

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

Робоча програма
нормативної навчальної дисципліни

підготовки: доктора філософії

галузі знань: 10 Природничі науки

спеціальності: 102 Хімія

Луцьк – 2016

Робоча програма базової навчальної дисципліни «Новітні аспекти розвитку сучасної хімії» для підготовки докторів філософії (PhD) за освітньо-науковою програмою «Хімія».
- 11 травня 2016 р. - 12 с.

Розробники:

проф, д.х.н., професор кафедри неорганічної та фізичної хімії  Олексіюк 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.

Робоча 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:


(підпис)

Олексіюк І.Д.

Робоча 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.

Робоча 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.

_____ (_____)

© Олексіюк І.Д., Іващенко І.А., 2016

1. Опис навчальної дисципліни

Найменування показників	Галузь знань, спеціальність, рівень вищої освіти	Характеристика навчальної дисципліни
		денна форма навчання
Кількість кредитів 6	10 природничі науки	нормативна
Модулів 4	102 хімія	Рік підготовки 2
		Семестр 4
		Лекції 44 год.
Загальна кількість годин 180		Практичні 20 год.
Тижневих годин (для денної форми навчання):	Доктор філософії (PhD)	Самостійна робота 116 год.
аудиторних 4		Консультації: немає
самостійної роботи 8		Форма контролю: <u>екзамен</u>

1. Мета та завдання навчальної дисципліни

1.1. Основна мета - познайомити здобувачів 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 проблеми 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 здобувачів наукового ступеня доктора філософії, і вибудовування в їх розумінні 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; показати зв'язок інновацій у хімічній галузі з практичними сферами діяльності: пошук альтернативних джерел енергії, пошук нових матеріалів для нелінійної оптики, волоконної оптики та квантової електроніки, способи утилізації відходів.

1.3. Здобувачів 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.

2. Програма 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, електропідривне 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- спектроскопія.

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 відбиттів 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.

3. Структура навчальної дисципліни

Назви змістових модулів і тем	Кількість годин			
	Усього	у тому числі		
		Лек.	Практ.	Сам. роб.
1	2	3	4	5
Змістовий модуль 1. Хімія перспективних речовин та матеріалів.				
Тема 1. Нові функціональні матеріали.	12	4	-	8
Тема 2. Матеріали для електроніки, оптоелектроніки, напівпровідникової техніки.	13	4	1	8
Тема 3. Композиційні матеріали. Каталізатори.	10	2	-	8
Разом за змістовим модулем 1	35	10	1	24
Змістовий модуль 2. Наноречовини, наноматеріали, нанотехнології; супрамолекулярні системи в науці і техніці; спінова хімія.				
Тема 1. Наноречовини, наноматеріали, нанотехнології.	17	4	1	12
Тема 2. Супрамолекулярні системи в науці і техніці, спінова хімія.	14	2	-	12
Разом за змістовим модулем 2	31	6	1	24
Змістовий модуль 3. Сучасні методи дослідження речовини.				
Тема 1. Сучасні методи дослідження речовини	18	4	2	12
Разом за змістовим модулем 3	18	4	2	12
Змістовий модуль 4. Рентгеноструктурний аналіз.				
Тема 1. Методи рентгеноструктурного аналізу	14	4	2	8
Тема 2. Інтенсивність інтерференційних максимумів на рентгенограмах	14	4	2	8
Тема 3. Рентгенофазовий аналіз.	16	4	4	8
Тема 4. Другий етап дослідження структури.	20	4	4	12
Разом за змістовим модулем 4	64	16	12	36
Змістовий модуль 5. Метод монокристалу.				
Тема 1. Метод монокристалу	32	8	4	20
Разом за змістовим модулем 5	32	8	4	20
Усього годин:	180	44	20	116

4. Теми практичних занять

№ з/п	Тема	Кількість годин
1	Матеріали для електроніки, оптоелектроніки, напівпровідникової техніки.	1
2	Наноречовини, наноматеріали, нанотехнології.	1
3	Сучасні методи дослідження речовини.	2
4	Методи рентгеноструктурного аналізу	2
5	Інтенсивність інтерференційних максимумів на рентгенограмах.	2
6	Рентгенофазовий аналіз.	4
7	Другий етап дослідження структури.	4
8	Метод монокристалу.	4
	Разом	20

5. Самостійна робота

№ з/п	Тема	Кількість годин
1	Можливості і межі розширення палітри нових функціональних матеріалів. Проектування матеріалів із заданими функціональними властивостями для цілеспрямованого використання в різних галузях виробництва і споживання.	8
2	Склоподібні матеріали. Тонкі плівки і функціональні покриття. Полімерні напівпровідники, провідники і фотопровідники. Органічні напівпровідники.	8
3	Керамічні композити. Полімерні композиційні матеріали. Склопластики, вуглепластики, органопластики.	8
4	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.	6
5	Молекулярні і супрамолекулярні пристрої.	6
6	Техніка та технології майбутнього.	6
7	Прогнози розвитку освіти в цілому і хімічної освіти зокрема. Портрет хіміка майбутнього.	6

8	Електрона мікроскопія..	6
9	Атомно-силова мікроскопія. Тунельна скануюча мікроскопія.	6
10	Рентгенівські методи: дифракція електронів, рентгенфлуоресценція, рентгенфотоелектрона спектроскопія	36
11	Метод міжатомної функції (синтез Паттерсона)..	4
12	Метод важкого атома..	8
13	Прямий (статистичний) метод визначення початкових фаз структурних амплітуд.	8
	Разом	116

6. **Методи навчання:** лекції, практичні, контрольні роботи
7. **Форма підсумкового контролю успішності навчання:** іспит
8. **Методи та засоби діагностики успішності навчання:** Проводиться поточне тестування при проведенні практичних робіт, написання трьох модульних контрольних робіт.
9. **Розподіл балів, які отримують здобувачі наукового ступеня доктора філософії**
В таблиці наведені максимальні бали за заняття.

Поточний контроль (мах = 40 балів)										Модульний контроль (мах = 60 балів)			Загальна кількість балів	
Модуль 1										Модуль 2				
Зм. мод. 1			Зм. мод. 2		Зм. мод 3	Зм. мод. 4				Зм. мод. 5	МКР 1	МКР 2		МКР 3
T 1	T 2	T 3	T 1	T 2	T 1	T 1	T 2	T 3	T 4	T 1	20	20	20	100
2	2	1	2,5	2,5	5	5	5	5	5	5				

Шкала оцінювання (національна та ECTS)

Сума балів за всі види навчальної діяльності	Оцінка ECTS	Оцінка за національною шкалою	
		для екзамену, курсової роботи (проекту), практики	для заліку
90 – 100	A	Відмінно	Зараховано
82 – 89	B	Добре	
75 - 81	C		
67 -74	D	Задовільно	
60 - 66	E		
1 – 59	Fx	Незадовільно	Незараховано (з можливістю повторного складання)

10. Методичне забезпечення

1. Олексеюк І.Д. Хімія твердого тіла / Парасюк О.В., Іващенко І.А., Луцьк : Вежа-Друк, 2015. – 316 с. <http://esnuir.eenu.edu.ua/handle/123456789/8767>
2. Олексеюк І. Одержання і дослідження неорганічних напівпровідників: лабораторний практикум / Олексеюк І., Парасюк О. – Луцьк: Вежа, 2002.– 278 с.

11. 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.: БИНOM. 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., Слинко 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.