

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
Східноєвропейський національний університет імені Лесі Українки
Кафедра неорганічної та фізичної хімії

ЗАТВЕРДЖЕНО

Проректор з наукової
роботи та інновацій
проф. Бояр А. О.

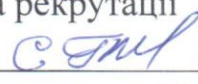
«__» _____ 20__
р.



ЗАТВЕРДЖЕНО

Проректор з науково-педагогічної
і навчальної роботи та рекрутації
проф. Гаврилюк С. В.

«__» _____ 20__ р.



НОВІТНІ АСПЕКТИ РОЗВИТКУ СУЧАСНОЇ ХІМІЇ

Програма
нормативної навчальної дисципліни

підготовки: **доктора філософії**

галузі знань: **10 Природничі науки**

спеціальності: **102 Хімія**

Луцьк – 2016

Програма базової навчальної дисципліни «Новітні аспекти розвитку сучасної хімії» для підготовки докторів філософії (PhD) за освітньо-науковою програмою «Хімія». - _____
травня 2016 р. - 10 с.

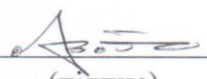
Розробники:

проф, д.х.н., професор кафедри неорганічної та фізичної хімії  **Олексеюк І.Д.**
доцент, к.х.н., доцент кафедри неорганічної та фізичної хімії  **Іващенко І.А.**

Рецензент:

доцент, д.х.н., завідувач кафедрою екології та охорони навколишнього середовища  **Гулай Л.Д.**

Програма навчальної дисципліни «Новітні аспекти розвитку сучасної хімії» затверджена на засіданні **кафедри неорганічної та фізичної хімії**
протокол № 9 від 19.04. 2016 р.

Завідувач кафедри:  **Олексеюк І.Д.**
(підпис)

Програма навчальної дисципліни «Новітні аспекти розвитку сучасної хімії» схвалена **науково-методичною комісією хімічного факультету**
протокол № 12 від 11.05. 2016 р.

Голова науково-методичної комісії факультету  **Музиченко О.С.**

Програма навчальної дисципліни схвалена науково-методичною радою університету
протокол № 10 від 15.06. 2016 р.

_____ (_____)

Робоча програма навчальної дисципліни схвалена науковою радою університету
протокол № 11 від 16.06. 2016 р.

_____ (_____)

Новітні аспекти розвитку хімії – це сукупність знань про інновації у хімічній галузі. Хімія постійно розвивається як наука не лише в теоретичному аспекті. На сучасному рівні розвитку людства хімічні відкриття набули величезного практичного значення у найрізноманітніших сферах діяльності людини. Сучасна хімія розширює свої горизонти, активно включається в області, які для „класичної” хімії не викликали зацікавленості або були недосяжні, і безперервно коригується з урахуванням актуальних, в тому числі і життєво важливих проблем, що виникають у процесі розвитку людства. В останні сто - двісті років хімія поступово перетворюється з споглядальної науки в інструмент вирішення глобальних проблем людства: неминучого зміни клімату та екологічної ситуації на всіх континентах земної кулі, боротьби з природними катаклізмами і екологічними катастрофами, прагнення людства до збільшення тривалості життя і тривалості активного віку людини, боротьби з голодом і бідністю, боротьби з неминуче зменшуваними запасами енергоресурсів і пошуку нових альтернативних і високоефективних джерел енергії та ін. При цьому змінюються не тільки інтереси хіміків, трансформуючись від констатації факту і прийняття його як належного, до реалізації цілеспрямованого і контрольованого синтезу; від систематизації випадково отриманих фактів і пошуку нових хімічних елементів, а також способів синтезу нових речовин до отримання, моделювання та дизайну нових конструкційних матеріалів, але змінюються і самі дослідники, які перестають бути сторонніми спостерігачами, а стають активними учасниками хімічного процесу.

Предметом вивчення навчальної дисципліни є сучасні проблеми отримання і дослідження перспективних речовин і матеріалів; наноречовини, наноматеріали, нанотехнології; супрамолекулярні системи в науці і техніці; неорганічна хімія майбутньому; спінова хімія.

Міждисциплінарні зв'язки: фізична хімія, квантова фізика, фізика загальна, вища математика, кристалохімія, неорганічна хімія, аналітична хімія, хімія ВМС, органічна хімія.

Програма навчальної дисципліни складається з таких **змістових модулів**:

1. хімія перспективних речовин і матеріалів;
2. наноречовини, наноматеріали, нанотехнології; супрамолекулярні системи в науці і техніці; спінова хімія;
3. сучасні методи дослідження речовини
4. рентгеноструктурний аналіз;
5. метод монокристалу

Мета та завдання навчальної дисципліни

1.1. Основна мета - познайомити здобувачі наукового ступеня доктора філософії з сучасними напрямками розвитку хімії, в першу чергу такими, як нанохімія, нанотехнологія, наноіндустрія, супрамолекулярна хімія; показати здобувачам наукового ступеня доктора філософії як на сучасному етапі розвитку науки вирішується корінь проблема хімії - з'ясування взаємозв'язку між структурою та властивостями речовин і одержання на цій науковій базі речовин і матеріалів із заданими властивостями. У представленій програмі курсу зроблено спробу відбити важливі проблеми сучасної хімії і тим самим сприяти актуалізації освіти і вибудовуванню взаємозв'язку теоретичних хімічних розробок з прикладними областями.

1.2. Завдання курсу „Новітні аспекти розвитку хімії” наступні: показати зв'язок інновацій у хімічній галузі з науками: фізикою, біологією, медициною, екологією та з практичними сферами діяльності: пошуком альтернативних джерел енергії, пошуком нових матеріалів для нелінійної оптики, волоконної оптики та квантової електроніки, розробкою новітніх методів дослідження речовин.

1.3. Здобувачі наукового ступеня доктора філософії повинні:

знати :

- основні напрями в сучасній хімічній науці і технології;
- основні напрями конструювання хімічних процесів;
- основні поняття і терміни сучасної хімії;
- сучасні методи дослідження речовин;

вміти :

доказово обговорювати теоретичні та практичні проблеми сучасної хімії;
застосовувати отримані знання та навички при виконанні дисертаційної роботи і в майбутній професійній діяльності.

На вивчення навчальної дисципліни відводиться 180 годин / 6 кредитів СКТС.

1. Інформаційний обсяг навчальної дисципліни

Змістовий модуль 1. Хімія перспективних речовин та матеріалів.

Тема 1. Нові функціональні матеріали.

Систематика матеріалів. Класифікація функціональних неорганічних матеріалів по складу, структурі, властивостям і областям застосування. Кристалохімічний дизайн неорганічних речовин і матеріалів. Дизайн властивостей за рахунок використання фазових перетворювань. Можливості і межі розширення палітри нових функціональних матеріалів. Проектування матеріалів із заданими функціональними властивостями для цілеспрямованого використання в різних галузях виробництва і споживання. Нові аспекти управління хімічними реакціями і реальні можливості в цій області. Хімічний аналіз і експериментальні методи вивчення будови і властивостей хімічних сполук. Хімія і четвертий агрегатний стан. Реакції при високих тисках. Отримання штучних дорогоцінних каменів. Фізико-хімічні характеристики функціональних матеріалів. Механічні, захисно-корозійні властивості матеріалів, гідрофільно-гідрофобні властивості поверхні твердих тіл. Продукти тонкого органічного синтезу. Полімери та матеріали на їх основі.

Тема 2. Матеріали для електроніки, оптоелектроніки, напівпровідникової техніки.

Хімічні проблеми твердотільної електроніки. Хімія твердих поверхонь. Сучасні аспекти дослідження конденсованих фаз. Високотемпературні надпровідники. Матеріали з іонною і змішаною провідністю. Нові

форми вуглецю і матеріали на їх основі. Склоподібні матеріали. Тонкі плівки і функціональні покриття. Полімерні напівпровідники, провідники і фотопровідники. Органічні напівпровідники.

Тема 3. Композиційні матеріали. Каталізатори.

Біонеорганічні матеріали. Матеріали з властивостями, обумовленими межами розділу в полікристалічних системах. Керамічні матеріали і композити: процеси їх отримання та перспективи використання. Нові види функціональної оксидної і безкисневої кераміки. Керамічні композити. Полімерні композиційні матеріали. Склопластики, вуглепластики, органопластики. Сучасні фізико-хімічні процеси отримання ультрадисперсних і мезоструктурних матеріалів: золь-гель метод, кріохімічний синтез, піроліз аерозолів, плазмохімічний синтез. Використання ультрадисперсних матеріалів для отримання композитів, адсорбентів і каталізаторів. Мезоструктуровані матеріали: особливості будови, синтез, властивості. Поділ сумішей та отримання особливо чистих речовин. Створення та розробка каталізаторів нового покоління: гетерогенний і гомогенний каталіз; фотокаталіз і електрокаталіз.

Змістовий модуль 2. Наноречовини, наноматеріали, нанотехнології; супрамолекулярні системи в науці і техніці; спінова хімія.

Тема 1. Наноречовини, наноматеріали, нанотехнології.

Отримання наночастинок. Хімічне, фотохімічне і радіаційне відновлення. Плазмене, лазерне, електропідбивне і термічне випаровування. Аерозольні методи. Низькотемпературна конденсація. Золь-гель метод. Механо- і сонохімічні методи. Інструментальні мікроскопічні методи. Метод матричної ізоляції та реакції у твердій фазі. Стабільність і активність атомів і кластерів наночастинок. Енергія наносистеми та її використання в хімії. Залежність хімічних і фізичних властивостей від розмірів. Наноречовини в науці і техніці: наноелектроніка, сенсори, каталітичні системи, надтверді, зносостійкі,

суперпластичні речовини і матеріали, захисні покриття, магнітні рідини, носії пам'яті та речовини і матеріали іншого призначення.

Тема 2. Супрамолекулярні системи в науці і техніці, спінова хімія.

Від супермолекул до супрамолекулярних ансамблів. Від ендорецепторів до екзорецепторів. Молекулярне розпізнавання на поверхні. Молекулярні і супрамолекулярні пристрої. Супрамолекулярна фотохімія, молекулярні і супрамолекулярні фотонні пристрої. Молекулярні і супрамолекулярні електронні пристрої. Молекулярні дроти, молекулярні магнітні пристрої, перемикаючі пристрої, іони та молекулярні сенсори. Самозборка і самоорганізація супрамолекулярних систем. Перспективи створення систем, здатних еволюціонувати.

Змістовий модуль 3. Сучасні методи дослідження речовини.

Електрона мікроскопія. Атомно-силова мікроскопія. Тунельна скануюча мікроскопія. Рентгенівські методи: дифракція електронів, рентгенфлуоресценція, рентгенфотоелектрона спектроскопія. Видима і ультрафіолетова спектроскопія. Люмінесценція. Спектроскопія електронного та ядерного магнітного резонансу. Масспектрометрія. Раман-, ІЧ-спектрометрія.

Змістовий модуль 4. Рентгеноструктурний аналіз

Тема 1. Методи рентгеноструктурного аналізу

Метод порошку (полікристалу), принцип методу. Метод Дебая-Шерера. Дифрактометричні методи; індексування дифрактограм. Можливості та завдання методу.

Тема 2. Інтенсивність інтерференційних максимумів на рентгенограмах

Розсіяння променів примітивною ґраткою. Вплив розміщення атомів у середині комірки (складні ґратки). Поняття структурної амплітуди і структурного множника. Експоненціальна та тригонометрична форма запису для формул структурних амплітуд. Вплив просторового розміщення електронів у атомі. Атомна функція розсіяння (атомний

множник інтенсивності, атомний фактор). Розподіл електронної густини в елементарній комірці. Вплив теплових коливань на розсіяння рентгенівських променів кристалом. Поняття температурного множника інтенсивності. Фактор (множник) повторюваності та його зв'язок із простими формами кристалічних многогранників. Інтегральна інтенсивність відбить. Множник Лоренца. Вплив поглинання рентгенівських променів зразком. Абсорбційний фактор.

Тема 3. Рентгенофазовий аналіз

Два етапи визначення кристалічної структури речовини. Завершення першого етапу дослідження: встановлення експериментальної та рентгенівської густини досліджуваної речовини. Розрахунок розмірів елементарної комірки та кількості формульних одиниць і кількості атомів. Встановлення структурного типу розрахованої сполуки. Ідентифікація сполуки рентгенівськими методами. Програма PowderCell. Фактор розбіжності. Фазовий аналіз речовини порошковими методами. Програма Match! 3.1.0.

Тема 4. Другий етап дослідження структури.

Розрахунок теоретичних інтенсивностей рефлексів за положеннями атомів у елементарній комірці. Проблема початкових фаз структурних амплітуд. Метод міжатомної функції (синтез Паттерсона). Метод важкого атома. Прямий (статистичний) метод визначення початкових фаз структурних амплітуд. Взаємозв'язок між знаками структурних амплітуд сильних відбить у центросиметричній та нецентросиметричній структурі. Фактор розбіжності.

Змістовий модуль 5. Метод монокристалу

Монокристалічні методи у рентгеноструктурному аналізі. Метод Лауе; можливості та завдання методу. Вивід монокристалу на досліджуваний напрямок. Метод обертового монокристалу. Робота в програмній оболонці WinGX. Розшифровка кристалічних структур на основі отриманих експериментальних даних. Робота з програмами Shelx и Sir.

Практичні питання розшифровки кристалічних структур неорганічних сполук: робота з файлами *.ins, *.res, *.lst, визначення координат і ступеня заселеності позицій, теплових факторів, межатомних відстаней. Уточнення кристалічних структур: визначення "легких" атомів, анізотропне уточнення теплових параметрів, аналіз заселеності конкретних позицій, використовуючи дані хімічного аналізу. Формування кінцевих даних. Файл .cif (структурний інформаційний файл). Візуалізація структурних даних: програма Diamond.

2. Форма підсумкового контролю успішності навчання іспит

3. Методи та засоби діагностики успішності навчання

Проводиться поточне тестування при проведенні практичних робіт, написання трьох модульних контрольних робіт, перевірка індивідуального завдання.

4. Список джерел

1. Пиментейл Дж. Возможности химии сегодня и завтра / Пиментейл Дж., Кунрод Дж. – М.: Мир, 1992. – 288 с.
2. Хаускрофт К. Современный курс общей химии. В 2-х т.: Пер. с англ. / Хаускрофт К., Констебл Э. – М.: Мир, 2002. – 540 с.
3. Юсфин, Ю.С. Промышленность и окружающая среда. / Юсфин, Ю.С., Леонтьев, Л.И., Черноусов, П.И. – М.: ИКЦ «Академия», 2002. – 469 с.
4. Гринвуд Н. Химия элементов. В 2-х т.: Пер. с англ. / Н. Гринвуд, А. Эрншо; – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2008. – 540 с.
5. Кнотько А.В. Химия твердого тела / Кнотько А.В., Пресняков И.А., Третьяков Ю.Ф. – М.: Изд. центр «Академия», 2006. – 248 с.
6. Порай-Кошиц М. А. Основы структурного анализа химических соединений / Порай-Кошиц М. А. – М.: «Высшая школа», 1989. - 192 с.
7. Ковба Л.М. Рентгенография в неорганической химии / Ковба Л.М. – М.: Изд-во Московского у-та. 1991. - 255 с.

8. Y. Waseda X-Ray Diffraction Crystallography. Introduction, Examples and Solved Problems / E. Matsubara, K. Shinoda – Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg. 2011. - 310 p.

Додаткова література

1. Уваров Н.В. Размерные эффекты в химии гетерогенных систем. / Уваров Н.В., Болдырев В.В. // Успехи химии.- 2001.- Т. 70, № 4.- С. 307-329.
2. Бухтияров В.И. Металлические наносистемы в катализе / Бухтияров В.И., Слинько М.Г.// Успехи химии.- 2001.- Т.70, № 2.- С. 167-181.
3. Сергеев Г.Б. Нанохимия металлов / Сергеев Г.Б.// Успехи химии.-2001.- Т. 70, № 10.- С. 915-933.
5. Раков Э.Г. Химия и применение углеродных нанотрубок / Раков Э.Г.// Успехи химии.-2001.-Т.70, № 10.- С.934-973.
6. Тарасов Б.П. Водородсодержащие углеродные наноструктуры: синтез и свойства / Тарасов Б.П., Гольдшлегер Н.Ф., Моравский А.П. // Успехи химии.-2001.-Т.70, № 2.- С. 149-166.
8. Суздалев И.П. Нанокластеры и нанокластерные системы. Организация, взаимодействие, свойства / Суздалев И.П., Суздалев П.И. // Успехи химии.- 2001.- Т. 70, № 3.- С.203-240.
9. Ролдугин В.И. Квантоворазмерные металлические коллоидные системы / Ролдугин В.И. // Успехи химии.-2000.- Т.69, № 10.- С.899-923.
10. Сумм Б.Д. Объекты и методы коллоидной химии в нанохимии / Сумм Б.Д., Иванова Н.И. // Успехи химии.- 2000.- Т.69, № 11.- С. 995-1008.
11. Петрий О.А. Размерные эффекты в электрохимии / Петрий О.А., Цирлина Г.А.// Успехи химии.- 2001.- Т.70, № 4.- С.330-344.
12. Крылов О.В. Ограниченность ресурсов как причина предстоящего кризиса / Крылов О.В. // Вестник Российской Академии наук, 2000, т.70, № 2. С. 136 – 146.