<b>9</b>	<b>20</b>

## 8. Образовательные технологии

Проводятся лекции с использованием мультимедийной техники; лекции- демонстрации и т.д.

9. Учебно-методические материалы для самостоятельной работы по дисциплине (модулю): аспирантам предоставляется программа курса, план занятий и задания для самостоятельной работы, презентации к лекционным занятиям.

10. Ресурсное обеспечение:

### Основная литература:

1. Ilya D. Gridnev and Pavel A. Dub “*Enantioselection in Asymmetric Catalysis*” 2016, CRC Press, Boca Raton

### Дополнительная литература:

2. И.Д. Гриднев, Т. Имамото. Пути реакции и механизм энантиоселективности в асимметрическом гидрировании, катализируемом комплексами родия. Изв. АН, Сер. Хим. 2016, 1514.

### Используемые информационные технологии и справочные системы:

Основные издательства ([www.pubs.acs.org](http://www.pubs.acs.org)), RSC ([www.rsc.org](http://www.rsc.org)), Wiley ([www.wiley.com/en-ie](http://www.wiley.com/en-ie)), Elsevier ([www.elsevier.com](http://www.elsevier.com)), Springer ([www.springernature.com](http://www.springernature.com)), Gaussian (<https://gaussian.com/>), GaussView, ChemCraft ([www.chemcraftprog.com](http://www.chemcraftprog.com))

### Материально-техническая база:

Занятия проводятся в аудитории, оснащенной, проектором. В рамках освоения данной дисциплины аспирантам предоставляется доступ к суперкомпьютеру для пробных квантовохимических расчетов.

11. Язык преподавания – русский

12. Преподаватели:

*д.х.н. проф. Гриднев Илья Дмитриевич,*  
[ilyaiochem@gmail.com](mailto:ilyaiochem@gmail.com), тел.: +7(968)4724292

### Фонды оценочных средств, необходимые для оценки результатов обучения

#### Образцы домашних заданий:

1. Дизайн хиральных лигандов и план их синтеза
2. Установление структуры интермедиатов из спектральных данных
3. Расчет энантиоселективности методом DFT
4. Реферат по литературным данным по асимметрическому катализу
5. Презентация по выбранной теме
6. Примеры вопросов для промежуточной аттестации – **зачета**:
7. Обсудите область применения асимметрического катализа.
8. Какие существуют механизмы стереоотбора в асимметрическом катализе?
9. Обсудите каталитический цикл и стереоселективные стадии каталитической асимметрической реакции.
10. Опишите основные структурные параметры лигандов, эффективных в асимметрическом катализе.
11. Какие внутримолекулярные взаимодействия вносят основной вклад в процесс стереоотбора?
12. В каком случае можно надеяться обнаружить метастабильные интермедиаты экспериментально?
13. Перечислите основные типы высокоэффективных лигандов для асимметрического металлокомплексного катализа.
14. Асимметрический металлокомплексный катализ и асимметрический органокатализ - сходство и различия.
15. Роль растворителя и других добавок в процессе стереоотбора.
16. Нелинейные эффекты в асимметрическом катализе.
17. Абсолютный асимметрический синтез - случайность или неизбежность?
18. Для чего могут пригодиться квантовохимические расчеты хиральных каталитических

циклов?

**Методические материалы для проведения процедур оценивания результатов обучения**

Зачет проходит по билетам, включающим 3 вопроса. Уровень знаний аспиранта оценивается по каждому вопросу на «отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно». В случае если на все вопросы был дан ответ, оцененный не ниже чем «удовлетворительно», аспирант получает общую оценку «зачтено».

**Образцы вопросов:**

1. Приведите схему синтеза дифосфинового лиганда DIPAMP (BisP\*, BenzP\*, DuPHOS)
2. Каким образом происходит стереотбор в ненасыщенном механизме асимметрического гидрирования?
3. Каким образом происходит стереотбор в дигидридном механизме асимметрического гидрирования?
4. Какие эксперименты позволяют опеределить механизм стереоселективности?
5. Каким образом происходит спонтанная генерация хиральности?

<b>ШКАЛА И КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТА ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)</b>				
Оценка Результат	Незачёт (2)	Зачёт (3)	Зачёт (4)	Зачёт (5)
Знания	Отсутствие базовых знаний	Общие, но неглубокие знания, содержащие пробелы	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 непринципиального характера)	Успешное и систематическое умение
Навыки (владения)	Отсутствие навыков	Наличие навыков, не всегда верно используемых	В целом, сформированные навыки, но не в активной форме	Сформированные навыки, применяемые при решении поставленных задач