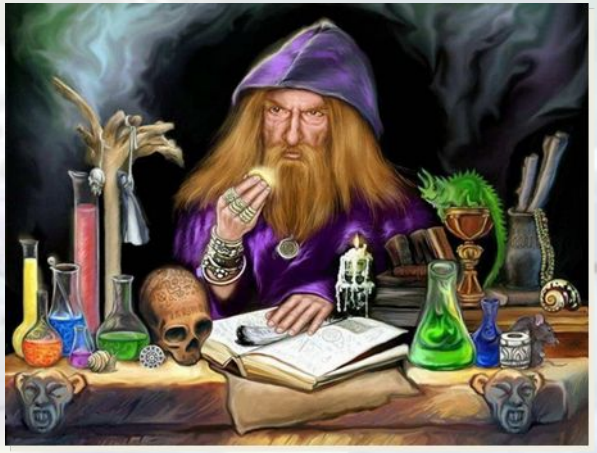


Актуальные задачи химии

проф., дхн.,
Фисюк Александр Семенович
Доц., кхн, Костюченко А.С.
Доц., кхн, Шацаускас А.Л.

Цель курса

- Ознакомление с актуальными задачами современной химии и основными направлениями ее развития, методами получения новых органических материалов.
- Ознакомление с основными химическими и физическими путями стимулирования химических реакции; принципами зеленой химии, понятиями и методами нанотехнологии, принципами работы органических материалов для органической электроники.
- Закрепление учебного материала ранее изученных дисциплин.
- Подготовка студента к применению современных методов химии и химической технологии в будущей практической работе, в частности, в фундаментальных и прикладных научных исследованиях.

Сегодняшний день - в его законченной характеристике - понятен только тогда, когда он становится звеном сложного исторического процесса.

А. Н. Толстой

Основные исторические периоды развития химии

Основные периоды развития химии

- *Предалхимический период*: до III в. н. э.
- *Алхимический период*: III – XVI вв.
- *Период становления (объединения)*: XVII – XVIII вв.
- *Период количественных законов (атомно-молекулярной теории)*: 1789 – 1860 гг.
- *Период классической химии*: 1860 г. – конец XIX в.
- Период физической химии (1914 - 80-ых годы XX века).
- Современный период. Супрамолекулярная химия (с 80-х годов XX века)

Период физической химии (1914 - 80-ых годы XX века).

Делимость атома: Дж. Дж. Томсоном (1897 год) – открытие электрона; А. Беккерель (1896 год) открытие радиоактивности.

Пудинговая модель атома: Уи́льям То́мсон (1902);

Ядерная модель атома: Э.Резерфорд (1911)

Классическая модель строения атомов Нильс Бор (1913); представление о валентных электронах И.Штарк (1916);

теория связей В.Коссель, Дж. Льюис, И. Ленгмюр (1916-1916);

Теория Периодической системы элементов Н.Бор (1921);

принцип запрета В.Паули (1925),

правила заполнения оболочек Ф. Хунд (1925-1927);

волновая природа электрона Луи де Бройль; квантовая механика, принцип неопределенности Вернер Гейзенберг; Эрвин Шредингер и Поль Дирак, создание новых форм атомной теории; Макс Борн, фундаментальные исследования по квантовой механике (1926);

Период физической химии (1914 - 80-ых годы XX века).

- начали разрабатывать квантовомеханическую теорию химической связи Ф. Лондон (1927);
- метода валентных связей, который создают Л. Полинг и Дж. К. Слэтер(1928—1931);
- Теория резонанса Л.Полинг (1928);
- метода молекулярных орбиталей Ф. Хунд, Р. С. Малликен и Дж. Э. Леннард-Джонс (1929);
- Правило ароматичности Э.Хюккель (1931);
- Новые аналитические методы: хроматография, РСА, ЯМР, ЭПР, электронная и колебательная спектроскопия…
- Дифференциация химии :органическая, неорганическая, аналитическая, физическая, кристаллохимия, коллоидная…
- Появление дисциплин на стыке наук: биохимия, геохимия….

Современный период. Супрамолекулярная химия (с 80-х годов XX века)

Важнейшие открытия:

- *Создание сканирующей туннельной микроскопии с пространственным разрешением на уровне 0,1 нм обеспечивает наблюдение отдельных атомов и молекул на поверхности (Нобелевская премия по физике 1986 г, Г.Рорер и Э.Руске).*

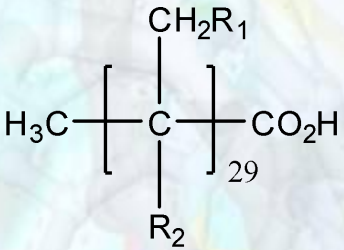
- *Разработка лазерной фемтосекундной спектроскопии с временным разрешением на уровне 1 – 10 фс открывает возможности исследования элементарных актов химических процессов во временных интервалах, соответствующих одному периоду колебаний атомов в молекуле. (1999 г Нобелевской премией по химии, А.Зейвал)*

- *Открытие туннельной колебательной спектроскопии позволяет теперь следить за поведением и превращениями отдельных молекул на поверхности твердых тел.*

ТЕНДЕНЦИИ РАЗВИТИЯ СОВРЕМЕННОЙ НАУКИ

Число химических соединений бесконечно

- Уникальная способность атомов углерода образовывать прочные простые и кратные связи не только с гетероатомами, но также друг с другом, создавая при этом длинные линейные и разветвленные цепи, циклы разного размера, каркасные структуры, обеспечивает возможность для существования **бесчисленного множества** углеродсодержащих соединений.



R_1, R_2 = H,OH,F,Cl,Br,I,NH_2, NO_2, N_3, SH

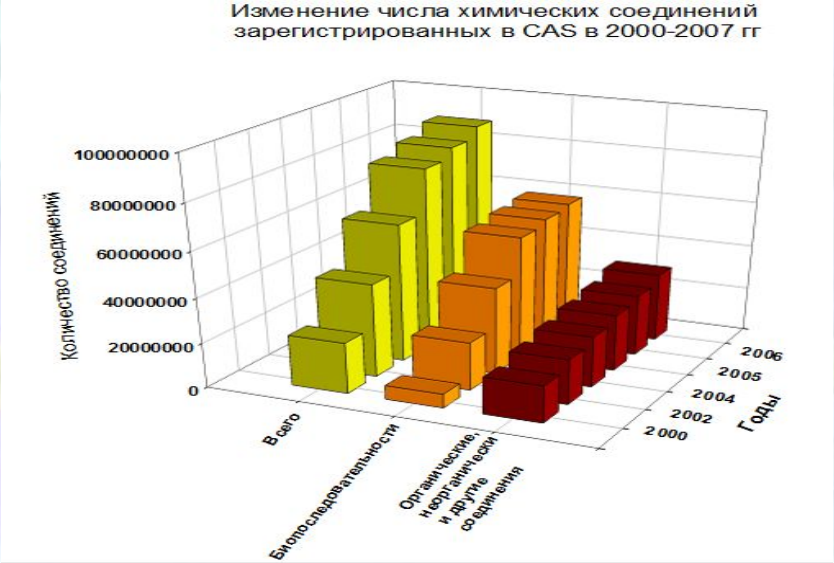
Число возможных комбинаций 10^{58}, что в 10^7 раз превышает число атомов земли

С учетом асимметрического атома углерода число возможных структур равно $5.4*10^{66}$. Для их синтеза (по 1 мг) не хватит всех нуклонов в наблюдаемой Вселенной. *

**Смит В., Бочков А., Кейпл Р. Органический синтез. Искусство и наука, М.: Мир, 2001*

Ускорение роста научных знаний

- Объем научной информации удваивается каждые пять-десять лет.
- За последние годы кол-во новых веществ превысило число всех ранее известных органических соединений. Поиск информации затруднен. В ряде случаев легче решить проблему, чем найти информацию.



- Для поиска появилась необходимость в структурно ориентированных базах данных: SciFinder (Chem. Abstracts), Reaxys (Elsevier)

Интеграция и дифференциация научных знаний

- Следствием дифференциации наук становятся «пограничные» и «стыковые» науки. Одновременно с дифференциацией происходит процесс интеграции, т.е. синтез наук и научных дисциплин, объединение их методов, стирание грани. Возникают научные дисциплины, находящиеся на стыках трех и более наук (нанонауки, биогеохимия, органическая электроника).
- Пришло осознание необходимости совместного решения общих фундаментальных проблем химической науки

Математизация и компьютеризация научных (химических) знаний

Книга Вселенной написана на языке математики. *Галилео Галилей*

- Особое значение приобретают расчетные методы:
- Квантово-химические расчеты, которые позволяют рассчитать свойства вещества. Компьютерная химия, компьютерное моделирование молекул (молекулярный дизайн) и химических реакций;
- Установление связи структура-свойство; Методы QSAR.
- Математическая обработка результатов эксперимента;
- Компьютерный поиск и хранение информации;

Возрастание роли науки как непосредственной производительной силы общества

- Наука не только решает производственные задачи, но и предопределяет практику.
- Многие производственные процессы рождаются в научных лабораториях. Наука превращается из «дочери производства» в «мать производства».
- В связи с потребностью наукоемких материалов для новых областей производства в химии происходит увеличение числа материаловедческих задач.

От вещества к молекуле

- Синтез и исследование наноструктур, развитие и применение нанотехнологий;
- Химия фулерена, нанотрубок, графена
- Супрамолекулярная химия
- Развитие химии одиночной молекулы, развитие электроники на молекулярном уровне;

Разработка функциональных материалов

- Органическая электроника, оптоэлектроника и спинтроника.
- *Химия живого.* Создание и развитие «химической медицины»;
- Новые катализаторы;
- Новые конструкционные материалы;
- И т.д.

Новые тенденции в синтезе

- Последние 10-15 лет мы являемся свидетелями изменения парадигмы химического синтеза. Создание сложный молекул проблема, которая во многом решена. Основным критерием синтеза является его эффективность синтеза

- Поиск и совершенствование путей управления химическими процессами. Пути стимулирования химической реакции;
- *Разработка экологически чистых технологических процессов. Зеленая химия.*
- *Разработка эффективных, селективных и высокопроизводительных синтетических методов.*

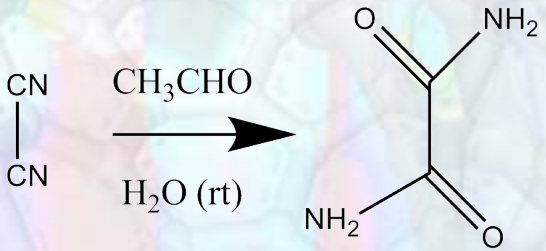
https://onlinelibrary.wiley.com/products/journals/hottopics-chemistry-materials

Hot Topics

Wiley

in chemistry and materials science: Synthesis & Catalysis

« Органокатализ» (сочетание терминов «органический» и «катализатор») относится к форме катализа, при которой скорость химической реакции увеличивается с помощью органического катализатора.



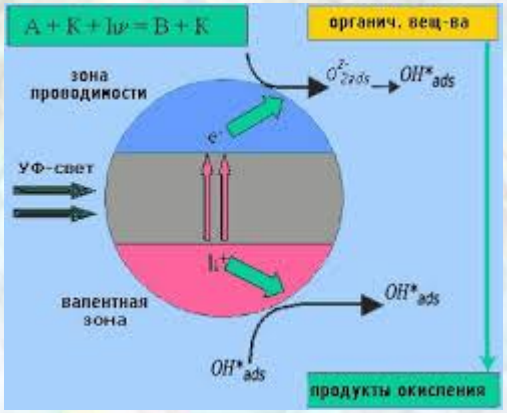
Стереоселективный синтез

P. I. Dalko, L. Moisan, Angew. Chem. 2001, 113, 3840;
Angew. Chem. Int. Ed. 2001, 40, 3726; Angew. Chem. 2004, 116, 5248;
Angew. Chem. Int. Ed. 2004, 43, 5138.
[Special issue of Adv. Synth. Catal. 2004, 346, Nr. 9-10.

Hot Topics

Wiley

in chemistry and materials science: Synthesis & Catalysis



Фотокатализ — ускорение химической реакции, обусловленное совместным действием катализатора и облучения светом. При фотогенерируемом катализе фотокаталитическая активность зависит от способности катализатора создавать пары электрон-дырка, которые генерируют свободные радикалы, способные вступать во вторичные реакции.

.- Xing, W. Q. Fang, H. J. Zhao, H. G. Yang: Inorganic Photocatalysts for Overall Water Splitting Chem. Asian J. 2012, 7, 642–657

- S. N. Habisreutinger, L. Schmidt-Mende, J. K. Stolarczyk: Photocatalytic Reduction of CO2 on TiO2 and Other Semiconductors
Angew. Chem. Int. Ed. 2013, 52, 7372–7408

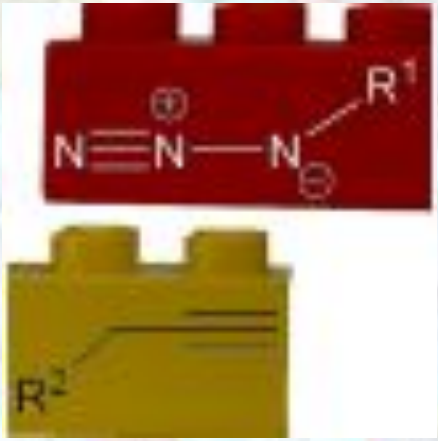
- J. Xuan, W.-J. Xiao: Visible-Light Photoredox Catalysis
Angew. Chem. Int. Ed. 2012, 51, 6828–6838

Find out more about photocatalysis

Hot Topics

Wiley

in chemistry and materials science: Synthesis & Catalysis



Термин **клик-химия** был впервые введён Б. Шарплессом в 2001 году. Данное понятие описывает химические реакции, приспособленные для быстрого и надёжного получения химических веществ путём соединения между собой отдельных маленьких элементов. Клик-химия не касается отдельной реакции, но была задумана как подражание природе, которая также создаёт соединения из модульных элементов.

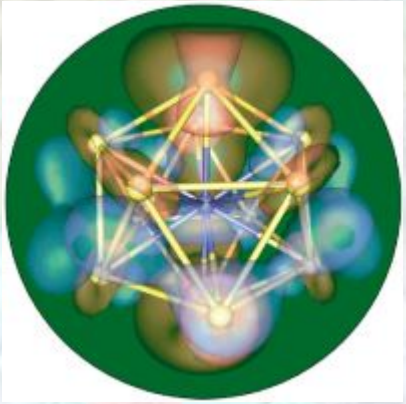
Hartmuth C. Kolb, M. G. Finn, K. Barry Sharpless. Click Chemistry: Diverse Chemical Function from a Few Good Reactions [Review]. Angew. Chem. 2001, vol. 113, no. 11, pp. 2056–2075; Angew. Chem. Int. Ed. 2001, vol. 40, no. 11, pp. 2004–2021

Find out more about click chemistry

Hot Topics

Wiley

in chemistry and materials science: Synthesis & Catalysis



Золото – металл перспективный для использования в материаловедении, медицине и, в гетерогенном и гомогенном катализе. Представляют интерес наноструктуры на основе золота, комплексные соединения, оптические свойства производных золота.

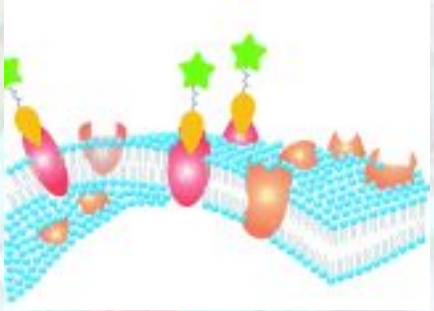
[1] P. Pyykkö, Theoretical Chemistry of Gold
Angew. Chem. 2004, 116, 4512–4557; *Angew. Chem. Int. Ed. 2004, 43, 4412–4456*
[2] A. S. K. Hashmi, The Catalysis Gold Rush: New Claims
Angew. Chem. 2005, 117, 7150; *Angew. Chem. Int. Ed. 2005, 44, 6990*
[3] G. Schmid, B. Corain, Nanoparticulated Gold: Syntheses, Structures, Electronics, and Reactivities
Eur. J. Inorg. Chem. 2003, 3081

Find out more about gold

Hot Topics

Wiley

in chemistry and materials science: Synthesis & Catalysis



Мембраны - это интердисциплинарная область, которая включает всебя биохимию, физическую химию, химический инженеринг и др.

Find out more about membranes

Используя инновационные методы фторирования, дает доступ к использованию фторорганических соединений в биологии, фармацевтике и материаловедении. Исследованиям по введени изотопов 18F в биологически активные молекулы для применен позитронно-эмиссионной томографии.

P. Kirsch, Modern Fluoroorganic Chemistry: Synthesis, Reactivity, Applications, Wiley-VCH, Weinheim, 2013.

Find out more about fluorine

Hot Topics

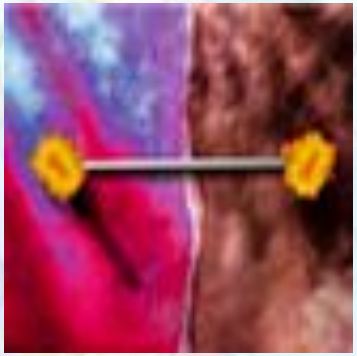
Wiley

in chemistry and materials science: Synthesis & Catalysis

C–H Activation

Возможность прямого введения новой функциональной группы (или новой связи С – С) посредством преобразование связи С – Н является очень привлекательной стратегией в синтезе.

C–C Coupling.

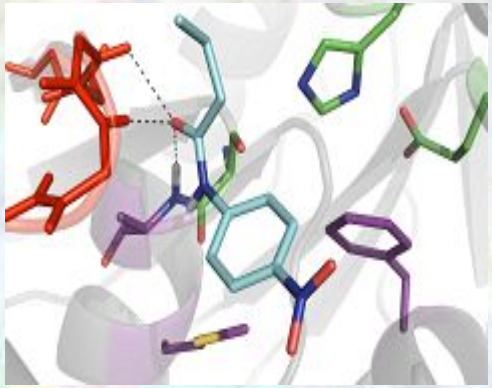


Развитие реакций кросс-сочетания, катализируемых металлами, за последние 30 лет произвело революцию в способах образования углерод-углеродных связей между атомами углерода sp и sp2. Эти методы глубоко изменили протоколы создания натуральных продуктов, строительных блоков для супрамолекулярной химии и самосборки, органических материалов и полимеров, а также соединений для медицинской химии из более простых элементов. Нобелевская премия по химии 2010 г., присужденная Э. Негиши, Р. Хеку и А. Судзуки, подчеркивает важность образования прямой связи между атомами углерода.

Hot Topics

Wiley

in chemistry and materials science: Synthesis & Catalysis



Использование биокатализаторов - ферментов для выполнения высокостереоселективных органических превращений стало основой постоянно расширяющейся области биокатализа. Ферменты эволюционировали за миллионы лет и стали одними из лучших катализаторов, доступных химикам. Теперь, благодаря достижениям в молекулярной и синтетической биологии, химики могут модифицировать ферменты в соответствии со своими синтетическими потребностями.

Find out more about organocatalysis

Hot Topics

Wiley

in chemistry and materials science: Bio & Med

Hot Topic: Drug Delivery

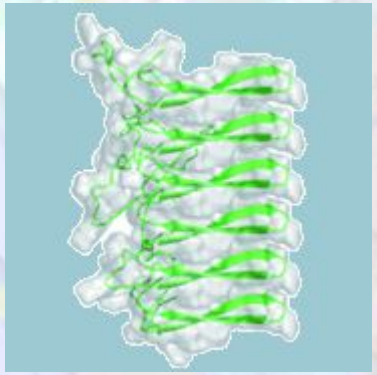
С появлением интегрированных процессов создания лекарств роль химиков и медицинских работников существенно возросла. Физико-химические и биологические барьеры, пути доставки лекарств, составы, фармакокинетические и фармакодинамические проблемы, метаболизм и модели клеточных культур, используемые при создании лекарств, - это лишь некоторые из тем которые приходится решать при создании лекарства.

Hot Topics Wiley

in chemistry and materials science: Bio & Med

RNA

РНК, РНК-интерференция, переключатели рибозимов, микроРНК, структурные исследования, аптамеры и многое другое ...(генные заболевания, генная инженерия)



Amyloids

Амилоиды - это собирательный термин для описания неправильно свернутых белков, которые самоорганизуются в нерастворимые фибриллы как in vitro, так и in vivo. Эти белковые агрегаты участвуют в большом количестве заболеваний человека, от болезни Альцгеймера до диабета 2 типа, ревматоидного артрита и артеросклероза. Учитывая важность амилоидов в контексте заболеваний, интенсивное изучение их биофизических свойств дало много новой информации о способах подавления их образования.

Hot Topics

Wiley

in chemistry and materials science: Sustainability

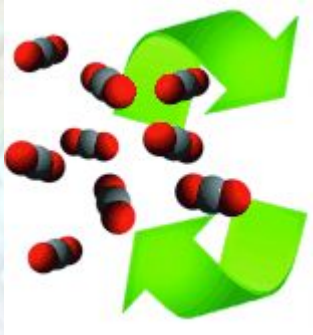
Sustainable Chemistry

Государства Европы и США договорились работать сообща, чтобы способствовать глобальному устойчивому развитию, ответственно относиться к использованию ресурсов и гарантировать, с целью защиты и поддержания благополучия Земли и ее жителей, в интересах следующих поколений ». Это вопрос неотложный, химия абсолютно необходима для разработки решений.

Hot Topics

Wiley

in chemistry and materials science: Sustainability



Выбросы CO_2 вызывают множество экологических проблем. Чтобы снизить концентрацию CO_2 в атмосфере, важны фиксация, активация и захват CO_2 посредством химических реакций. CO_2 все чаще используется в качестве источника углерода при синтезе.

Carbon Dioxide

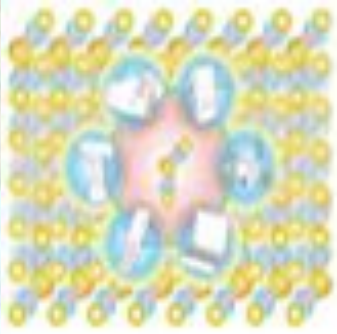
Расщепление воды, искусственный фотосинтез, реакции выделения водорода: получение химического топлива из воды и солнечного света - одна из ключевых научных задач 21 века.

Water Splitting

Hot Topics

Wiley

in chemistry and materials science: Materials

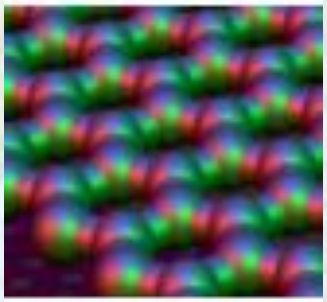


Batteries and Supercapacitors

Литий-ионные или другие аккумуляторы обеспечивают бесперебойную работу и позволяют вести мобильный образ жизни: от мобильных телефонов до межконтинентальных авиаперелетов. Батареи - это сложные устройства, общая производительность и полезность которых зависят от многих факторов, таких как плотность энергии, эффективность, долговечность и устойчивость. Исследования в этой области по своей природе междисциплинарны и включают в себя химиков, физиков, материаловедов и инженеров.

Hot Topics Wiley

in chemistry and materials science: Materials



[Carbon, Graphite, and Graphene]

Углерод это сажа, алмаз, углеродных нанотрубки, фуллерены, графен, графит. Достижения в области исследования графена, тамплетные методы и появление наноалмазов делают эту область богатой для исследований. Разнообразие последних достижений указывает на то, что углерод во всех его вариациях является материалом начала 21 века. Нобелевская премия по физике 2010 г. была присуждена А. Гейму и К. С. Новоселову за их работы по графену.

Hot Topics

Wiley

in chemistry and materials science: Materials

Solar Cells

Солнце поставляет на землю огромное количество энергии. По мере того как важность возобновляемых источников энергии становится все более очевидным, что эту энергию нужно превращать в электричество и использовать. Для этого используют солнечных батарей и фотоэлектрических систем.

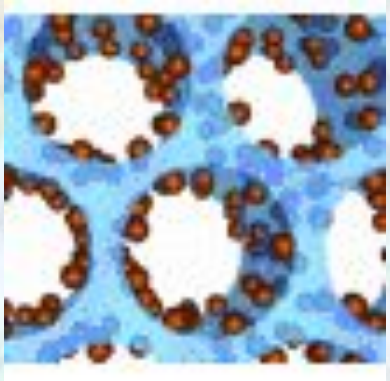
Liquid Crystals

Жидкие кристаллы привлекают ученых из разных дисциплин, таких как химия, физика, материаловедение и инженерия, - как теоретиков, так и экспериментаторов. В наши дни вы можете купить вполне доступные ЖК-телевизоры, но это лишь одна из многих возможностей жидких кристаллов.

Hot Topics

Wiley

in chemistry and materials science: Materials



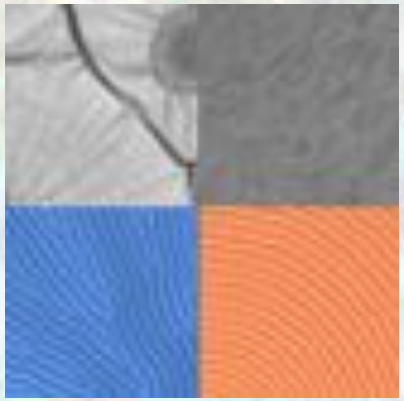
Mesoporous Materials

Интерес к мезопористым материалам (определение ИЮПАК: размер пор 2–50 нм) резко вырос за последние несколько лет, не в последнюю очередь потому, что структура пор этих материалов обеспечивает чрезвычайно большую площадь поверхности в относительно небольшом объеме материала. Это делает материалы пригодными, например, для катализа, химических сенсоров и разделения молекул.

Hot Topics

Wiley

in chemistry and materials science: Materials



Surfaces and Interfaces

Катализ, молекулярное распознавание, перенос заряда, полимеризация и многие другие важные процессы происходят на границе раздела фаз. Фундаментальные и прикладные исследования поверхностных и интерфейсных процессов и их оптимизация имеют решающее значение в разработке новых технологий от катализатора до датчика, от медицины до самоочищающихся поверхностей, от дисплеев до лазеров.

Hot Topics

Wiley

in chemistry and materials science: Materials

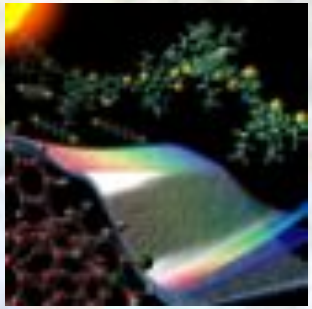
Magnetic Materials

Магнитные явления в современном мире вездесущи. Нобелевская премия по физике (2007 г.) была присуждена за исследования гигантского магнитосопротивления А. Ферту и П. Грюнбергу; их открытия вскоре были реализованы на жестких дисках. **Магнитосопротивление** (магниторезистивный эффект) — изменение электрического сопротивления материала в магнитном поле.

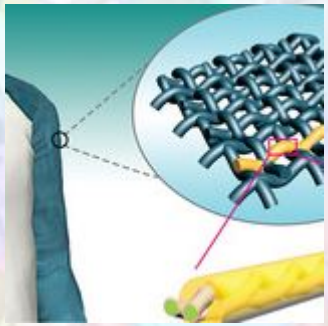
Hot Topics

Wiley

in chemistry and materials science: Materials



Organic Electronics



Flexible Electronics

За последние 25-30 лет был достигнут огромный прогресс в разработке и производстве органических электронных устройств. Высокоэффективные светодиоды, транзисторы и устройства памяти - эти устройство уже используются нами

Приоритетные направления развития науки, технологий и техники в Российской Федерации

•

(утв. Указом Президента РФ от 7 июля 2011 г. N 899)

1. Безопасность и противодействие терроризму.
2. Индустрия наносистем.
3. Информационно-телекоммуникационные системы.
4. Науки о жизни.
5. Перспективные виды вооружения, военной и специальной техники.
6. Рациональное природопользование.
7. Транспортные и космические системы.
8. Энергоэффективность, энергосбережение, ядерная энергетика.

Перечень критических технологий РФ
(утв. Указом Президента РФ от 7 июля 2011 г. N 899)

1. Базовые и критические военные и промышленные технологии для создания перспективных видов вооружения, военной и специальной техники.
2. Базовые технологии силовой электротехники.
3. Биокаталитические, биосинтетические и биосенсорные технологии.
4. Биомедицинские и ветеринарные технологии.
5. Геномные, протеомные и постгеномные технологии.
6. Клеточные технологии.
7. Компьютерное моделирование наноматериалов, наноустройств и нанотехнологий.
8. Нано-, био-, информационные, когнитивные технологии.
9. Технологии атомной энергетики, ядерного топливного цикла, безопасного обращения с радиоактивными отходами и отработавшим ядерным топливом.
10. Технологии биоинженерии.
11. Технологии диагностики наноматериалов и наноустройств.
12. Технологии доступа к широкополосным мультимедийным услугам.
13. Технологии информационных, управляющих, навигационных систем.
14. Технологии наноустройств и микросистемной техники.

Перечень критических технологий РФ
(утв. Указом Президента РФ от 7 июля 2011 г. N 899)

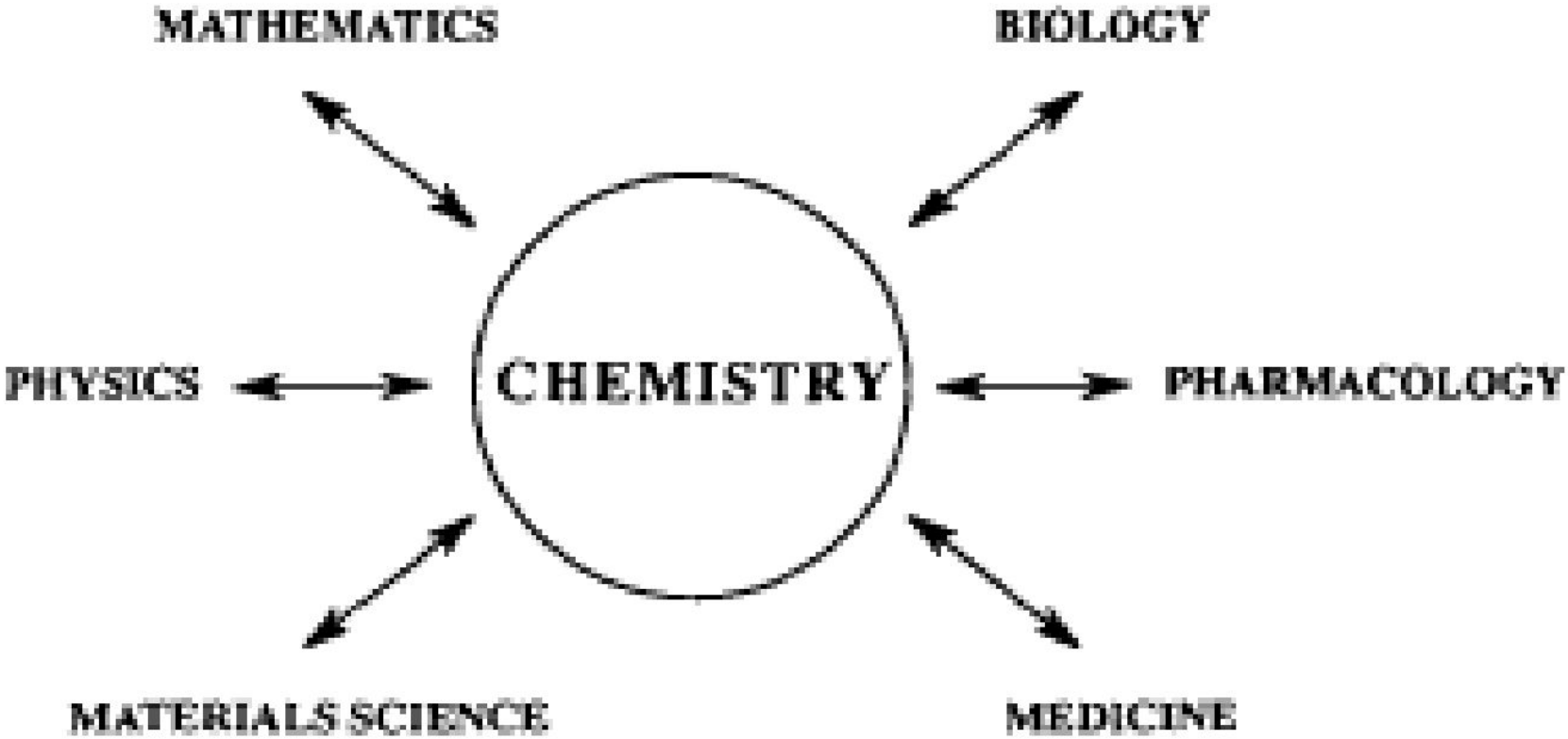
15. Технологии новых и возобновляемых источников энергии, включая водородную энергетику.
16. Технологии получения и обработки конструкционных наноматериалов.
17. Технологии получения и обработки функциональных наноматериалов.
18. Технологии и программное обеспечение распределенных и высокопроизводительных вычислительных систем.
19. Технологии мониторинга и прогнозирования состояния окружающей среды, предотвращения и ликвидации ее загрязнения.
20. Технологии поиска, разведки, разработки месторождений полезных ископаемых и их добычи.
21. Технологии предупреждения и ликвидации чрезвычайных ситуаций природного и техногенного характера.
22. Технологии снижения потерь от социально значимых заболеваний.
23. Технологии создания высокоскоростных транспортных средств и интеллектуальных систем управления новыми видами транспорта.
24. Технологии создания ракетно-космической и транспортной техники нового поколения.
25. Технологии создания электронной компонентной базы и энергоэффективных световых устройств.
26. Технологии создания энергосберегающих систем транспортировки, распределения и использования энергии.
27. Технологии энергоэффективного производства и преобразования энергии на органическом топливе.

В 1990 г в журнале *Angew. Chem. Int. Ed. (Doi:10.1002/anie.199013201)* была опубликована статья проф. Зеебаха «Organic Synthesis—Where now?» в которой была приведен критический обзор современных подходов и прогнозы на будущее.

30 лет (2020 г) спустя в этом же журнале появилась статья посвященная краткому изложение текущего состояния дел в органическом синтезе с основными изменениями за последние три десятилетия.

“Organic synthesis—Where now?” is thirty years old. A reflection on the current state of affairs.

Angew. Chem. Int. Ed. 10.1002/anie.202006717


MATHEMATICS
BIOLOGY
PHYSICS
CHEMISTRY
PHARMACOLOGY
MATERIALS SCIENCE
MEDICINE

Спасибо за внимание !