

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ (НИ ТГУ)

Химический факультет

УТВЕРЖДАЮ:
И.о. декана

_____ А. С. Князев
« 29 » 08 20 23 г.

Аннотация к рабочим программам дисциплин (модулей) и практик

по направлению подготовки

04.04.01 Химия

Направленность (профиль) подготовки:
Химия современных материалов и технологий

Форма обучения
Очная

Квалификация
химик-исследователь

Год приема
2023

Томск – 2023

Б1.О.01 Избранные главы химического материаловедения

Дисциплина обязательная для изучения.

Первый семестр, экзамен

Язык реализации – русский.

Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 з.е., 144 часов, из которых:

лекции: 24 ч;

практические занятия: 24 ч;

Язык реализации – русский.

в том числе практическая подготовка: 24ч.

Тематический план:

Тема 1. Химия твердого тела

Тема 2. Современные методы исследования

Тема 3. Актуальные вопросы материаловедения в медицине.

Б1.О.02 Актуальные задачи современной химии

Дисциплина обязательная для изучения.

Первый семестр, экзамен

Язык реализации – русский.

Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 з.е., 144 часов, из которых:

лекции: 24 ч;

практические занятия: 24 ч;

Язык реализации – русский.

в том числе практическая подготовка: 24 ч.

Тематический план:

Тема 1. Актуальные задачи современной неорганической химии и материаловедения.

Тема 2. Актуальные задачи и перспективные направления развития органической химии.

Тема 3. Актуальные задачи физической химии.

Тема 4. Актуальные задачи нефтехимии.

Тема 5. Актуальные задачи аналитической химии.

Тема 6. Актуальные задачи медицинской химии.

Б1.В.ДВ.01.01 Спектральные методы диагностики материалов

Элективная дисциплина.

Первый семестр, зачет

Язык реализации – русский.

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 з.е., 72 часов, из которых:

лекции: 16 ч;

практические занятия: 16 ч;

Язык реализации – русский.

в том числе практическая подготовка: 16 ч.

Тематический план:

Тема 1. Теоретические основы методов анализа, основанных на взаимодействии атомов и молекул с излучением.

Тема 2. ИК- и КР-спектроскопия, теоретические основы и практические аспекты применения.

Тема 3. Спектроскопия видимой и ультрафиолетовой области. Поглощающие свойства молекул. Основные электронные переходы. Комплексы с переносом заряда. Комплексы переходных металлов. Плазмонное поглощение. Природа света.

Тема 4. Люминесцентный анализ (ЛА).

Тема 5. *Ex situ* и *in situ* эксперименты в колебательной спектроскопии.

Б1.В.ДВ.01.02 Статистические методы планирования эксперимента в химии

Элективная дисциплина.

Первый семестр, зачет

Язык реализации – русский.

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 з.е., 72 часов, из которых:
лекции: 16 ч;

практические занятия: 16 ч;

Язык реализации – русский.

в том числе практическая подготовка: 16 ч.

Тематический план:

Тема 1. Планирование экстремальных экспериментов.

Тема 2. Экспериментально-статистические модели.

Тема 3. Обработка результатов измерений.

Тема 4. Крутое восхождение по поверхности отклика.

Тема 5. Исследование поверхности отклика в районе экстремума.

Тема 6. Симплексный метод планирования эксперимента.

Тема 7. Планирование эксперимента при выяснении механизма явлений.

Тема 8. Математическое моделирование химико-аналитических процессов.

Б1.В.ДВ.01.03 Физико-химия поверхности нанокompозитных систем

Элективная дисциплина.

Первый семестр, зачет

Язык реализации – русский.

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 з.е., 72 часов, из которых:
лекции: 16 ч;

практические занятия: 16 ч;

Язык реализации – русский.

в том числе практическая подготовка: 16 ч.

Тематический план:

Тема 1. Поверхности раздела фаз.

Тема 2. Кристаллическое строение твердых тел.

Тема 3. Термодинамика поверхности твердых тел.

Тема 4. Процессы на поверхности твердых тел

Тема 5. Эпитаксия и поверхностная сегрегация.

Тема 6. Электронная структура поверхности твердых тел.

Б2.О.01.01(У) Ознакомительная практика

Вид: учебная.

Тип: Ознакомительная практика.

Практика обязательная для изучения.

Первый семестр, зачет

Практика проводится на базе Способы проведения: стационарная.

Форма проведения: путем чередования с реализацией иных компонентов ОПОП) в соответствии с календарным графиком и учебным планом.

Общая трудоемкость практики составляет 2 з.е., 72 ч.

Б2.О.02.01(Пд) Преддипломная практика

Вид: производственная.

Тип: Преддипломная практика.

Практика обязательная для изучения.

Второй семестр, зачет с оценкой

Практика проводится на базе ТГУ Способы проведения: стационарная. Форма проведения: или путем чередования с реализацией иных компонентов ОПОП) в соответствии с календарным графиком и учебным планом.

Общая трудоемкость практики составляет 24 з.е., 864 ч.

Продолжительность практики составляет: 16 нед.

Б2.В.01.ДВ.01.01(П) Технологическая практика

Вид: производственная.

Тип: Технологическая практика.

Элективная практика.

Первый семестр, зачет с оценкой

Практика проводится на базе ТГУ, на базе научных институтов СО РАН, на базе профильных организаций (например, ООО «ИХТЦ», ООО «Солагифт», ООО «Завод редких металлов», ООО «Ифар», ООО «НИОСТ», ООО «Томскводоканал», ПАО «Сибур Холдинг» и др.), с которыми ТГУ заключен договор о практической подготовке. Способы проведения: стационарная, выездная.

Форма проведения: непрерывно в соответствии с календарным графиком и учебным планом.

Общая трудоемкость практики составляет 18 з.е., 648 ч.

Продолжительность практики составляет: 12 нед.

Б2.В.01.ДВ.01.02(Н) Научно-исследовательская работа

Вид: производственная.

Тип: Научно-исследовательская работа.

Элективная практика.

Первый семестр, зачет с оценкой

Практика проводится на базе ТГУ. Способы проведения: стационарная.

Форма проведения: путем чередования с реализацией иных компонентов ОПОП в соответствии с календарным графиком и учебным планом.

Общая трудоемкость практики составляет 18 з.е., 648 ч.

Продолжительность практики составляет: 12 нед.

ФТД.01 Компьютерное моделирование органических молекул

Факультативная дисциплина.

Второй семестр, зачет

Язык реализации – русский.

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 з.е., 72 часов, из которых:

лекции: 12 ч;

практические занятия: 20 ч;

Язык реализации – русский.

в том числе практическая подготовка: 20 ч.

Тематический план:

Тема 1. Теоретические основы квантовой химии. Квантовая химия - квантовая механика молекул. Исторический обзор развития квантовой химии. Основные постулаты квантовой химии. Операторы физических величин, волновые функции, собственные значения, линейная матричная алгебра. Проблема расчета и интерпретации физических и химических свойств молекул. Уравнение Шредингера для водородоподобных атомов. Квантовые числа, собственные функции, энергетические уровни и состояния. Электронные конфигурации многоэлектронных атомов. Спин электрона и принцип Паули. Уравнение Шредингера для многоатомной молекулы. Основные приближения методов квантовой химии: нерелятивистский гамильтониан, адиабатическое приближение Борна-

Оппенгеймера, одноэлектронное приближение. Детерминантные многоэлектронные волновые функции Слейтера.

Тема 2. Метод Хартри-Фока. Уравнения Хартри-Фока. Способы решения и принцип самосогласованного поля. Итерационная процедура.

Тема 3. Метод молекулярных орбиталей. Представление молекулярной орбитали в виде линейной комбинации атомных орбиталей. Типы атомных орбиталей, используемых в квантово-химических расчетах молекул: слейтеровские и гауссовские атомные орбитали. Распределение электронной плотности. Электронные заселенности атомов и химических связей по Малликену. Метод Рутана (ССП-МО-ЛКАО). Уравнения метода и способы их решения. Интерпретация результатов расчета. Теорема Купменса для потенциалов ионизации молекул. Метод ЭСХА. Приближение нулевого дифференциального перекрывания атомных орбиталей. Полуэмпирические методы решения уравнений Рутана с учетом всех валентных электронов.

Тема 4. Метод ЧПДП для расчетов возбужденных электронных состояний многоатомных органических молекул. Уравнения метода. Стандартная спектроскопическая система параметров.

Тема 5. Метод молекулярного электростатического потенциала (МЭСП) для оценки специфических межмолекулярных взаимодействий. Универсальные и специфические межмолекулярные взаимодействия. Уравнения и приближения метода МЭСП. Область применения метода, преимущества и недостатки.

Тема 6. Фотофизические процессы. Квантовые выходы фотопроцессов. Законы и правила люминесценции. Волновые функции электронно-колебательных состояний многоатомных молекул. Теория электронных переходов в многоатомных органических соединениях. Расчеты констант скоростей фотофизических процессов. Фосфоресценция органических соединений. Квантово-химическая модель фотолиза химических связей в органических соединениях. Межмолекулярные фотофизические процессы в органических системах. Межмолекулярный перенос энергии электронного возбуждения.

ФТД.02 Рентгеноструктурный анализ

Факультативная дисциплина.

Второй семестр, зачет

Язык реализации – русский.

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 з.е., 72 часов, из которых:

лекции: 12 ч;

практические занятия: 20 ч;

Язык реализации – русский.

в том числе практическая подготовка: 20 ч.

Тематический план:

Тема 1. Основы кинематической теории рассеяния рентгеновских лучей.

Тема 2. Основные этапы рентгеноструктурного структурного анализа.

Тема 3. Рентгенография поликристаллов

Тема 4. Рентгеноструктурный анализ поликристаллов.

Тема 5. Рентгеноструктурный анализ нанокристаллов.

ФТД.03 Современные аспекты координационной химии

Факультативная дисциплина.

Второй семестр, зачет

Язык реализации – русский.

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 з.е., 72 часов, из которых:

лекции: 12 ч;

практические занятия: 20 ч;

Язык реализации – русский.

в том числе практическая подготовка: 20 ч.

Тематический план:

Тема 1. Стабилизация неустойчивых степеней окисления в координационных соединениях

Тема 2. Комплексообразование в неводных средах

Тема 3. Комплексные соединения в материаловедении

Тема 4. Дизайн координационных соединений

ФТД.04 Полимеры в нефтехимии

Факультативная дисциплина.

Второй семестр, зачет

Язык реализации – русский.

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 з.е., 72 часов, из которых:

лекции: 12 ч;

практические занятия: 20 ч;

Язык реализации – русский.

в том числе практическая подготовка: 20 ч.

Тематический план:

Тема 1. Введение

Тема 2. Концентрированные растворы полимеров и студни (гели) полимеров

Тема.3. Полимерные присадки

Тема 4. Основы реологии жидкого агрегатного состояния вещества.