

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ  
УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ  
«ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ПЕДАГОГИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»  
(ТГПУ)

Утверждаю



декан биолого-химического факультета

2014 года

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ**  
**М.2.01 АКТУАЛЬНЫЕ ЗАДАЧИ СОВРЕМЕННОЙ ХИМИИ**

Трудоёмкость (в зачетных единицах) – 6

Направление подготовки: 04.04.01 Химия

Магистерская программа: Физическая химия

Степень (квалификация) выпускника: магистр

**1. Цель изучения дисциплины:** приобретение знаний о современных направлениях развития химии и способах осуществления химических процессов с минимизацией воздействия на окружающую среду.

**Задачи:**

1. Изучение свойств, методов получения и областей применения фуллеренов, графена.
2. Изучение свойств, методов получения и областей применения силиконов.
3. Изучение свойств, методов получения и областей применения композитов.
4. Изучение свойств и областей применения биоматериалов.
5. Изучение принципов и направлений зеленой химии.

**2. Место учебной дисциплины в структуре основной образовательной программы.**

Дисциплина «Актуальные задачи современной химии» относится к базовой части профессионального цикла учебного плана. Она изучается на I курсе, для освоения дисциплины студенты используют знания, умения и навыки, сформированные в процессе освоения дисциплин бакалавриата: общая, неорганическая, аналитическая, физическая и прикладная химия.

**3. Требования к уровню освоения дисциплины.**

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование и развитие **общекультурных компетенций:**

1. способностью ориентироваться в условиях производственной деятельности и адаптироваться в новых условиях (ОК-1),
2. умением принимать нестандартные решения (ОК-2),
3. пониманием философских концепций естествознания, роли естественных наук (химии в том числе) в выработке научного мировоззрения (ОК-4),
4. владением современными компьютерными технологиями, применяемыми при обработке результатов научных экспериментов и сборе, обработке, хранении и передаче информации при проведении самостоятельных научных исследований (ОК-5),

**профессиональных компетенций:**

*в научно-исследовательской деятельности:*

1. наличием представления о наиболее актуальных направлениях исследований в современной теоретической и экспериментальной химии (синтез и применение веществ в наноструктурных технологиях, исследования в экстремальных условиях, химия жизненных процессов, химия и экология и другие) (ПК -1),
2. знанием основных этапов и закономерностей развития химической науки, пониманием объективной необходимости возникновения новых направлений, наличием представления о системе фундаментальных химических понятий и методологических аспектов химии, форм и методов научного познания, их роли в общеобразовательной профессиональной подготовке химиков (ПК -2),
3. наличием опыта профессионального участия в научных дискуссиях (ПК -6),

*в научно-педагогической деятельности:*

4. пониманием принципов построения преподавания химии в образовательных учреждениях высшего профессионального образования (ПК -8),
5. владением методами отбора материала, преподавания и основами управления процессом обучения в образовательных учреждениях высшего профессионального образования (ПК -9).

**В результате изучения дисциплины студент должен знать:**

- актуальные направления исследований в современной теоретической и экспериментальной химии,
- принципы и направления зеленой химии.

**владеть:**

- основными понятиями и законами современной химии,
- знаниями о современных методах получения неорганических и органических веществ и материалов на их основе, областях их применения, методах исследования в области химических наук.

**уметь:**

- доказательно обсуждать теоретические и практические проблемы химии,
- анализировать результаты научных исследований, опубликованные в научной литературе,
- использовать полученные знания в научно-педагогической деятельности в вузе или образовательном учреждении среднего профессионального образования.

**4. Общая трудоемкость дисциплины 6 зачетных единиц и виды учебной работы.**

Вид учебной работы	Трудоемкость (в соответствии с учебным планом) (час)	Распределение по семестрам (в соответствии с учебным планом) (час)	
	Всего - 216	1 семестр	2 семестр
Аудиторные занятия	105	54	51
Лекции	35	18	17
Практические занятия			
Семинары	70	36	34
Лабораторные работы			
Другие виды аудиторных работ: занятия в интерактивной форме	35	18	17
Другие виды работ: экзамен	27	-	27
Самостоятельная работа	84	42	42
Курсовой проект (работа)			
Реферат			
Расчётно-графические работы			
Формы текущего контроля		индивидуальные задания	индивидуальные задания
Формы промежуточной аттестации в соответствии с учебным планом		зачет	экзамен

## 5. Содержание учебной дисциплины.

### 5.1. Разделы учебной дисциплины.

№ п/п	Наименование раздела дисциплины (темы)	Аудиторные часы					Самостоятельная работа (час)
		всего	лекции	практические (семинары)	лабораторные	В т.ч. интерактивные формы обучения	
1	Углеродсодержащие материалы	10	4	6		2	8
2	Силиконы	6	2	4		1	6
3	Композиты	14	6	8		6	10
4	Зеленая химия: принципы и направления.	3	1	2			4
5	Сверхкритические флюиды	4	2	2		1	4
6	Ионные жидкости	5	1	4		1	2
7	Альтернативное топливо	6	2	4		2	4
8	Биоматериалы	4		4		3	4
9	Электропроводящие полимеры	2		2		2	
10	Методы исследования механизма органических реакций.	10	4	6		4	6
11	Орбитальные взаимодействия в согласованных и многостадийных органических реакциях.	10	4	6		4	8
12	Основные закономерности различных типов органических реакций с точки зрения орбитальных взаимодействий.	9	3	6		3	8
13	Донорно-акцепторные взаимодействия в органической химии.	8	2	6		2	8
14	Использование квантово-химических параметров для анализа механизма органических реакций.	8	2	6		2	6
15	Радикалы в органических реакциях.	6	2	4		2	6
	Итого	105	35	70		35/33%	84

## 5.2. Содержание разделов дисциплины:

5.2.1. *Углеродсодержащие материалы.* Модификации углерода. Фуллерены. История открытия. Природа химической связи и строение фуллеренов. Методы получения фуллеренов (лазерное и термическое испарение графита, электродуговой синтез, пиролиз углеродсодержащих соединений). Физические свойства фуллеренов (проводимость, сверхпроводимость, оптические и сорбционные свойства). Производные фуллеренов (гидриды, оксиды, галогениды и др.). Получение и свойства. Применение фуллеренов (электроника, энергетика, медицина). Фуллерит. Графен. История открытия. Получение, свойства и перспективы использования. Углеродные нанотрубки. Одностенные и многостенные нанотрубки. Строение и способы получения нанотрубок. Применение.

5.2.2. *Силиконы.* Структура силиконов. Прочность связей, длина связей, углы между связями. Номенклатура силиконов. Силиконы: жидкие, эластомеры/резины (герметики/клеи, высокоплотная, жидкая, фторсиликоновая, модельная резины), гели (диэлектрические, рецептурные), смолы (растворенные, без растворителя, твердые хлопья). Получение силиконов. Свойства силиконов: тепловые, физико-механические, электрические, эксплуатационные. Применение силиконов (автомобильная промышленность, строительство, электроника, энергетика, текстильное производство, бумажное производство, лакокрасочные материалы, медицина, косметика и предметы гигиены). Методы производства изделий из силикона: экструзия, каландрование, дисперсионное покрытие, литье под давлением (жидкая силиконовая резина).

5.2.3. *Композиты.* Классификация композитов (по составу, по структурному признаку, по свойствам и функциям). Матрица композитов. Требования, предъявляемые к матрицам композитов. Стеклопластики. Стекловолоконные наполнители. Полимерные матрицы. Термореактивные (фенольные, эпоксидные) и термопластичные (полиамиды, полипропилен, поликарбонаты) матрицы. Применение стеклопластиков. Углепластики. Углеродное волокно. Получение, свойства. Полимерные матрицы. Физико-механические свойства углепластиков. Области применения углепластиков. Сравнение свойств стеклопластиков, углепластиков и металлов. Керамические композиты. Получение, свойства, применение. Металлические композиционные материалы (МКМ). Металлы и сплавы, используемые в качестве матриц в МКМ. Армирующие компоненты, используемые в МКМ. Свойства и области применения МКМ.

5.2.4. *Зеленая химия: принципы и направления.* Принципы зеленой химии. Направления развития зеленой химии. Атомная эффективность.

5.2.5. *Сверхкритические флюиды.* Сверхкритическое состояние вещества. Условия получения сверхкритических флюидов. Физические свойства сверхкритических флюидов. Преимущества использования сверхкритических жидкостей. Области применения сверхкритических флюидов. Синтез новых веществ (органических, полимеров, комплексов металлов). Экстракционные процессы с использованием сверхкритических флюидов.

5.2.6. *Ионные жидкости.* Вещества, относимые к ионным жидкостям. Способы получения. Свойства ионных жидкостей: плотность, вязкость, термическая устойчивость, электрохимические свойства, Ионные жидкости в экстракции, электрохимическом анализе, вольтамперометрии, каталитических процессах. Композиционные материалы на основе ионных жидкостей и углеродных нанотрубок.

5.2.7. *Альтернативное топливо.* Современные требования к энергетическим системам. Возобновляемые источники энергии. Водородная энергетика. Способы получения водорода. Проблема хранения водорода. Водородоаккумулирующие материалы.

5.2.8. *Биоматериалы.* Современные биоматериалы. Классификация биоматериалов. Требования, предъявляемые к материалам биомедицинского назначения. Материалы, используемые в медицине: металлы и сплавы, керамика, полимеры, композитные материалы.

5.2.9. *Электропроводящие полимеры.* Полипиррол, политиофен, полианилин. Получение, свойства и применение (аккумуляторные батареи, химически модифицирован-

ные электроды, управляемые оптические устройства, хемотронные и сенсорные устройства).

5.2.10. *Методы исследования механизма органических реакций.* Основные типы реакций органических соединений: перегруппировки, рекомбинация и диссоциация, бимолекулярное замещение, перенос электрона. Деление реакций на нуклеофильные, электрофильные и гомолитические. Общая классификация механизмов. Понятие о переходном состоянии. Стадии изучения механизма реакций: материальный баланс, кинетика, стереохимические корреляции, изотопные и структурные метки, влияние заместителей, растворителя, катализаторов, поиск нестабильных интермедиатов. Термодинамические параметры реакций. Величина энтропии активации для реакций разных типов. Понятие о кинетическом и термодинамическом контроле реакций. Уравнение Гаммета. Константы заместителей и константы реакций, их знак и абсолютная величина. Константы  $\sigma^+$ ,  $\sigma^-$ ,  $\sigma^*$ ,  $\sigma_I$ . Стерические эффекты. Уравнение Тафта. Соотношение линейности свободных энергий в исследовании переходного состояния.

5.2.11. *Орбитальные взаимодействия в согласованных и многостадийных органических реакциях.* Характерные особенности: высокая стерео- и региоселективность, изменение селективности при переходе от термической к фотохимической активации. Молекулярно-орбитальная теория перициклических реакций. Разрешённые и запрещённые реакции; относительность такого разграничения. Объяснение разрешённых и запрещённых путей реакций методами возмущения МО, корреляционных диаграмм и ароматического и антиароматического переходного состояния. Сохранение орбитальной симметрии. Правила Вудворда-Хоффмана.

5.2.12. *Основные закономерности различных типов органических реакций с точки зрения орбитальных взаимодействий.* Построение молекулярных орбиталей бензола и монозамещённых бензолов. Ориентация и реакционная способность производных бензола в реакциях электрофильного замещения с точки зрения орбитальной теории. Орбитальный и зарядовый контроль. Факторы парциальных скоростей. Селективность и её связь со структурой переходного состояния. Энергия и симметрия граничных орбиталей дизамещённых бензолов. Орбитальные коэффициенты и ориентация нуклеофильного замещения в  $S_N2(Ar)$ , другие механизмы ароматического нуклеофильного замещения.

5.2.13. *Донорно-акцепторные взаимодействия в органической химии.* Донорно-акцепторные взаимодействия как элементарный акт многих органических и природных процессов. Кислоты Льюиса. Жёсткие и мягкие кислоты и основания. Орбитальный и зарядовый контроль. Применение принципа ЖМКО к органическим реакциям. Кислоты Брёнстеда. Связь между протонной и льюисовской основностью, уравнение Эдвардса. Разбавленные растворы. Сила кислот и оснований. Эффекты сольватации. Кислотный и основной катализ. Специфический и общий кислотный и основной катализ. Уравнение Брёнстеда. Кислотные функции и скорости реакций. Суперкислые среды. Превращения органических молекул в суперкислых средах.

5.2.14. *Использование квантово-химических параметров для анализа механизма органических реакций.* Расчет энергий МО: циклобутadiен, бензол, этилен, циклические полиены, молекулы с гетероатомами, полициклоароматические соединения. Электронные плотности, заряды, порядки связей, поляризуемости. Теплоты атомизации полиенов. Энергетические критерии ароматичности. Энергия резонанса. Расчет физических свойств сопряженных соединений. Индексы реакционной способности. Электрофильное и нуклеофильное замещение. Реакции радикального замещения. Реакции присоединения.

5.2.15. *Радикалы в органических реакциях.* Электронная структура радикалов. Устойчивые радикалы: бензильный, аллильный. Реакции радикального присоединения и замещения. Карбены: электронная структура, электрофильные, радикальные и нуклеофильные свойства карбенов. Перегруппировки в радикальных реакциях.

**5.3. Лабораторный практикум:** не предусмотрен

## **6. Учебно-методическое обеспечение дисциплины:**

### **6.1. Основная литература по дисциплине:**

1. Волков, Г. М. Объемные наноматериалы: учебное пособие для вузов/ Г. М. Волков.-М.: КНОРУС, 2011.- 168 с.
2. Воронов, В. К. Физика на переломе тысячелетий. Физические основы нанотехнологий : учебник/ В. К. Воронов, А. В. Подоплеслов, Р. З. Сагдеев.- М.: URSS, 2011.- 429 с.
3. Неволин, В. К. Квантовая физика и нанотехнологии / В. Неволин ; пер. на англ. С. Озерина.- М.: Техносфера, 2011.- 126 с.
4. Морозов, А.А. Физические методы исследования в органической химии. Спектроскопия радиооптического диапазона и масс-спектрометрия: учебное пособие / сост. А.А. Морозов. - Издательство Омского государственного университета им. Ф.М. Достоевского, 2009 г.

### **6.2. Дополнительная литература:**

1. Андриевский, Р. А. Наноструктурные материалы: учебное пособие для вузов/ Р. А. Андриевский, А. В. Рагуля.- М.: Академия, 2005.-178 с.
2. Гусев, А. И. Наноматериалы, наноструктуры, нанотехнологии/А. И. Гусев.- М.: Физматлит,2005.- 410 с.
3. Зелёная химия в России. Сборник статей под редакцией В.В. Лунина, П. Тундо, У.С. Локтевой. – М.: Издательство Московского университета, 2004. – 230 с.
4. Материаловедение и технология конструкционных материалов: учебник для вузов/ В. Б. Арзамасов, А. Н. Волчков, В. А. Головин и др. ; под ред. В. Б. Арзамасова, А. А. Черепанина.- М.: Академия, 2007.- 446 с.
5. Материаловедение и технология металлов: учебник для вузов/ Г. П. Фетисов, М. Г. Карпман, В. М. Матюнин и др.; под ред. Г. П. Фетисова.- Изд. 5-е, стереотип.- М.: Высшая школа, 2007.- 861 с.
6. Никелид титана: медицинский материал нового поколения/ В. Э. Гюнтер, В. Н. Ходоренко, Ю. Ф. Ясенчук и др.; НИИ медицинских материалов и имплантатов с памятью формы СФТИ при ТГУ.- Томск: Издательство МИЦ, 2006.-295 с.
5. Российский Химический Журнал.- 2006.- Том 50.- № 6. (Проблемы водородной энергетики).
6. Магдесиева, Т. В. Применение орбитального подхода в органической химии, Методическое пособие для студентов и аспирантов/ Магдесиева Т. В. М.: МГУ, 2008. -100 с.
7. Магдесиева, Т. В. Сборник задач по курсу лекций «Применение орбитального подхода в органической химии», Методическое пособие для студентов и аспирантов. / Магдесиева, Т. В., Сазонов, П. К.М.: МГУ, 2008. -75 с.
8. Полещук, О. Х. Компьютерное моделирование химических реакций : учебное пособие / О. Х. Полещук. - Томск: ТГПУ, 2007. - 176 с.
9. Полещук, О. Х. Компьютерное моделирование химических реакций: учебное пособие/ О. Х. Полещук, Д. М. Кижнер - Томск: ТГПУ, 2007. - 159 с.
10. Реутов, О. А. Органическая химия / Реутов О. А., Курц А. Л., Бутин К. П. - М.: Изд-во МГУ, т. 1-4, 1999. -.
11. Соловьёв, М. Е. Компьютерная химия / М. Е. Соловьёв, М. М. Соловьёв. –М.: Соломон-Пресс, 2005. - 536 с.
12. Минкин, В. И. Теория строения молекул / В. И. Минкин, Б. Я. Симкин, Р. М. Миняев. - Ростов/Дон.: Феникс, 1997. -560 с.
13. Pearson, R. G. Chemical Hardness / R. G. Pearson. -Wiley-VCH, 1997. -198 p.
14. Koch W. A Chemist's Guide to Density Functional Theory / W. Koch, M. C. Holthausen. -Wiley-VCH, 2000. -250 p.

### 6.3. Средства обеспечения освоения дисциплины:

#### Электронные ресурсы библиотеки ТГПУ:

- Архив журнала Science, The American Association for the Advancement of Science (AAAS) - Американская ассоциация по развитию науки - некоммерческая организация, сообщество ученых, созданное в целях поддержки науки, НП «НЭИКОН». Лицензионной договор № 316-РН-2011 от 01.09.2011 г. на период с 01.01.2012 – бессрочно. Сумма договора: бесплатно. Количество ключей (пользователей): со всех компьютеров вуза. <http://www.sciencemag.org/content/by/year#classic>
- Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU. При поддержке РФФИ. Лицензионное соглашение №916 от 12.01.2004 г. на период с 12.01.2004 – бессрочно. Сумма договора: бесплатно. Количество ключей (пользователей): со всех компьютеров ТГПУ. <http://elibrary.ru>
- Архив научных журналов 2011 Cambridge Journals Digital. Издательство Cambridge University Press, НП «НЭИКОН». Лицензионной договор № 316-РН-2011 от 01.09.2011 г. на период с 30.03.12 - бессрочно. Сумма договора: бесплатно. Количество ключей (пользователей): со всех компьютеров вуза. <http://journals.cambridge.org/action/stream?pageId=3216&level=2>
- Архивы 169 журналов издательства Oxford University Press. Издательство Oxford University Press, НП «НЭИКОН». Лицензионной договор № 316-РН-2011 от 01.09.2011 г. на период с 14.03.12 - бессрочно. Сумма договора: бесплатно. Количество ключей (пользователей): со всех компьютеров вуза. <http://www.oxfordjournals.org/>
- Цифровой архив электронных журналов издательства Taylor&Francis. Издательство Taylor&Francis Group, НП «НЭИКОН». Договор №316-РН-211 от 01.09.2011 г. на период с 06.05.2013 – бессрочно. Сумма договора: бесплатно. Количество ключей (пользователей): со всех компьютеров ТГПУ. <http://arch.neicon.ru/xmlui/>
- УИС Россия (Университетская информационная система РОССИЯ). Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова (Научно-исследовательский вычислительный центр, Экономический факультет), Автономная некоммерческая организация Центр информационных исследований (АНО ЦИИ). Письмо-заявка № 21/300 от 01.03.2010 г. на период с 01.03.2010 – бессрочно. Сумма договора: бесплатно. Количество ключей (пользователей): с компьютеров библиотеки ТГПУ и при индивидуальной регистрации по запросу. <http://uisrussia.msu.ru/is4/main.jsp>
- БД «Марс» - сводная база данных аналитической росписи статей из периодических изданиях (архив 2001-2006). Ассоциация региональных библиотечных консорциумов (АРБИКОН). Договор № С/161-1/3 от 12.10.2009 г. на период с 12.10.2009 – бессрочно. Сумма договора: бесплатно. Количество ключей (пользователей): со всех компьютеров вуза. [http://arbicon.ru/services/mars\\_analitic.html](http://arbicon.ru/services/mars_analitic.html)
- Архив журнала Nature. Научное издательство Nature Publishing Group, НП «НЭИКОН». Лицензионный договор № 316-РН-2011 от 01.09.2011 г. на период с 27.09.12 - бессрочно. Сумма договора: оплата оказанных услуг производится из средств Минобрнауки. Количество ключей (пользователей): со всех компьютеров ТГПУ. <http://www.nature.com/nature/index.html>
- Архив 16 научных журналов издательства Wiley. Издательство Wiley, издательство Taylor&Francis Group, НП «НЭИКОН». Лицензионный договор № 317.55.11.4002 от 01.09.2011 г. на период с 06.05.13 – бессрочно. <http://onlinelibrary.wiley.com/>
- Архив научных журналов SAGE Journals Online. Издательство SAGE Publications, НП «НЭИКОН». Договор № 316-РН-2011 от 01.09.2011 г. на период с 05.02.2012 – бессрочно. <http://online.sagepub.com/>

- Архив научных журналов издательства IOP Publishing. Издательство IOP Publishing Института физики Великобритании, ИП «НЭИКОН». Договор № 316-РН-2011 от 01.09.2011 г. на период с 13.04.2012 – бессрочно. <http://iopscience.iop.org/>
- Архив электронных журналов Electronic Back Volume Sciences Collection издательства Annual Reviews. Издательство Annual Reviews, ИП «НЭИКОН». Договор № 316-РН-2011 от 01.09.2011 г. на период с 06.05.2013 – бессрочно. <http://www.annualreviews.org/>
- Электронная библиотека ТГПУ. <http://libserv.tspu.edu.ru/>

#### Сайты интернета:

1. <http://www.nanoware.ru> - сайт о нанотехнологиях в России
2. <http://nano.msu.ru/education> -научно-образовательный центр по нанотехнологиям МГУ
3. <http://www.nanometer.ru> - нанотехнологическое сообщество
3. <http://www.nanodigest.ru> - интернет-журнал о нанотехнологиях
2. [http://www.community.livejournal.com/ru\\_nanobiotech](http://www.community.livejournal.com/ru_nanobiotech) - нанобиотехнология.
3. <http://www.nanorf.ru> - Российский электронный НАНОЖУРНАЛ
4. <http://www.nano-info.ru> – нанотехнологииин Научно-информационный портал по нанотехнологиям
5. <http://www.nanoevolution.ru/cat/nanomedicina> - нанотехнологии: сегодня и будущее.
6. <http://www.portalnano.ru> - Федеральный интернет-портал "Нанотехнологии и наноматериалы"
7. <http://www.ntsр.info> - портал нанотехнологического общества России
8. <http://www.rusnano.com> - сайт Государственной корпорации «Российская корпорация нанотехно-логий» (РОСНАНО)
9. <http://silikoni.ru>
10. [http://www.ts-silicone.ru/production/krem\\_org](http://www.ts-silicone.ru/production/krem_org)
11. <http://www.chem.msu.su/rus/jvho/welcome.html> - Российский химический журнал
12. <http://www.hccomposite.com> – холдинговая компания «Композит»

#### 6.4. Материально-техническое обеспечение дисциплины.

№ п/п	Наименование раздела (темы) учебной дисциплины	Наименование материалов обучения, пакетов программного обеспечения	Наименование технических и аудиовизуальных средств, используемых с целью демонстрации материалов
1	Углеродсодержащие материалы	Мультимедийные материалы. Видеофильмы.	Компьютер, проектор.
2	Силиконы	Мультимедийные материалы. Видеофильмы.	Компьютер, проектор.
3	Композиты	Мультимедийные материалы. Видеофильмы.	Компьютер, проектор.
4	Зеленая химия: принципы и направления.		
5	Сверхкритические флюиды	Мультимедийные материалы.	Компьютер, проектор.
6	Ионные жидкости	Мультимедийные материалы.	Компьютер, проектор.

7	Альтернативное топливо	Видеофильмы.	Компьютер, проектор.
8	Неорганические биоматериалы	Мультимедийные материалы.	Компьютер, проектор.
9	Электропроводящие полимеры.	Мультимедийные материалы.	Компьютер, проектор
10	Методы исследования механизма органических реакций.	Расчетные квантово-химические программы: Gaussian, Chem Office, Hyper Chem, доступ в Интернет, базы данных	Компьютерный класс с сервером и 11 терминалами
11	Орбитальные взаимодействия в согласованных и многостадийных органических реакциях.	Расчетные квантово-химические программы: Gaussian, Chem Office, Hyper Chem, доступ в Интернет, базы данных	Компьютерный класс с сервером и 11 терминалами
12	Основные закономерности различных типов органических реакций с точки зрения орбитальных взаимодействий.	Расчетные квантово-химические программы: Gaussian, Chem Office, Hyper Chem, доступ в Интернет, базы данных	Компьютерный класс с сервером и 11 терминалами
13	Донорно-акцепторные взаимодействия в органической химии.	Расчетные квантово-химические программы: Gaussian, Chem Office, Hyper Chem, доступ в Интернет, базы данных	Компьютерный класс с сервером и 11 терминалами
14	Использование квантово-химических параметров для анализа механизма органических реакций.	Расчетные квантово-химические программы: Gaussian, Chem Office, Hyper Chem, доступ в Интернет, базы данных	Компьютерный класс с сервером и 11 терминалами
15	Радикалы в органических реакциях.	Расчетные квантово-химические программы: Gaussian, Chem Office, Hyper Chem, доступ в Интернет, базы данных	Компьютерный класс с сервером и 11 терминалами

## 7. Методические рекомендации по организации изучения дисциплины:

### 7.1. Методические рекомендации преподавателю:

Курс «Актуальные задачи современной химии» включает лекции и практические занятия. Темы занятий сообщаются студентам предварительно. Выбор темы доклада

или реферата согласуется с преподавателем. Тематика рефератов, докладов обновляется ежегодно.

На первом курсе магистратуры студенты используют расчеты электронной структуры молекул для изучения современных органических реакций, в частности их механизмов. Теоретические знания, полученные ранее из лекционных курсов бакалавриата по органической химии, органическому синтезу, компьютерному моделированию, закрепляются на практических занятиях, на которых также вырабатываются практические умения выбора необходимых молекулярных структур и их расчета неэмпирическими квантово-химическими методами. Особое внимание уделяется основным типам реакций органических соединений: перегруппировке, рекомбинации и диссоциации, бимолекулярному замещению, переносу электрона, донорно-акцепторному взаимодействию в органической химии. Промежуточные срезы знаний проводятся после изучения основных тем курса. Промежуточный срез знаний проводится заданием определенной реакции и метода расчета и последовательным решением предлагаемой задачи. Может также проводиться тестирование в компьютерном классе с использованием специальной программы. Задания находятся на сайте ТГПУ. Тестирование студенты могут осуществлять в свободном доступе в качестве самостоятельной подготовки, как по отдельным темам, так и по семестрам. Занятия заканчиваются зачетом и итоговым экзаменом. В течение всего обучения студенты выполняют индивидуальные задания, разрабатываемыми преподавателями по всем изучаемым темам курса.

## **7.2. Методические указания для студентов:**

Перед началом семестра студент должен ознакомиться с разделами изучаемой дисциплины и их содержанием, получить перечень вопросов, выносимых на самостоятельную работу, зачет и экзамен. Студент должен быть знаком с требованиями к уровню освоения дисциплины, формами контроля.

## **8. Формы текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации обучающихся.**

### **8.1. Тематика рефератов (докладов, эссе):**

1. Современные направления развития органической химии.
2. Квантово-химические расчеты биологически активных молекул.
3. Молекулярно-орбитальная теория перциклических реакций.
4. Методы расчета структур и термодинамических характеристик переходного состояния.
5. Элементы в аномальных степенях окисления.
6. Неорганическая супрамолекулярная химия (полупроводниковые клатраты).
7. Кристаллохимический дизайн.
8. Неорганические биоматериалы.
9. Ультразвук в неорганическом синтезе.
10. Микроволновой синтез.
11. Клатраты.
12. Интеркалаты.
13. Неорганическая химия: химия прекурсоров.
14. Биоактивные композиты.
15. Комплексы металлов с краун-эфирами, криптандами, каликсаренами.
16. Методы исследования биологических материалов.
17. Методы получения неорганических биоматериалов.
18. Материалы с памятью формы в медицине.
19. Высокотемпературные материалы для ракетно-космической техники
20. Нанокерамика
21. Новые технологии для водородной энергетики.

22. Солнечные батареи. (статья нанотехнологии для энергосбережения)
23. Ядерная энергетика.
24. Переработка, утилизация, уничтожение экологически опасных побочных и отработанных продуктов химической и других отраслей промышленности.
25. Топливные элементы. Классификация топливных элементов и области их применения.
26. Керамика. Классификация керамических материалов. Получение керамики.
27. Материалы медицинского назначения, используемые в реконструктивных медицинских технологиях.
28. Материалы для реконструкции внутренних органов.
29. Материалы, используемые для конструирования искусственных органов.

### **8.2. Вопросы и задания для самостоятельной работы, в том числе групповой самостоятельной работы обучающихся:**

1. Алмаз, графит, карбин. Строение, получение, свойства.
2. История открытия фуллеренов.
3. Антиоксидантные свойства фуллеренов.
4. Фуллерены в качестве материала для полупроводниковой техники.
5. Силиконовое масло. Состав, области применения.
6. Дисперсно-упрочненные композиционные материалы.
7. Углеродное волокно. Получение, свойства.
8. Выделение и разделение фуллеренов.
9. Металлофуллерены. Получение и свойства.
10. Промышленные способы получения фуллеренов и нанотрубок.
11. Сорбционно-активные углеродные волокнистые материалы.
12. Углеволокониты, углетекстолиты, углересволокониты.
13. Производные графена. Двухслойный графен. Наполенты. Химические производные.
14. Порошковые сплавы. Получение, свойства, применение.
15. Керамика на основе оксидов металлов. Получение, свойства, применение.
16. Керамика на основе соединений неметаллов. Получение, свойства, применение.
17. Новые пути синтеза. Основные компоненты осуществления химических реакций. Пути активации химических реакций.
18. Катализ и зеленая химия. Примеры использования катализаторов в зеленой химии.
19. Донорно-акцепторные взаимодействия как элементарный акт многих органических и природных процессов.
20. Суперкислые среды. Превращения органических молекул в суперкислых средах.
21. Индексы реакционной способности.
22. Реакции радикального присоединения и замещения. Карбены: электронная структура, электрофильные, радикальные и нуклеофильные свойства карбенов.

### **8.3. Вопросы для самопроверки, диалогов, обсуждений, дискуссий, экспертиз:**

1. Можно ли превратить фуллерены в алмаз и графит?
2. Наноалмазы. Получение, свойства и применение.
3. Силикон для волос. Польза или вред?
4. Силикон для предметов гигиены.
5. Строительные герметики. Получение. Свойства. Отличия от остальных видов силиконов.
6. Силикон для пластической хирургии.
7. Меры безопасности при работе с силиконами.
8. Силиконовая пена. Получение, свойства, применение.

9. Силиконовые блоксополимеры.
10. Силикон – один из основных материалов 21 века.
11. Вулканизация силиконового каучука.
12. Силиконовые компаунды.
13. Чем композиты отличаются от сплавов, керамики?
14. Какие материалы используют в качестве неметаллической матрицы в композитах?
15. Какие материалы используют в качестве армирующих составляющих композитов?
16. Какую роль выполняет матрица в композите?
17. Классификация композита по виду армирующего компонента.
18. Элементоорганические связующие для композиционных материалов.
19. Сравнение свойств композитов на полимерной, керамической и металлической основе.
20. Чем армирующий элемент отличается от наполнителя?
21. Чем отличаются изотропные материалы от анизотропных материалов? Приведите примеры.
22. Какие металлы чаще всего используют в качестве матрицы для композиционных материалов?
23. Какими свойствами обладают нановолокна в качестве армирующих составляющих?
24. Какими недостатками обладают нановолокна в составе композитов?
25. Какие присымы используют для внедрения наноуглеродных волокон в композит?
26. Какие соединения входят в состав кислородной и бескислородной керамики?
27. Достоинства и недостатки борволоконитов.
28. Что представляют собой керметы?
29. Какими свойствами обладают керамические композиты, армированные металлической проволокой?
30. Недостатки углеволоконитов.
31. Какие композиционные материалы называют гибридными?
32. Чем отличаются композиты от механических смесей?
33. Что представляет собой дисперсный наполнитель?
34. Что такое жёсткие и мягкие кислоты и основания?
35. Что такое орбитальный и зарядовый контроль?
36. Применение принципа ЖМКО к органическим реакциям.
37. Энергетические критерии ароматичности. Энергия резонанса.
38. Перегруппировки в радикальных реакциях.

#### **8.4. Перечень вопросов для промежуточной аттестации (к зачету):**

1. Фуллерены. История открытия. Природа химической связи и строение фуллеренов.
2. Методы получения фуллеренов (лазерное и термическое испарение графита, электродуговой синтез, пиролиз углеродсодержащих соединений).
3. Физические свойства фуллеренов (проводимость, сверхпроводимость, оптические и сорбционные свойства).
4. Производные фуллеренов (гидриды, оксиды, галогениды и др.). Получение и свойства.
5. Применение фуллеренов (электроника, энергетика, медицина).
6. Графен. История открытия. Получение, свойства и перспективы использования.
7. Углеродные нанотрубки. Одностенные и многостенные нанотрубки, Строение и способы получения нанотрубок. Применение.
8. Структура силиконов. Прочность связей, длина связей, углы между связями.
9. Силиконовые клеи и герметики. Свойства, применение. Техника безопасности при работе с силиконовыми клеями и герметиками.
10. Силиконовые резины. Получение, свойства, применение.

11. Методы производства изделий из силикона: экструзия, каландрование, дисперсионное покрытие, литье под давлением (жидкая силиконовая резина).
12. Классификация композитов (по составу, по структурному признаку, по свойствам и функциям).
13. Стеклопластики. Стекловолоконистые наполнители. Полимерные матрицы. Свойства и применение стеклопластиков.
14. Углепластики. Углеродное волокно. Полимерные матрицы. Физико-механические свойства углепластиков. Области применения углепластиков.
15. Керамические композиты. Получение, свойства, применение.
16. Металлические композиционные материалы (МКМ). Металлы и сплавы, используемые в качестве матриц в МКМ. Армирующие компоненты, используемые в МКМ. Свойства и области применения МКМ.
17. Зеленая химия: принципы и направления. Атомная эффективность.
18. Зеленая химия: замена растворителей. Требования, предъявляемые к растворителям, используемым в химических процессах. Зеленые растворители.
19. Сверхкритическое состояние вещества. Условия получения сверхкритических флюидов. Физические свойства сверхкритических флюидов.
20. Преимущества использования сверхкритических жидкостей. Области применения сверхкритических флюидов. Синтез новых веществ (органических, полимеров, комплексов металлов).
21. Экстракционные процессы с использованием сверхкритических флюидов.
22. Вещества, относимые к ионным жидкостям. Способы получения. Свойства ионных жидкостей.
23. Ионные жидкости. Области применения ионных жидкостей.
24. Современные требования к энергетическим системам. Возобновляемые источники энергии.
25. Водородная энергетика. Способы получения водорода.
26. Водородная энергетика. Проблема хранения водорода. Водородаккумулирующие материалы.
27. Классификация биоматериалов. Требования, предъявляемые к материалам биомедицинского назначения.
28. Материалы, используемые в медицине: металлы и сплавы, керамика.
29. Материалы, используемые в медицине: полимеры, композитные материалы.
30. Электропроводящие полимеры. Получение, свойства, применение.

***Перечень вопросов для промежуточной аттестации (к экзамену):***

1. Определите направление электрофильного ароматического замещения в нафталине и антраcene, используя приближения изолированной и реагирующей молекулы.
2. Определите, какое положение окажется предпочтительным при реакции радикального замещения в нафталине. Рассчитайте индексы свободной валентности, энергии радикальной локализации и индекс Дьюара.
3. Объясните, почему в четных альтернантных углеводородах (АУ) нуклеофильная, электрофильная и радикальная атаки происходят часто по одним и тем же положениям. Как связаны между собой величины индексов локализации  $L_{\mu}^{+}$ ,  $L_{\mu}$ ,  $L_{\mu}^{-}$  для четных АУ.
4. На основании расчета величин энергии локализации сопоставьте реакционную способность этилена, бутадиена и бензола при радикальной атаке. Какой из углеродных атомов бутадиена оказывается при этом более реакционноспособным?
5. Определите направление электрофильного замещения в пиридине, рассчитав индексы Дьюара  $N_{\mu}$ . Примите для атома азота  $\delta\alpha_N=0.5\beta$  и для всех углеродных атомов  $\delta\alpha=0$ . а) 2, б) 3, в) 4

6. Расчеты фенола методом ППП привели к следующим величинам  $\pi$ -электронных зарядов в основном состоянии (с OH-группой связан  $C_1$ ):  $Q_1=-0.0554$ ;  $Q_2=-0.0801$ ;  $Q_3=0.0177$ ;  $Q_4=-0.0440$  и в первом возбужденном синглетном состоянии:  $Q_1=0.1015$ ;  $Q_2=-0.0928$ ;  $Q_3=-0.0869$ ;  $Q_4=0.0513$ . Рассмотрите реакционную способность различных углеродных атомов фенола в этих состояниях по отношению к электрофильным и нуклеофильным реагентам.
7. Укажите последовательность отдельных стадий электрофильного замещения:
  - а)  $\text{XeF}_2 + \text{F}^+ \rightleftharpoons \text{XeFF}^+ + \text{F}^+$
  - б)  $\text{NH}_3 + \text{H}^+ \rightleftharpoons \text{NH}_2\text{H}^+ + \text{H}^+$
8. Какую геометрию должны иметь продукты реакций присоединения нуклеофилов и электрофилов: а)  $\text{BeH}_2 + \text{H}^+$ ; б)  $\text{H}_2\text{O} + \text{H}^+$ ; в)  $\text{H}_2\text{O} + \text{H}^-$ ?
9. При помощи метода граничных орбиталей покажите, что в реакциях присоединения протонных кислот или воды к несимметричным олефинам атом водорода присоединяется к наиболее гидрогенизированному атому углерода (правило Марковникова).
10. Дать описание приближения изолированной и реагирующей молекулы.
11. Чем отличается электрофильное замещение в ароматическом ядре.
12. Определить приближение локализации и переходное состояние.
13. Показать на примерах нуклеофильное замещение, анионный  $\sigma$ -комплекс.
14. Показать на примерах реакции радикального замещения, индекс свободной валентности.
15. Дать понятие о реакции присоединения ароматических соединений.
16. Объяснить принципы качественной теории молекулярных орбиталей.
17. Постройте профиль реакции  $\text{S}_{\text{N}}2$ :  $\text{N}^- + \text{RX} \rightleftharpoons \text{RN} + \text{X}^-$ , исходя из реагентов и продуктов  $\text{Cl}^-$ ,  $\text{F}^-$ ,  $\text{CH}_3\text{Cl}$ ,  $\text{CH}_3\text{F}$ . Сделайте выводы о переходных состояниях и локальных минимумах.
18. Дать понятие о локализованных молекулярных орбиталях.
19. Рассмотреть основные положения теории отталкивания электронных пар валентных орбиталей.
20. Рассмотреть принцип сохранения орбитальной симметрии в химических реакциях.
21. Провести анализ перициклических реакций с помощью метода корреляционных диаграмм.
22. Рассмотреть обобщенное правило отбора по симметрии для согласованных перициклических реакций.
23. Оценить ароматичность и правила Вудворда-Хоффмана для перициклических реакций.
24. Каким образом можно провести расчет энергий взаимодействия по методу МО.
25. Что представляют из себя граничные орбитали взаимодействующих молекул и оптимальный путь химической реакции.
26. В каких реакциях можно использовать приближение Клопмана.

**8.5. Формы контроля самостоятельной работы:** Формами контроля самостоятельной работы студентов являются выступление с докладами, участие в дискуссиях.

Рабочая программа учебной дисциплины составлена в соответствии с учебным планом, федеральным государственным образовательным стандартом высшего профессионального образования по направлению подготовки:  
04.04.01 Химия. Магистерская программа: Физическая химия

Рабочая программа учебной дисциплины составлена:  
д.х.н., профессор кафедры химии и методики обучения химии ТГПУ СН  
Ковалева С.В.  
д.х.н., профессор кафедры химии и методики обучения химии ТГПУ Полешук  
Полешук О.Х.  
к.х.н., доцент кафедры химии и методики обучения химии ТГПУ Фатеев  
Фатеев А.В.

Рабочая программа учебной дисциплины утверждена на заседании кафедры химии и методики обучения химии

протокол № 1 от «29» августа 2014 года.

Зав. кафедрой Полешук Полешук О.Х.  
(подпись)

Рабочая программа учебной дисциплины одобрена методической комиссией биолого-химического факультета

протокол № 1 от «29» августа 2014 года.

Председатель методической комиссии Князева Князева Е.П.  
(подпись)