

*Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования «Российский университет дружбы народов»*

Факультет физико-математических и естественных наук

Рекомендовано МССН
по направлению 04.00.00 «Химия»

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Наименование дисциплины

ПРИОРИТЕТНЫЕ НАПРАВЛЕНИЯ РАЗВИТИЯ ХИМИИ

Рекомендуется для направления подготовки

04.06.01 «ХИМИЧЕСКИЕ НАУКИ»

Направленность программы (профиль)

ПРОФИЛЬ «НЕОРГАНИЧЕСКАЯ ХИМИЯ»

1. Цели и задачи дисциплины

Целью освоения дисциплины является приобретение углубленных теоретических знаний о современной химии, повышения химической компетентности аспирантов, а также умений применять эти знания в профессиональной (преимущественно исследовательской) деятельности.

Основной задачей курса является ознакомление аспирантов с основными направлениями современной химии, новыми подходах к планированию и осуществлению химических реакций и химических процессов; принципами получения новых материалов с заданными свойствами.

2. Место дисциплины в структуре ОП ВО.

Дисциплина «Приоритетные направления развития химии» относится к вариативной части блока.1. Для успешного освоения дисциплины учащийся аспирантуры должен иметь базовые знания на уровне магистра. Данный курс направлен на развитие широкой химической эрудиции и критической оценки научных результатов.

В таблице № 1 приведены предшествующие и последующие дисциплины, направленные на формирование компетенций дисциплины в соответствии с матрицей компетенций ОП ВО.

Таблица № 1

Предшествующие и последующие дисциплины, направленные на формирование компетенций

| № п/п | Шифр и наименование компетенции | Предшествующие дисциплины | Последующие дисциплины |
|---|---|---------------------------|---|
| Универсальными компетенции | | | |
| 1 | УК-1 способность к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях | | Химия координационных соединений Химия твердого тела Сtereoхимия органических соединений Кинетика и катализ гетерогенных реакций |
| Общепрофессиональные компетенции | | | |
| 1 | ОПК-1 способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий | | Научно-исследовательская практика Научные исследования |
| Профессиональные компетенции (научно-исследовательская деятельность в области химии и смежных наук; преподавательская деятельность в области химии и смежных наук) | | | |
| 1 | ПК-1 владение методологией теоретических и экспериментальных исследований в области химии, владение культурой научного исследования в области химии | | Химия координационных соединений Химия твердого тела Сtereoхимия органических соединений Кинетика и катализ гетерогенных реакций |
| 2 | ПК-2 способность к самостоятельному проведению научно-исследовательской работы и получению научных результатов, удовлетворяющих установленным требованиям к содержанию диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук по | | Научно-исследовательская практика Научные исследования |

| | | | |
|--|--|--|--|
| | выбранному профилю (научной специальности) | | |
|--|--|--|--|

3. Требования к результатам освоения дисциплины:

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование следующих компетенций:

УК-1; ОПК-1; ПК-1; ПК-2

В результате изучения дисциплины аспирант должен:

Знать:

- основные направления в современной химической науке и технологии, конструирования химических процессов в условиях устойчивого развития (УК-1, ПК-1);
- способы введения элементов «Зелёной химии» в химическую технологию (УК-1).

Уметь:

- доказательно обсуждать теоретические и практические проблемы современной химии (УК-1, ПК-2);
- применять полученные знания в научных исследованиях (ОПК-1, ПК-2).

Владеть:

- основными понятиями и терминами современной химии (УК-1, ПК-1);
- знаниями о современных методах исследования в области химии (ОПК-1, ПК-2).

4. Объем дисциплины и виды учебной работы

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетных единиц.

| Вид учебной работы | Всего часов | Семестры |
|---------------------------------------|-----------------|------------------------|
| | | 2 |
| Аудиторные занятия (всего) | 60 | 60 |
| В том числе: | - | - |
| <i>Лекции</i> | 40 | 40 |
| <i>Практические занятия (ПЗ)</i> | | |
| <i>Семинары (С)</i> | | - |
| <i>Лабораторные работы (ЛР)</i> | 20 | 20 |
| Самостоятельная работа (всего) | 48 | 48 |
| Общая трудоемкость | час зач. ед. | 108 3 |
| | | 108 3 |

5. Содержание дисциплины

5.1. Содержание разделов дисциплины

1. Общие тенденции развития современной химии

Концепции современной химии и их практическое применение.

2. Основные направления развития химии в XXI веке

Химия как фундаментальная наука. Развивающиеся современные направления: компьютерная химия, компьютерное моделирование молекул (молекулярный дизайн) и химических реакций; спиновая химия; синтез и исследование наноструктур, развитие и применение нанотехнологий; синтез полимерных полупроводников; химия чрезвычайно быстротекущих реакций (фемтохимия); синтез фуллеренов и нанотрубок; развитие химии

одионочной молекулы; развитие электроники на молекулярном уровне; создание «молекулярных машин».

3. Прогресс науки и роль «зеленой химии» в современном мире

«Зелёная химия» в России и в ведущих зарубежных странах. 12 принципов «Зелёной химии». Анализ технологии производства с использованием принципов «Зелёной химии». Общие подходы к оценке эффективности проведения процессов с точки зрения «зеленой химии».

4. Химия и наступающая эра нанотехнологий

Разработка новых наноматериалов. Разработка методов сборки крупных молекул из атомов с помощью наноманипуляторов. Получение новых нанокатализаторов для химической и нефтехимической промышленности. Изучение механизма каталитических реакций на нанокристаллах. Исследование явления самоорганизации в коллективах нанокристаллов. Поиск новых способов стабилизации наноструктур химическими модификаторами.

5. Суперкритические флюидные технологии в химии природных соединений

Основные области практического использования сверхкритических веществ. Развитие суб- и суперкритических жидкостных технологий для процессов экстракции и химического синтеза. Сверхкритические среды в экстракционных процессах.

6. Теоретическое моделирование и компьютерный дизайн новых молекулярных и наноразмерных структур

Перспективы использования компьютерного моделирования в области нанотехнологий. Развитие теории и методов теоретического моделирования неклассических молекулярных систем и механизмов химических реакций, молекулярный дизайн новых структурных мотивов для высокотехнологичных материалов, молекулярных и супрамолекулярных рецепторов, молекулярных машин.

7. Компьютерное моделирование молекул (молекулярный дизайн) и химических реакций

Основные направлениями компьютерной химии: создание принципиально новых компьютерных программ поиска и отбор новых эффективных веществ; количественный анализ связи структура-активность для широкого спектра физиологически активных веществ. Молекулярный дизайн макромолекулы с управляемыми биологическими функциями.

8. Спиновая химия

Молекулярная электроника и спинтроника. На пути к созданию молекулярного компьютера. Дизайн молекулярных магнетиков.

9. Хемосенсорика

Хемосенсорика – новое направление органической, аналитической и координационной химии. Молекулярная электроника, фотоника и хемосенсорика. Направленный синтез, фото- и магнетохимия бистабильных органических и металлоорганических структур для молекулярных переключателей и сред трехмерной оптической памяти.

10. Органические и элементоорганические соединения для светоизлучающих диодов

Основные характеристики электролюминесцентных устройств на основе органических соединений. Светоизлучающие диоды на основе органолантаноидов. Светоизлучающие диоды на основе смешанных дикетонатных комплексов. Светоизлучающие диоды на основе комплексов редкоземельных элементов, содержащих хинолинолятные лиганды.

11. Органические фотохромные соединения

Органические фотохромные соединения: структурный дизайн и практические применения. Разнообразие фотохромных соединений и систем. Особенности применения фотохромных соединений и материалов. Принципы дизайна оптических молекулярных сенсоров и фотоуправляемых рецепторов на основе краун-эфиров. Фотохромные спиропираны и объекты биологического мира.

5.2. Разделы дисциплин и виды занятий

| № п/п | Наименование раздела дисциплины | Лекц. | Лаб. зан. | СРС | Всего час. |
|-------|---|-------|-----------|-----|------------|
| 1. | Общие тенденции развития современной химии | 2 | | 4 | 6 |
| 2. | Основные направления развития химии в XXI веке | 2 | | 4 | 6 |
| 3. | Прогресс науки и роль «зеленой химии» в современном мире | 4 | | 4 | 8 |
| 4. | Химия и наступающая эра нанотехнологий | 4 | 4 | 6 | 14 |
| 5. | Суперкритические флюидные технологии в химии природных соединений | 4 | 2 | 4 | 10 |
| 6. | Теоретическое моделирование и компьютерный дизайн новых молекулярных и наноразмерных структур | 4 | 2 | 4 | 10 |
| 7. | Компьютерное моделирование молекул (молекулярный дизайн) и химических реакций | 4 | 2 | 4 | 10 |
| 8. | Спиновая химия | 4 | 2 | 4 | 10 |
| 9. | Хемосенсорика | 4 | | 4 | 8 |
| 10. | Органические и элементоорганические соединения для светоизлучающих диодов | 4 | 6 | 6 | 16 |
| 11. | Органические фотохромные соединения | 4 | 2 | 4 | 10 |

6. Лабораторный практикум

| № п/п | № раздела дисциплины | Наименование лабораторных работ | Трудоемкость (час.) |
|-------|----------------------|---|---------------------|
| 1. | 4 | Структурное моделирование и изучение физико-химических свойств аллотропных модификаций углерода (фуллерены, нанотрубки, графен) | 4 |
| 2. | 5 | Изучение сверхкритических флюидных технологий в синтезе природных соединений | 2 |
| 3. | 6,7 | Компьютерное моделирование металлоорганических каркасов | 4 |
| 4. | 8 | Изучение магнитных свойств металлоорганических молекулярных магнетиков | 2 |
| 5. | 10 | Изучение люминесцентных свойств комплексов редкоземельных элементов, содержащих хинолинолятные лиганды | 2 |
| 6. | 10 | Изучение структуры и свойств квазикристаллов | 4 |
| 7. | 11 | Изучение физико-химических свойств и непосредственное наблюдение явлений термо- и фотохромизма в дииминатных комплексах меди | 2 |

7. Практические занятия (семинары)

Не предусмотрено учебным планом

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Лекционная аудитория с мультимедийным проектором; лаборатория (ауд. 614) с наборами лабораторной посуды, реактивов и приборов для проведения лабораторных работ; компьютеры для проведения вычислений и обработки результатов и доступа к информационным системам.

Специально оснащенные лаборатории ЦКП ФХИ

Комплект специализированной мебели; проектор экран для проектора, специализированное оборудование химической лаборатории, доска меловая, муфельные печи, агатовые ступки, механический пресс, термоанализатор SDTQ-600, ИК-фурье спектрометр BRUKER "MPA", спектрофотометр Varian "Cary 50", рентгеновские дифрактометры: ДРОН-7, Rigaku "ULTIMA IV", компьютеры, имеется wi-fi

9. Информационное обеспечение дисциплины

а) программное обеспечение:

- ОС Windows, MS Office (программа корпоративного лицензирования (Microsoft Subscription) Enrollment for Education Solutions), браузер Firefox (лицензия MPL-2.0) или браузер Chrome (лицензия Google Chrome Terms of Service); Adobe Reader (Adobe Software License Agreement).

б) базы данных, информационно-справочные и поисковые системы:

| | |
|--|---|
| Учебно-научный информационный библиотечный центр РУДН | http://lib.rudn.ru/ |
| ЭБС РУДН | http://lib.rudn.ru/MegaPro/Web |
| ЭБС "Университетская библиотека ONLINE" | http://www.biblioclub.ru |
| Телекоммуникационная учебно-информационная система (ТУИС) РУДН | http://esystem.pfur.ru/course/view.php?id=998 |
| Портал фундаментального химического образования России | http://www.chemnet.ru |
| Научная электронная библиотека eLibrary.ru | http://www.elibrary.ru/defaultx.asp |
| Химическая энциклопедия | http://www.chemport.ru |
| XuMuK: сайт о химии для химиков | www.xumuk.ru |
| Базы данных, информационно-справочные и поисковые системы: | www.webofscience.com http://www.scopus.com/ |
| IOPSCIENCE IOP Publishing | http://iopscience.iop.org/journals?type=archive |
| Mendeley | http://www.mendeley.com/ |
| Nature | http://www.nature.com/siteindex/index.html |
| Reaxys, Reaxys Medicinal Chemistry | https://www.reaxys.com/ |
| RSC, журналы Королевского химического общества (Royal Society of Chemistry), | http://pubs.rsc.org/ |
| ScienceDirect (ESD), «FreedomCollection», ИД "Elsevier" | http://www.sciencedirect.com |
| SciFinder-n | https://scifinder-n.cas.org/ |
| SPRINGER | https://rd.springer.com/ |
| Wiley Online Library | www.wileyonlinelibrary.com |
| Академия Google | https://scholar.google.ru/ |

10. Учебно-методическое обеспечение дисциплины

а) основная литература

1. Зоркий П.М., Лубнина И.Е. Супрамолекулярная химия: возникновение, развитие, перспективы / П.М. Зоркий, И.Е. Лубнина. – М.: МГУ, 1999. – 42 с.
2. Шевельков А.В. Супрамолекулярная химия: от экзотических веществ к материалам нового поколения / А.В. Шевельков. – М.: МГУ, 2004. – 47 с.
3. Кларк Т. Компьютерная химия / М.: Мир, 1990. – 383 с.
4. Минкин В.И. Теория строения молекул / В.И. Минкин, Б.Я. Симкин, Р.М. Миняев. - Ростов/Дон.: Феникс, 1997. -560 с.

б) дополнительная литература

1. Степанов Н.Ф. Квантовая механика и квантовая химия / М.: Мир, 2001. – 519 с.
2. Бейдер Р. Атомы в молекулах / М.: Мир, 2001. – 532 с.
3. Журналы Американского химического общества: <http://pubs.acs.org/>
4. Журналы королевского химического общества: <http://pubs.rsc.org/en/journals/>
5. Журналы издательства Thieme Chemistry: <http://www.thieme.com/journals-main>
6. Журналы издательства Wiley: <http://onlinelibrary.wiley.com/>
7. Журналы издательства Springer: <http://www.springer.com/gp/products/journals>

11. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)

При изучении дисциплины «ПРИОРИТЕТНЫЕ НАПРАВЛЕНИЯ РАЗВИТИЯ ХИМИИ» предполагается посещение аспирантами лекций и лабораторных работ, участие в дискуссиях, выполнение домашних заданий, написание тестов. В конце изучения дисциплины – промежуточный контроль в виде письменно-устного зачета.

Самостоятельная работа аспиранта включает в себя подготовку ко всем видам работ и контроля (УК-1, ОПК-1, ПК-1, 2).

При подготовке аспирант должен использовать теоретические данные лекционных материалов, а также данные литературных источников.

Ознакомление с соответствующим теоретическим разделом лекционного курса (УК-1, ОПК-1) предполагает проработку пройденного материала, ответы на контрольные вопросы.

Для подготовки к контрольным мероприятиям предусмотрены примеры тестовых заданий и вопросы для самопроверки.

Организация учебного процесса при изучении курса «Приоритетные направления развития химии» соотносится с целями образования на современном этапе, направленных на системный подход к обучению и интеграции дисциплин.

Программой предусмотрено использование современных образовательных технологий: информационные (лекции и презентации в Power Point), проектные (мультимедиа, видео) и т.п.

Формы работы на учебных занятиях предусматривают активное участие аспирантов при изучении материала – дополнение, обсуждение, дискуссию, элементы собственных научных исследований, непосредственное выступление с докладом.

ПРИМЕРЫ ОБЩИХ ВОПРОСОВ

1. Общие тенденции развития современной химии.
2. Основные направления развития химии в XXI.
3. Прогресс науки и роль «зеленой химии» в современном мире.
4. 12 принципов «Зелёной химии».
5. Основные направления в развитии технологий «Зелёной химии».
6. Химия и наступающая эра нанотехнологий.

7. Использование локальных источников энергии для активации молекул.
8. Цеолиты и мезопористые катализаторы.
9. Катализ наночастицами.
10. Реакции в сверхкритическом CO₂.
11. Квазикристаллы – структура, свойства.
12. Супрамолекулярная химия – области применения, достижения и перспективы.
13. Графен: структура, свойства, применение в нанотехнологии.

ТЕМАТИКА РЕФЕРАТОВ

1. Процессы получения наночастиц и наноматериалов.
2. Хемосенсорика – новое направление органической, аналитической и координационной химии.
3. Фемтохимия.
4. Спинтроника.
5. Нанокатализаторы.
6. Новые достижения и перспективы фармакологии: «клик»-химия.
7. Методы зеленой химии.
8. Химия углерода: фуллерены, нанотрубки, графен.
9. Квазикристаллы – новое состояние вещества.
10. Супрамолекулярная химия – металлоорганические каркасы, рецепторы, молекулярные контейнеры (кавитанды, каликсарены), супермолекулы.

ПРАВИЛА НАПИСАНИЯ И ОФОРМЛЕНИЯ РЕФЕРАТОВ

Написание реферата является одной из форм обучения аспирантов, направленной на организацию и повышение уровня самостоятельной работы аспирантов; одной из форм научной работы аспирантов, целью которой является расширение научного кругозора аспирантов, ознакомление с методологией научного поиска.

Реферат, как форма обучения аспирантов, - это краткий обзор максимального количества доступных публикаций по заданной теме, с элементами сопоставительного анализа данных материалов и с последующими выводами.

При проведении обзора должна проводиться и исследовательская работа, но объем ее ограничен, так как анализируются уже сделанные предыдущими исследователями выводы и в связи с небольшим объемом данной формы работы.

Темы рефератов определяются кафедрой и содержатся в программе курса. Преподаватель рекомендует литературу, которая может быть использована для написания реферата.

Целью написания рефератов является:

- привитие аспирантам навыков библиографического поиска необходимой литературы (на бумажных носителях, в электронном виде);
- привитие аспирантам навыков компактного изложения мнения авторов и своего суждения по выбранному вопросу в письменной форме, научно грамотным языком и в хорошем стиле;
- приобретение навыка грамотного оформления ссылок на используемые источники, правильного цитирования авторского текста;
- выявление и развитие у аспиранта интереса к определенной научной и практической проблематике с тем, чтобы исследование ее в дальнейшем продолжалось в подготовке и написании курсовых и дипломной работы и дальнейших научных трудах.

Основные задачи аспиранта при написании реферата:

- с максимальной полнотой использовать литературу по выбранной теме (как рекомендуемую, так и самостоятельно подобранную) для правильного понимания авторской позиции;

- верно (без искажения смысла) передать авторскую позицию в своей работе;
- уяснить для себя и изложить причины своего согласия (несогласия) с тем или иным автором по данной проблеме.

Аспирант имеет право выбрать тему реферата, основываясь на темы разделов дисциплины.

Реферат должен иметь следующие разделы:

1. Титульный лист.
2. Вводную часть с обоснованием актуальности темы.
3. Реферирование и аналитический обзор литературы по выбранной теме.
4. Выводы.
5. Список использованной литературы.

- При написании реферата следует в сжатом виде изложить современное состояние вопроса, которому посвящена научно-учебная литература. При этом обобщаются мнения и данные различных авторов с указанием в тексте источника информации. Аналитический обзор должен содержать всю необходимую информацию по выбранной теме с обоснованием ее выбора.

- Особое внимание уделяется мало изученным моментам в публикациях, что позволяет обнаруживать точки потенциального роста новых знаний в данной области науки. Это составляет одну из целей выработки умения реферировать значительные объёмы научной литературы.

- Выводы представляют по существу реферат сделанного вами реферата литературы, и их чтение позволяют очень быстро оценить масштабы и важность проведенных другими исследователями научных работ.

- Список использованной литературы составляется по правилам библиографического описания. Все использованные в тексте реферата литературные ссылки должны иметь сквозную нумерацию. В целом объем реферата должен составлять от 15 до 25.

12. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине (модулю).

Материалы для оценки уровня освоения учебного материала дисциплины «Приоритетные направления развития химии» (оценочные материалы), включающие в себя перечень компетенций с указанием этапов их формирования, описание показателей и критериев оценивания компетенций на различных этапах их формирования, описание шкал оценивания, типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы, методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций, разработаны в полном объеме и доступны для обучающихся на странице дисциплины в ТУИС РУДН.

Программа составлена в соответствии с требованиями ОС ВО РУДН.

Разработчик:

**Заведующий кафедрой
неорганической химии**



В.Н. Хрусталеv