

Міністерство освіти і науки України

Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна

Хімічний факультет

“ЗАТВЕРДЖУЮ”



Проректор
з науково-педагогічної роботи

” 08 2020 р.

Робоча програма навчальної дисципліни

Фізична хімія конденсованих систем

(назва навчальної дисципліни)

Спеціальність 102 Хімія

Хімічний факультет

2020 / 2021 навчальний рік

Програму рекомендовано до затвердження Вченою радою хімічного факультету

“27” серпня 2020 року, протокол № 8

РОЗРОБНИКИ ПРОГРАМИ:

Бакланов О. М., д.х.н., проф., професор кафедри хімічної метрології
 Беліков К. М., к.х.н., доцент кафедри хімічної метрології
 Вітушкіна С.В., к.х.н., доцент кафедри прикладної хімії
 Водолазька Н. О., д.х.н., проф., професор кафедри фізичної хімії
 Дорошенко А. О., д.х.н., проф., завідувач кафедри органічної хімії
 Єльцов С. В., к.х.н., доц., доцент кафедри фізичної хімії
 Іванов В. В., д.х.н., проф., професор кафедри хімічного матеріалознавства
 Калугін О. М., к.х.н., професор кафедри неорганічної хімії, декан хімічного факультету
 Кириченко О. В., к.х.н., доцент кафедри неорганічної хімії
 Комихов С. О., к.х.н., доц., доцент кафедри прикладної хімії
 Коробов О. І., д.х.н., проф., завідувач кафедри хімічного матеріалознавства
 Кравченко А.В., к.х.н., доц., доцент кафедри прикладної хімії
 Лебідь О. В. к.х.н., доц., доцент кафедри фізичної хімії
 Мчедлов-Петросян М. О., д.х.н., проф., завідувач кафедри фізичної хімії
 Пантелеймонов А. В., к.х.н., доц., доцент кафедри хімічного матеріалознавства, проректор
 Решетняк О. О., к.х.н., доц., доцент кафедри хімічної метрології
 Христенко І. В. к.х.н., доц., доцент кафедри хімічного матеріалознавства
 Чебанов В.А., д.х.н., проф., завідувач кафедри прикладної хімії
 Чепелева Л. В., к.х.н., старший викладач кафедри органічної хімії
 Черановський В.О., д.ф.-м.н., проф., професор кафедри прикладної хімії
 Чергинець В.Л., д. х. н., проф., професор кафедри неорганічної хімії.
 Юрченко О. І., д.х.н., проф., завідувач кафедри хімічної метрології

Програму схвалено на засіданні кафедри фізичної хімії;

Протокол від “27” серпня 2020 року № 1

Завідувач кафедри фізичної хімії _____ (Мчедлов-Петросян М. О.)

Програму схвалено на засіданні кафедри неорганічної хімії

Протокол від “26” серпня 2020 року № 1

В.о. завідувача кафедри неорганічної хімії _____ (В'юнник І.М.)

Програму схвалено на засіданні кафедри хімічної метрології;

Протокол від “26” серпня 2020 року № 1

Завідувач кафедри хімічної метрології _____ (Юрченко О. І.)

Програму схвалено на засіданні кафедри органічної хімії;

Протокол від “26” серпня 2020 року № 1

Завідувач кафедри органічної хімії _____ (Дорошенко А. О.)

Програму схвалено на засіданні кафедри хімічного матеріалознавства

Протокол від “26” серпня 2020 року № 1

Завідувач кафедри хімічного матеріалознавства _____ (Коробов О.І.)

Програму схвалено на засіданні кафедри прикладної хімії;

Протокол від “27” серпня 2020 року № 1

Завідувач кафедри прикладної хімії _____ (Чебанов В.А.)

Програму погоджено методичною комісією хімічного факультету

Протокол від “27” серпня 2020 року, протокол № 1

Голова методичної комісії хімічного факультету _____ (Єфімов П.В.)

ВСТУП

Програма навчальної дисципліни “Фізична хімія конденсованих систем” складена відповідно до освітньо-наукової програми підготовки докторів філософії на третьому рівні вищої освіти

Введена в дію наказом ректора № 0302-1/185 від 29.03.2019

Спеціальності 102 Хімія

1. Опис навчальної дисципліни

1.1. Мета викладання навчальної дисципліни

Метою викладання навчальної дисципліни є сформувати у майбутніх докторів філософії чіткі уявлення щодо фундаментальних принципів фізичної хімії конденсованих систем, їх суттєвих взаємозв'язків, висвітлити значущість цих принципів для створення, дослідження та втілення в практику широкого кола функціональних матеріалів, сформувати навички постановки та вирішення досить масштабних фундаментальних та прикладних задач в цій важливій царині сучасної хімії.

1.2. Основні завдання вивчення дисципліни

сформувати чіткі уявлення щодо

- широкого кола теоретичних та експериментальних проблем сучасної хімії поверхні;
- сучасних напрямків дослідження адсорбції молекул та іонів на межі поділу вода–повітря та вода–неполярний розчинник;
- основних закономірностей іонного обміну;
- ліофобних та ліофільних нанодисперсних систем;
- керування стійкістю ліофобних нанодисперсних систем;
- основних класів функціональних матеріалів (неорганічних, органічних, гібридних) та фундаментальних основ технологій їх створення;
- супрамолекулярних, нанорозмірних і низькорозмірних функціональних матеріалів та галузей їх застосування;
- нових органо-мінеральних наноматеріалів для сорбції і аналізу;
- особливостей застосування кількісного фізико-хімічного аналізу при дослідженні нанорозмірних функціональних матеріалів;
- дослідження будови та властивостей низькорозмірних іон-радикальних солей, комплексів з перенесенням заряду та складних координаційних сполук, одержання компонентів з заданими властивостями та їх використання в якості нових функціональних матеріалів;
- принципів використання інструментальних методів дослідження у фізичній хімії, хімічному матеріалознавстві та суміжних дисциплінах;
- фізичних основ та принципів дії електронної мікроскопії, особливостей окремих різновидів електронної мікроскопії, основи їх використання у хімії та хімічному матеріалознавстві;
- фізичних основ та принципів використання у хімічному матеріалознавстві методів ядерного магнітного резонансу, електронного парамагнітного резонансу та інфрачервоної спектроскопії;
- закономірностей взаємодії світла з функціональними матеріалами на основі органічних сполук;
- застосування міжнародних стандартів та процедур підтвердження простежуваності та розрахунку невизначеності результатів вимірювань;

- основних принципів, термінології, та моделей, які використовуються при вивченні будови та фізико-хімічних властивостей нанорозмірних систем;
- опису електронної будови молекул;
- сучасних методів розрахунку спектральних характеристик молекул та атомно-молекулярних комплексів;
- основ методів неемпіричного молекулярно-динамічного моделювання багатоатомних систем, зокрема з методу Car-Parrinello МД моделювання.

навчити аспірантів

- класифікувати нанодисперсні системи за різними ознаками, планувати раціональне виготовлення нанодисперсних систем різного типу;
- виявляти відповідність між структурою речовини та її фізико-хімічними властивостями;
- грамотно планувати експеримент, обробляти та презентувати експериментальні дані;
- застосовувати кількісний фізико-хімічний аналіз для дослідження органо-мінеральних наноматеріалів;
- робити адекватний вибір інструментального методу (методів) аналізу для вирішення поставленого завдання;
- практичним навичкам застосування типових приборів та приладів;
- використовувати існуючі програмні комплексами, які дозволяють розрахувати шукані молекулярні характеристики.

1.3. Кількість кредитів – 18

1.4. Загальна кількість годин – 540

1.5. Характеристика навчальної дисципліни			
Нормативна / <u>за вибором</u>			
Денна форма навчання		Заочна (дистанційна) форма навчання	
Рік підготовки			
2-й		2-й	
Семестри			
1-й	2-й	1-й	2-й
Лекції			
18 год.	13 год.	9 год.	6 год.
Практичні, семінарські заняття			
29.5 год.	8.5 год.	15 год.	4 год.
Лабораторні заняття			
18.5 год.	20.5 год.	9 год.	10 год.
Самостійна робота			
264 год.	168 год.	297 год.	190 год.
Індивідуальні завдання			
не плануються			

1.6. Заплановані результати навчання

Програмні результати навчання, якими повинен оволодіти здобувач:

- методи класифікації, основні підходи до виготовлення (синтезу) нанодисперсних систем;
- сучасні уявлення щодо агрегативної стійкості ліофобних нанодисперсних систем, зокрема положення теорії Дерягіна – Ландау – Фервея – Овербека, її розвиток та сучасний стан;
- типи та різновиди ліофільних нанодисперсних систем; моделювання міцел поверхнево-активних речовин та інших агрегатів подібного типу методами молекулярної динаміки;
- методи вимірювання електрокінетичного потенціалу нанодисперсних об'єктів;
- підходи до опису іонних рівноваг, зокрема кислотно-основних, у водних міцелярних розчинах поверхнево-активних речовин, за допомогою електростатичної моделі (рівняння Хартлі – Макерджи – Фунасаки – Фромгерца) та моделі псевдофазного іонного обміну;
- аналогічні підходи до рівноваг у прямих та обернених мікроемульсіях, суспензіях ліпосом фосфоліпідів, тощо;
- методи опису кінетики хімічних реакцій у міцелах поверхнево-активних речовин та споріднених системах, зокрема теорія Березіна – Бантона;
- основні теорії молекулярної адсорбції на твердих адсорбентах, класифікацію адсорбентів та типи рівнянь ізотерм;
- особливості молекулярної адсорбції з розчинів та з газової фази;
- кількісний опис іонного обміну, властивості іонітів;
- властивості розчинних поліелектролітів;
- основні теорії адсорбції молекул на межі поділу вода–повітря та вода–неполярний розчинник;
- основні сучасні уявлення щодо адсорбції електролітів на межі поділу вода–повітря та вода–неполярний розчинник;
- рівняння двомірного стану речовини;
- основні положення кількісного фізико-хімічного аналізу;
- особливості інтерпретації результатів досліджень модельних та реальних поверхонь;
- основні типи функціональних матеріалів, найбільш поширені методи синтезу їх компонентів та технології створення;
- основні положення супрамолекулярної хімії, класифікацію супрамолекулярних систем, теоретичні основи їх створення та основні галузі застосування;
- основні типи наноструктурованих матеріалів, особливості їх фізичних та хімічних властивостей, основні напрямки практичного застосування у сучасній науці та промисловості;
- основи сучасних методів створення об'ємних неорганічних матеріалів (скло, кераміка, кристали), і підходи, які дають можливість застосовувати наявну вихідну інформацію для розробки нових матеріалів;
- основні методи контролю функціональних властивостей неорганічних об'ємних матеріалів;
- загальні принципи ідентифікації та встановлення будови органічних речовин за допомогою комплексу сучасних фізико-хімічних методів дослідження;
- принципи та можливості сучасних методів дослідження складу речовини, основи роботи з апаратурою для атомної та електронної спектроскопії; принципи застосування метрологічного апарату в хімії;
- фізичні основи квантової механіки та основні поняття що характеризують будову хвильової функції;
- існуючі підходи до опису електронного розподілу у молекулах;
- основи концепції теорії функціоналу густини;

- теоретичні засади розрахунку електронно-збуджених станів молекул в рамках теорії функціоналу густини (часово-залежна теорія функціоналу густини, TD-DFT);
- підходи до інтерпретації будови електронно-збуджених станів молекул в рамках теорії TD-DFT;
- основні напрямки, які використовуються для теоретичного дослідження та моделювання будови наночастинок благородних металів та їх фізико-хімічних властивостей;
- володіти основними уявленнями про будову наночастинок золота та срібла, та використовувати відповідну хімічну та фізичну термінологію.
- основи *ab initio* молекулярно-динамічне (МД) моделювання;
- методологію використання теорії функціоналу (електронної) густини (DFT) у неемпіричному МД моделюванні;
- основи методу молекулярної динаміки Car-Parrinello.

Компетентності, якими повинен оволодіти здобувач:

- виготовлювати ліофобні та ліофільні нанодисперсні системи із заданими властивостями;
- характеризувати нанодисперсні системи за основними показниками (розподіл частинок за розмірами, електричні властивості);
- прогнозувати термодинамічну стійкість нанодисперсних систем;
- визначати константи кислотно-основних рівноваг у міцелярних розчинах поверхнево-активних речовин та споріднених системах;
- вивчати кінетику хімічних процесів у цих системах;
- використовувати методи молекулярної динаміки для характеристики ліофільних нанодисперсних систем;
- проводити кількісну обробку ізотерм поверхневого натягу (двомірного тиску) у разі створення моношарів на поверхні води;
- проводити докладне дослідження органо-мінеральних наноматеріалів та інтерпретувати результати в термінах кількісного фізико-хімічного аналізу;
- використовувати комплекс сучасних фізико-хімічних методів дослідження для визначення будови органічних молекул, досліджувати внутрішньо- та міжмолекулярні взаємодії і встановлювати їх вплив на властивості органічних речовин та функціональних матеріалів на їх основі;
- кількісно оцінювати результат взаємодії органічних сполук та функціональних матеріалів на їх основі з електромагнітним випромінюванням ультрафіолетового та видимого діапазонів;
- правильно обирати, виходячи з природи речовини, методи дослідження її властивостей та складу; самостійно проводити розрахунки невизначеності результатів вимірювань;
- проводити розрахунки електронного розподілу у основному стані молекул та комплексів;
- проводити розрахунки топологічних характеристик електронного розподілу та вміти класифікувати особливі точки на трьохвимірній поверхні електронної густини;
- надати адекватну хімічну інтерпретацію отриманих характеристик;
- провести розрахунки електронно-збуджених станів молекул;
- провести інтерпретацію розрахунку та класифікувати збуджені стани молекул;
- з використанням програмного пакету GROMACS, виконувати МД моделювання наночастинок золота і срібла у водному розчині у присутності органічного ліганду;
- вміти використовувати отримані знання та прогнозувати фізико-хімічні властивості систем наночастинка-ліганд;
- проводити молекулярно-динамічне (МД) моделювання Car-Parrinello багатоатомних систем в конденсованому стані;

- вміти проводити аналіз структурних та електричних властивостей молекул (іонів) за результатами Car-Parrinello МД моделювання.
- орієнтуватися в сучасній науковій літературі, знаходити необхідні літературні джерела та професійно користуватися ними для постановки і вирішення фундаментальних та прикладних завдань;

2. Тематичний план навчальної дисципліни

Розділ 1. Фізична хімія поверхні

Тема 1. Поверхня як об'єкт досліджень

- Хімія і поверхня: сучасні погляди, напрямки досліджень, перспективи.
- Поняття добре охарактеризованої поверхні і методи її приготування.
- Сучасні експериментальні та теоретичні методи дослідження ідеальних та реальних поверхонь.
- Методи модифікації поверхні та регулювання її властивостей.
- Самоорганізація поверхневих структур.

Тема 2. Молекулярна адсорбція

- Сучасні уявлення щодо властивості поверхні поділу фаз та адсорбції.
- Термодинаміка молекулярної адсорбції.
- Основні типи рівнянь ізотерм молекулярної адсорбції.
- Особливості адсорбції молекул на межі поділу флюїдів.

Тема 3. Адсорбція електролітів з розчинів

- Основні закономірності іонного обміну.
- Іонний обмін в дисперсних системах.
- Сучасні уявлення щодо електрохімічного потенціалу та його поділу на складові.
- Адсорбція іонів на межі поділу флюїдів.

Розділ 2. Фізична хімія нанодисперсних систем

Тема 1. Ліофобні нанодисперсні системи

- Основні типи ліофобних дисперсних систем.
- Сучасні уявлення щодо подвійного електричного шару та електрокінетичного потенціалу.
- Сучасний стан розвитку теорії агрегативної стійкості ліофобних колоїдів.
- Вуглецеві нанодисперсні системи.

Тема 2. Ліофільні нанодисперсні системи

- Основні типи ліофільних дисперсних систем.
- Моделювання ліофільних нанодисперсних систем методами молекулярної динаміки.
- Ліофільні дисперсні системи як нанореактори.
- Протолітичні рівноваги у ліофільних нанодисперсних системах.
- Вплив ліофільних дисперсних систем на кінетику хімічних реакцій.

Тема 3. Нові органо-мінеральні наноматеріали (ОМН) для сорбції і аналізу

- Різноманітність та основні властивості ОМН; перспективи їх використання.
- Методи отримання ОМН; золь-гель метод, темплатний синтез.
- Фізико-хімічні методи дослідження ОМН.

- Основні поняття кількісного фізико-хімічного аналізу; мета і засади його застосування при дослідженні ОМН.
- Термодинамічні основи застосування методу для вивчення процесів у гетерогенних системах.
- Основні підходи до планування експерименту.
- Основи комп'ютерного визначення параметрів моделей; критерії збіжності моделі з експериментом, проблема надлишковості моделей.

Розділ 3. Сучасні функціональні матеріали для прикладної хімії

Тема 1. Нанорозмірні та супрамолекулярні функціональні матеріали

- Поняття про нанорозмірні системи та наноматеріали; квантові точки; квазіодновимірні матеріали; квазідвовимірні матеріали
- Поняття супрамолекулярної хімії, як хімії “за межами молекули”. Роль слабких міжмолекулярних взаємодій в супрамолекулярній хімії.
- Основні об'єкти супрамолекулярної хімії, основні типи рецепторів.
- Поняття самоорганізації, приклади систем, що самоорганізуються, темплатний синтез.
- Дендримери та їх особливості як об'єктів супрамолекулярної хімії.
- Загальна інформація щодо подальших перспектив розвитку супрамолекулярних та нанорозмірних функціональних матеріалів та областей їх застосування.

Тема 2. Об'ємні неорганічні матеріали

- Скло і ситали. Неорганічне скло. Основні визначення, класифікація за хімічним складом, властивостям і призначенням. Ситали. Склад, структура і властивості.
- Кераміка. Основні визначення. Класифікація керамічних матеріалів. Основні методи одержання. Розчинні методи одержання кераміки і товстоплівкових покриттів (золь-гель процес, метод Печчіні).
- Монокристали. Неорганічні кристали. Особливості росту кристалів. Спрямована кристалізація, її види. Дефекти в кристалічних матеріалах.

Тема 3. Практичне використання функціональних матеріалів

- Будова, провідні та оптичні властивості іон-радикальних солей; їх застосування для хімічних сенсорів та електроніки.
- Просторова конфігурація та фізичні властивості комплексів; ІЧ- та електронна спектроскопія координаційних сполук. Методи магнетохімії в хімії комплексів.

Розділ 4. Фотоніка органічних сполук та функціональних матеріалів на їх основі

Тема 1. Електронна абсорбційна спектроскопія органічних сполук.

- Фізичні основи методу. Апаратура, що застосовується для вимірювання електронних спектрів.
- Класифікація електронних переходів в молекулах. Правила відбору у електронній спектроскопії.
- Основні принципи формування та сприяння забарвлення. Зв'язок між забарвленням та структурою хімічних сполук. Хромофорна теорія. Основні закони поглинання світла.
- Випадкові та систематичні помилки у методі спектрофотометрії: методи мінімізації їх впливу на результати вимірювань.
- Основи та принципи застосування методу електронної абсорбційної спектроскопії в органічній хімії. Якісний і кількісний аналіз. Багатокомпонентні системи. Спеціальні прийоми в електронній спектроскопії.

Тема 2. Люмінесцентна спектроскопія органічних сполук.

- Фізичні основи методу. Первинні фотофізичні процеси, які відбуваються у органічній речовині при поглинанні світла. Діаграма Яблонського.
- Закони, що регулюють випромінювання світла органічними сполуками. Спонтанне та стимульоване випромінювання: принципи функціонування лазерів на органічних люмінофорах.
- Апаратура для люмінесцентної спектроскопії, типи вимірюваних спектрів.
- Квантові виходи. Зв'язок між будовою органічних сполук і їх люмінесцентними властивостями. Спектрально-люмінесцентна класифікація за Нурмухаметовим-Шигоріним-Плотніковим.
- Кінетика елементарних фотопроеесів у системах з хімічними взаємодіями у електронно-збудженому стані. Гасіння флуоресценції, рівняння Штерна-Фольмера. Основи та принципи застосування методу люмінесцентної спектроскопії в органічній хімії і зв'язаних розділах науки.
- Технічні застосування органічних люмінесцентних сполук. Основи та принципи застосування спектрально-кінетичних методів в хімії. Визначення часу життя молекул у електронно-збуджених станах, дослідження швидких хімічних перетворень електронно-збуджених молекул.

Тема 3. Фотохімія органічних сполук.

- Основи фотохімії: відмінність фізико-хімічних властивостей молекул у електронно-збуджених станах від їх властивостей у основному стані (структура, кислотно-основні властивості, реакційна здатність збуджених станів).
- Дослідження механізмів фотохімічних реакцій: якісні та кількісні підходи. Квантові виходи і кінетика фотохімічних процесів. Гасіння електронно-збуджених станів.
- Фотохімія карбонільних сполук: α - та β -розрив, фотовідновлення, фотоокиснення, фотоперегрупування, фотоциклоприєднання.
- Фотохімія ненасичених сполук: цис-транс ізомеризація, електроциклічні реакції, фотоокиснення.
- Фотохімія ароматичних сполук: фотоізомеризація, фотоциклоприєднання, реакції електрофільного і нуклеофільного заміщення, що відбуваються під впливом опромінення.
- Фотохімія нітрогеновмісних органічних сполук.

Розділ 5. Фізичні методи досліджень у хімічному матеріалознавстві

Тема 1. Метод ядерного магнітного резонансу. Інтерпретація мультиплетної структури спектрів ЯМР.

- Фізичні основи явища ядерного магнітного резонансу. Зняття виродження спінових станів в постійному магнітному полі. Заселеність рівнів енергії, насичення, релаксаційні процеси і ширина сигналу.
- Хімічний зсув і спин-спінове розщеплення в спектрах ЯМР. Відносний хімічний зсув.
- Спін-спінова взаємодія ядер, її природа, число компонент мультиплетів, розподіл інтенсивності, правило сум, константа спин-спінової взаємодії. Аналіз спектрів ЯМР спінових систем типу АВ, АХ, А₂В, АА'В, АВХ, АМХ, АА'ВВ', АА'ХХ'.
- Вплив швидкої релаксації ядер на мультиплетну структуру спектрів ЯМР. Хімічний обмін і динамічний ЯМР.
- Ядерний ефект Оверхаузера. Спектроскопія на ядрах ¹³С, ¹⁹F, ³¹P. Програми для візуалізації та обробки спектрів ЯМР: MESTREC, ADVASP analyzer, NUTS32.

Тема 2. Двовимірна ядерна магнітно-резонансна спектроскопія в аналізі функціональних матеріалів.

- Кореляційна двовимірна спектроскопія ЯМР (COSY). Принципи одержання двовимірних спектрів. Інтерпретація структури мультиплетів в спектрах COSY.
- Спектроскопія тотальних кореляцій (TOCSY). Методи, засновані на ядерному ефекті Оверхаузера: NOESY, ROESY.
- Метод INADEQUATE. Гетероядерна кореляційна спектроскопія: HMQC, HSQC, HMBC, методи HETCOR і COLOC.
- Сучасна стратегія використання двовимірних кореляційних експериментів при визначенні структури нових органічних сполук і функціональних матеріалів. Розділення хімічного зсуву і констант спін-спінової взаємодії: двовимірна спектроскопія J-здатності.
- Трьохвірна спектроскопія ЯМР та її застосування в аналізі складних природних сполук і функціональних матеріалів.

Тема 3. Поглиблені уявлення про мас-спектрометрію та ІЧ-спектроскопію

- Генерація іонів у мас-спектрометрії: методи жорсткої (EI) та м'якої (CI, ESI, MALDI, FAB) іонізації; їх порівняльна характеристика, переваги застосування та обмеження.
- Хімічна іонізація (CI) як метод м'якої іонізації. Квазімолекулярний іон та його утворення. Особливості інтерпретації CI мас-спектру; врахування природи газу-носія.
- Використання мас-спектрометрії для аналізу біополімерів та інших органічних молекул з великими молекулярними масами. Електроспрей-іонізація (ESI) техніка MALDI. ТанDEMна мас-спектрометрія.
- Спектральний діапазон ІЧ спектроскопії та природа ІЧ спектрів. Теорія молекулярних коливань. Типи молекулярних коливань та їх енергія. ІЧ спектр та його основні параметри. Характеристики полоси поглинання: хвильове число, інтенсивність. Експериментальні аспекти ІЧ спектроскопії: вимірювання у твердій, рідкій, газоподібній фазі. ІЧ спектроскопія з Фур'є-перетворенням.
- Використання ІЧ спектроскопії для встановлення будови сполуки: характеристичні полоси, порівняння області "відбитків пальців". Залежність характеристик полоси поглинання від параметрів структури молекули.
- Спеціальні аспекти ІЧ спектроскопії: кількісні вимірювання, визначення термодинамічних параметрів, природи та міцності водневого зв'язку, можливості використання для вивчення просторової будови сполуки. Двовимірна ІЧ спектроскопія.
- Метод спектроскопії порушеного повного внутрішнього відбиття. Галузь застосування методу.

Тема 4. Методи атомної, електронної, сонолюмінесцентної спектроскопії та вольтамперометрії

- Теоретичні основи методів. Сучасне апаратне забезпечення методів. Приклади застосування та метрологічні характеристики методів.
- Скануюча електронна мікроскопія.
- Рентгенівська фотоелектронна та Оже-спектроскопія. Застосування методів для дослідження поверхні функціональних матеріалів.
- Твердофазна спектрофотометрія та спектроскопія дифузного відбиття — методи дослідження оптично прозорих і непрозорих сорбентів з іммобілізованими реагентами.
- Визначення вмісту основної речовини та макродомішок у висококонцентрованих природних і штучних розчинах (розсолах, технологічних розчинах) методами сонолюмінесценції.
- Вольтамперометрія, інверсійна вольтамперометрія. Метрологічні характеристики вольтамперометрії та засоби їх оцінювання.

Тема 5. Хімічна метрологія у фізичних методах досліджень.

- Простежуваність результатів вимірювань як один з факторів забезпечення якості вимірювань. Методи забезпечення простежуваності результатів вимірювань.
- Невизначеність вимірювань. Необхідність та принципи оцінки невизначеності вимірювань. Три основні підходи до розрахунку невизначеності. Виявлення джерел невизначеності. Приклади розрахунку невизначеності.

Розділ 6. Комп'ютерний дизайн молекул та процесів

Тема 1. Квантова теорія атомів в молекулі.

Квантова інтерпретація хвильової функції. Нормованість хвильової функції. Одноелектронна (орбітальна) картина хімічного зв'язку. Аналізу електронної густини. Електронна густина у методі МОЛКАО. Аналіз заселеностей АО. Проблема розрахунку атомних заселеностей. Метод Малікена та Льовдіна. Заселеності за Хіршфельдом. Топологічна теорія хімічного зв'язку за Бадером. Критичні точки функції електронної густини. Результати порівняльних розрахунків атомних зарядів за Малікеном, Льовдіним та Бадером. Характеристики атомних взаємодій в термінах електронної густини і густини кінетичної енергії в критичних точках зв'язку.

Тема 2. Електронно-збуджені стани в теорії функціоналу густини.

Уявлення про метод функціоналу густини (DFT). Теорема Хоенберга-Кона. Сучасні типи функціоналів. Методи градієнтної корекції, гібридні функціонали. Метод Кона-Шема. Часово-залежні теореми Хоенберга-Кона. Часово-залежна DFT (TD-DFT) як альтернатива методу конфігураційної взаємодії. Рівняння Касіди. Наближення Тамма-Данкова в теорії TD-DFT. Приклади розрахунку спектрів, та порівняння із результатами інших квантовохімічних підходів.

Тема 3. Теоретичні методи дослідження наночастинок благородних металів.

Будова та фізико-хімічні властивості кристалічного золота та срібла. Типи кристалічних комірок. Функціоналізація наночастинок металів органічними лігандами, синтетичними полімерами та біологічними макромолекулами. Сучасні комп'ютерні методи дослідження наночастинок металів.

Тема 4. Молекулярно-динамічне моделювання наночастинок золота та срібла.

Основні принципи МД моделювання наночастинок золота та срібла. Міжчастинкові емпіричні потенціали метал-метал. Одержання потенціалів за квантово-хімічними *ab initio* розрахунками. Молекулярно-динамічне моделювання неорганічного ядра наночастинок. Врівноваження системи. Функція радіального розподілу метал-метал. Валідація МД моделювання.

Тема 5. Неємпіричне молекулярно-динамічне моделювання конденсованих систем.

Порівняльна характеристика методів молекулярного моделювання багатоатомних систем. *Ab initio* молекулярно-динамічне (МД) моделювання. Використання теорія функціоналу (електронної) густини (DFT) у неємпіричному МД моделюванні. Основи методу

молекулярної динаміки Car-Parrinello. Поняття фіктивної маси орбіталей та фіктивної кінетичної енергії орбіталей.

Тема 6. Параметри електронного розподілу в основному стані.

Знайомство з програмою **AIMALL**. Порівняльний аналіз різних способів розрахунку електронної густини на атомах. Побудова статистичних моделей що описують різноманітні фізико-хімічні параметри.

Тема 7. Електронні збудження у молекулах.

Розрахунки електронних збуджень та електронно збуджених станів молекул в програмі GAMESS.

Тема 8. Молекулярно-динамічне моделювання наночастинок золота та срібла.

Знайомство з основними вимогами програмного пакету GROMACS та VMD. Використання програми VMD для візуалізації координат молекули або групи атомів. Завдання періодичних граничних та сольватація наночастинок металу молекулами води за допомогою утиліти genbox. Врівноваження системи наночастинок золота або срібла у воді. Запис траєкторії молекулярно-динамічного моделювання сольватованої наночастинок металу та її використання для візуалізації у програмному пакеті VMD. Виконання аналізу результатів моделювання наночастинок у воді у програмному пакеті GROMACS. Виконання аналізу кінетичних та термодинамічних властивостей системи.

Тема 9. Неємпіричне молекулярно-динамічне моделювання рідкої води.

Знайомство з програмним пакетом CPMD для неємпіричного молекулярно-динамічного моделювання конденсованих систем. Прогнозування розподілу структурних та електростатичних властивостей молекул у складі рідкої води методом молекулярної динаміки Car-Parrinello.

3. Структура навчальної дисципліни

Назви розділів	Кількість годин											
	денна форма						заочна форма					
	усього	у тому числі					усього	у тому числі				
		л	п	лаб.	інд.	с. р.		л	п	лаб.	інд.	с. р.
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
Розділ 1. Фізична хімія поверхні												
Разом за розділом 1	60	4	4	4	-	48	60	2	2	2	-	59
Розділ 2. Фізична хімія нанодисперсних систем												
Разом за розділом 2	60	4	4	4	-	48	60	2	2	2	-	59
Розділ 3. Сучасні функціональні матеріали для прикладної хімії												
Разом за розділом 3	105	5	8.5	7.5	-	84	105	2	4	3	-	95
Розділ 4. Фотоніка органічних сполук та функціональних матеріалів на їх основі												
Разом за розділом 4	52.5	6		4.5		42	52.5	3		2		53
Розділ 5. Фізичні методи досліджень у хімічному матеріалознавстві												
Разом за розділом 5	157.5	4	21.5	6		126	157.5	2	9	3		126
Розділ 6. Комп'ютерний дизайн молекул та процесів												
Разом за розділом 6	105	8		13		84	105	4		6		95
Усього годин	540	31	38	39		432	540	15	19	19		487

4. Теми семінарських (практичних, лабораторних) занять

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
1	Дослідження впливу поверхнево-активних речовин на константу швидкості хімічної реакції (лабораторна робота)	4
2	Застосування методу молекулярної динаміки для вивчення міцел ліофільних ПАВ і адсорбції молекул (іонів) різної природи на поверхні міцел (семінар)	4
3	Адсорбція аніонних барвників органо-кремнеземними гібридними матеріалами (лабораторна робота)	4
4	Взаємозв'язок експериментальних і теоретичних досліджень у вивченні модельних та реальних поверхонь (семінар)	2
5	Особливості кількісного фізико-хімічного аналізу у дослідженні органо-кремнеземних наноматеріалів (семінар)	2
6	Функціональні матеріали для хімічних сенсорів та електроніки (семінар).	4.5
7	Методи дослідження просторової будови комплексів (семінар).	2
8	Властивості координаційних сполук у наближенні ТКП. Магнітні властивості координаційних сполук (семінар).	2
9	Склоутворення. Технологічні особливості варки скла	2
10	Твердофазний синтез функціональної кераміки	2
11	Методи вирощування монокристалів різного призначення	3.5
12	Спектри поглинання і чотири види спектрів флуоресценції органічних сполук (лабораторна робота)	1.5
13	Квантовий вихід і час згасання флуоресценції (лабораторна робота)	1.5
14	Фотохімічна цис-транс ізомеризація ненасичених органічних сполук (лабораторна робота)	1.5
15	Сучасні фізичні методи аналізу функціональних матеріалів	5.5
16	Поглиблення уявлень про мас-спектрометрію та ІЧ-спектроскопію	5
17	Розрахунок невизначеності результатів хімічного аналізу. Частина 1 (семінар).	5
18	Розрахунок невизначеності результатів хімічного аналізу. Частина 2 (семінар).	6
19	Експериментальна оцінка валідаційних характеристик методики атомно-абсорбційного визначення металів (лабораторна робота).	6
20	Параметри електронного розподілу в основному стані (лабораторна робота)	3
21	Електронні збудження у молекулах (лабораторна робота)	3
22	Молекулярно-динамічне моделювання наночастинок золота та срібла (лабораторна робота)	3.5
23	Неемпіричне молекулярно-динамічне моделювання рідкої води (лабораторна робота)	3.5
	Разом	77

5. Завдання для самостійної роботи

№ з/п	Види, зміст самостійної роботи	Кількість годин
1	Рівняння стану мономолекулярних шарів на межі поділу флюїдів	16

2	Кінетика реакцій нуклеофільного приєднання у розчинах поверхнево-активних речовин	16
3	Моделювання структури міцел іонних поверхнево-активних речовин методами молекулярної динаміки	16
4	Сучасні напрямки розвитку експериментальних та теоретичних методів дослідження модельних та реальних твердих поверхонь	16
5	Сучасні підходи до створення наноструктурованих гетерогенних каталізаторів	16
6	Проблемні аспекти кількісного фізико-хімічного аналізу стосовно дослідження органо-мінеральних наноматеріалів	16
7	Галузі застосування супрамолекулярних функціональних матеріалів.	10.5
8	Аналітичний огляд перспективних напрямків застосування квантових точок та наномagnetиків.	10.5
9	Функціональні матеріали для хімічних сенсорів та електроніки	10.5
10	Супрамолекулярні координаційні сполуки. Сполуки з нульовим і негативним ступенями окиснення ЦА. Координаційні сполуки на поверхні твердого тіла. Фізичні властивості комплексів.	10.5
11	Фізико-хімічне обґрунтування склоутворення. Процеси, що відбуваються при скловарінні. Сировинні матеріали і вимоги до їх якості. Основи технології скловаріння. Гомогенізація, освітлювання і відпалювання виробів зі скла. Ситали. Технологічна схема одержання. Сировинні матеріали для виробництва технічних ситалів.	14
12	Особливості росту зерен при відпаленні кераміки. Основи твердофазного синтезу оксидних матеріалів. Формування кераміки. Пресування (холодне, ізостатичне, гаряче) і їх особливості. Функціональна кераміка: конденсаторна кераміка, надпровідні матеріали, ферити, п'єзоелектрики.	14
13	Основні механізми росту кристалів вплив пересичення розчину на механізм кристалізації. Методи одержання (виращування з розчину, з розплаву) і їх особливості, практичне застосування. Вплив домішок на властивості кристалів, методи передростової обробки.	14
14	Електронна абсорбційна спектроскопія органічних сполук	14
15	Флуоресцентна спектроскопія органічних сполук	14
16	Фотохімічні перетворення органічних сполук	14
17	Електронна мікроскопія (ТЕМ та СЕМ) в аналізі функціональних матеріалів	14
18	Сучасні аспекти застосування ІЧ спектроскопії	14
19	Резонансні методи в аналізі функціональних матеріалів	14
20	Методи атомної спектроскопії. Атомно-флуоресцентна спектроскопія. Поєднання методу генерації гідридів з методами атомної спектроскопії.	14
21	Методи електронної спектроскопії. Скануюча електронна мікроскопія. Рентгенівський мікроаналіз. Мікродифракція.	14
22	Раманівська спектроскопія	14
23	Спектроскопія порушеного повного внутрішнього відбиття.	14
24	Твердофазна спектrophотометрія та спектроскопія дифузного відбиття — методи дослідження оптично прозорих і непрозорих сорбентів з іммобілізованими реагентами	14

25	Сонолюмінісцентна спектроскопія: визначення поглиненої акустичної енергії в технологічних розчинах. Використання ефекту гасіння сонолюмінісценції у хімічному аналізі	14
26	Квантова теорія атомів в молекулі	8
27	Електронно-збуджені стани в теорії функціоналу густини	8
28	Теоретичні методи дослідження наночастинок благородних металів	8
29	Молекулярно-динамічне моделювання наночастинок золота та срібла	8
30	Неемпіричне молекулярно-динамічне моделювання конденсованих систем	8
31	Параметри електронного розподілу в основному стані	11
32	Електронні збудження у молекулах	11
33	Молекулярно-динамічне моделювання наночастинок золота та срібла	11
34	Неемпіричне молекулярно-динамічне моделювання рідкої води	11
	Разом	432

6. Індивідуальні завдання

Не плануються

7. Методи контролю

Опитування, допуск до лабораторної роботи, звіт за результатами лабораторної роботи, звіт за результатами самостійної роботи, залік, екзамен.

8. Схема нарахування балів

Перший семестр

Поточний контроль, самостійна робота, індивідуальні завдання														Екзамен	Сума
Розділ 1			Розділ 2			Розділ 3			Розділ 6				Разом		
T1	T2	T3	T1	T2	T3	T1	T2	T3	T6	T7	T8	T9			
3	3	3	3	3	3	5	5	6	6	6	8	6	60	40	100

Другий семестр

Поточний контроль, самостійна робота, індивідуальні завдання									Екзамен	Сума
Розділ 4			Розділ 5					Разом		
T1	T2	T3	T1	T2	T3	T4	T5			
6	6	7	6	6	15	7	7	60	40	100

Шкала оцінювання

Сума балів за всі види навчальної діяльності протягом семестру	Оцінка
90 – 100	відмінно
70-89	добре
50-69	задовільно
1-49	незадовільно

9. Рекомендована література

Основна література

1. Функциональные материалы для науки и техники (под. ред. В.П. Семиноженко) / Харьков: Институт монокристаллов, 2001 г., 605 с.
2. Прогресивні матеріали і технології (под. ред. І.К. Походні) / в 2 т. Київ: Академперіодика, 2003
3. Супрамолекулярная химия: Концепции и преспективы / Ж.-М. Лен, пер. с англ. – Новосибирск: Наука. Сиб. предприятие РАН, 1998. – 334 с.
4. Супрамолекулярная химия / Д.В. Сид, Д.Л. Этвуд, пер. с англ. В 2 т., М.: ИКЦ «Академкнига», 2007
5. Основы современного электрохимического анализа / Г.К.Будников, В.Н.Майстренко, М.Р.Вяселев. -М.: Мир, 2003. –592с.
6. Рао Ч.Н.Р., Гопалакришиан Дж. Новые направления в химии твердого тела: Структура, синтез, свойства, реакционная способность и дизайн материалов. - Новосибирск, Наука, 1990.-520 с.
7. Эггинс Б. Химические и биологические сенсоры. -М: Техносфера, 2005. –336с.
8. Стародуб В.А., Стародуб Т.Н. Анион - радикальные соли и комплексы с переносом заряда на основе тетрацианохинодимера и других сильных π - электронных акцепторов. // Усп. химии. – 2014. – Т. 83. – № 5. – С. 391-438.
9. Дьячков П.Н. Углеродные нанотрубки: строение, свойства, применения – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2006. – 293 с.
10. Раков Э.Г. Нанотрубки и фуллерены: Учебн. пособие. – М.: Университетская книга, Логос. 2006. – 376 с.
11. С.О. Алексеев. Хімія координаційних сполук. К., Київський університет, 2010
12. Свердлова О.В. Электронные спектры в органической химии. Л.: Наука, 1986. (Сайдов Г.В., Свердлова О.В. Методы молекулярной спектроскопии.- Санкт-Петербург: Професионал, 2008.- 338 с.)
13. Берштейн И.Я., Каминский Ю.Л. Спектрофотометрический анализ в органической химии. Л.: Наука, 1986.
14. Лакович Дж. Основы флуоресцентной спектроскопии. М.: Мир, 1986.
15. Барлтроп Дж., Койл Дж. Возбужденные состояния в органической химии. М.: Мир, 1978.
16. Воловенко Ю.М., Карцев В.Г., Комаров И.В., Туров А.В., Хиля В.П. Спектроскопия ядерного магнитного резонанса для химиков. М.: МБФНП, 2011. - 704 с.
17. Дероум Э. Современные методы ЯМР для химических исследований. М.: Мир, 1992. -

16. Берштейн И.Я., Каминский Ю.Л. Спектрофотометрический анализ в органической химии. Л.: Наука, 1986.
17. Лакович Дж. Основы флуоресцентной спектроскопии. М.: Мир, 1986.
18. Барлтроп Дж., Койл Дж. Возбужденные состояния в органической химии. М.: Мир, 1978.
19. Воловенко Ю.М., Карцев В.Г., Комаров И.В., Туров А.В., Хиля В.П. Спектроскопия ядерного магнитного резонанса для химиков. М.: МБФНП, 2011. - 704 с.
20. Дероум Э. Современные методы ЯМР для химических исследований. М.: Мир, 1992. - 403 с.
21. Гюнтер Х. Введение в курс спектроскопии ЯМР. М.: Мир, 1984. - 478 с.
22. Эрнст Р., Боденхаузен Дж., Вокаун А. ЯМР в одном и двух измерениях. М.: Мир, 1990. - 711 с.
23. Пентин Ю. А., Вилков Л. В. Физические методы исследования в химии – М.: Мир. – 2006. 690 с.
24. Лебедев А. Т. Масс-спектрометрия в органической химии. М.: Бином, 2003. 496с.
25. Gross J. Mass Spectrometry: A Textbook. 2nd Ed. Springer, 2011. -779 p.
26. Steckel A., Schlosser G. An Organic Chemist's Guide to Electrospray Mass Spectrometric Structure Elucidation: A Review. *Molecules*, 2019. –V. 24(3). –P. 611-622.
27. Wang, Y., Sun J., Qiao J., Ouyang J., Na N. A “Soft” and “Hard” Ionization Method for Comprehensive Studies of Molecules." *Analytical Chemistry*, 2018. –V. 90 (24). –P. 14095-14099.
28. Holčápek M., Jirásko R., Líba M. Basic rules for the interpretation of atmospheric pressure ionization mass spectra of small molecules. *Journal of Chromatography A*, 2010. –V. 1217 (25). –P. 3908-3921.
29. Иванов В. В., Слета Л. А. Квантовая химия. Харьков: “Фолио”, 2007, 443 с.
30. Jensen F. Introduction to Computational Chemistry. Wiley, 2006, 624 p.
31. Степанов Н. Ф. Квантовая механика и квантовая химия. Изд-во Московского университета: М., 2001. 519 с.
32. Tsuneda T. Density Functional Theory in Quantum Chemistry. Springer.– Japan. – 2014. – 200 p.
33. Х. Окабе, Фотохимия малых молекул. М. Мир. 1981, 500 с.
34. C. Hattig, Structure Optimizations for Excited States with Correlated Second-Order Methods: CC2 and ADC(2) / in book: Adv. Quant. Chem.– 2005.– v. 50.– P. 37–60.
35. Волков, С. В., Ковальчук, Є. П., Огненко, В. М., Решетняк, О. В. Нанохімія, Наносистеми, Наноматеріали. Наукова думка: Київ, 2008; 426 с.
36. Mingos, D. M. P. Gold Clusters, Colloids and Nanoparticles I, Springer International Publishing, 2014, Vol. 161, – 282 p.
37. Пичугина, Д. А., Кузьменко, Н. Е., Шестаков, А. Ф. Индивидуальные кластеры золота, стабилизированные лигандами: Строение, синтез и применение. *Успехи химии* 2015, 84, 1114-1144.
38. Lee, D.-E.; Koo, H.; Sun, I.-C.; Ryu, J. H.; Kim, K.; Kwon, I. C. Multifunctional Nanoparticles for Multimodal Imaging and Theragnosis. *Chem. Soc. Rev.* 2012, 41, 2656-2672
39. О. Н. Калугин, М.Н. Волобуев, Я.В. Колесник. MDNAES: Программный комплекс для компьютерного моделирования ион-молекулярных систем методом молекулярной динамики. // Вест. Харьк. ун-та. Химия. – 1999. - № 454. Вып. 4 (27). – С. 58-79.
40. О.М. Калугін, Я.В. Колесник. Молекулярно-динамічне моделювання конденсованих неупорядкованих систем. Методичні вказівки з курсу.– Х.: ХНУ імені В. Н. Каразіна, 2006.– 95 с.
41. J. M. Haile. Molecular dynamics simulation. Elementary methods. John Wiley & Sons Inc., New York, 1992, 489 p.
42. Molecular Dynamics. From Classical to Quantum Methods. P.B. Balbuena, J.M. Seminario, Eds. In series: *Theoretical and Computational Chemistry*, Vol. 7. Elsevier, Amsterdam, 1999, 946 p.

43. Холин Ю.В. Количественный физико-химический анализ комплексообразования в растворах и на поверхности химически модифицированных кремнеземов: содержательные модели, математические методы и их приложения. – Харьков: Фолио, 2000. – 288 с.
44. Холін Ю.В. Кількісний фізико-хімічний аналіз комплексоутворення у гетерогенних системах. Навч. посібник для студентів хімічного факультету. – Харків: ХНУ, 2002. – 38 с.
45. Васильев В.П. Аналитическая химия. В 2 кн. – 6-е изд., стереотип. Кн. 2: Физико-химические методы анализа. – М.: Дрофа, 2007. – 383 с
46. Основы аналитической химии. В 2 кн. / Под ред. Ю.А. Золотова. – 3-е изд., перераб. и доп. Кн. 2: Методы химического анализа. – М.: Высш. шк., 2004. – 503 с.
47. Аналитическая химия. Проблемы и подходы. В 2 т. : Пер. с англ. / Под ред. Р. Кельнера, Ж.-М. Мерме, М. Отто, М. Видмера. – М.: «Мир»: ООО «Издательство АСТ», 2004.- (Лучший зарубежный учебник). Т.1. – 608 с. Т. 2. – 728 с.
48. Отто М. Современные методы аналитической химии. В 2 т. Пер. с нем. – М.: «Техносфера», 2004. Т.1. – 328 с. Т. 2. – 281 с.
49. Руководство ЕВРАХИМ/СИТАК. Количественное описание неопределенности и аналитических измерений. 2-е изд. Пер. с англ. – С.-Петербург: ВНИИМ им. Д.И. Менделеева, 2002. – 149 с.
50. ГОСТ Р 52361-2005. Контроль объекта аналитический. Термины и определения. М.: ИПК Издательство стандартов, 2005.
51. ГОСТ ИСО 11843-4-2005. Межгосударственный стандарт. Статистические методы. Способность обнаружения. М.: Стандартинформ, 2006.
52. ДСТУ ГОСТ ИСО 5725-1:2005.Точність (правильність і прецизійність) методів та результатів вимірювання. К.: Держстандарт України, 2006.
53. Термінологія аналітичного вимірювання. Вступ до VIM 3: за ред. В. Барвік та Е. Прічард: переклад першого видання настанови Eurachem 2011 р. – К.: ТОВ «Юрка Любченка», 2015 – 82 с.
54. Настанова Eurachem/EUROLAB/CITAC/Nordtest/AMC «Непевність виміру, пов'язана з відбиранням проби. Настанова з методів та підходів»: за ред. М. Ремзі та С. Еллісона: переклад першого видання 2007 р. – К.: ТОВ «Юрка Любченка», 2015 – 156 с.
55. Горилецкий В.И., Гринев Б.В., Заславский Б.Г., Смирнов Н.Н., Суздаль В.С. Рост кристаллов.-Харьков: Акта, 2002.-536 с.
56. Глобус М.Е., Гринев Б.В. Неорганические сцинтилляторы. Новые и традиционные материалы.- Харьков: Акта.-2000.-408 с.
57. Окадзаки К. Технология керамических диэлектриков. М.: Изд-во Энергия, 1976.-327 с.
58. Аппен А.А. Химия стекла.-Л.: Химия, 1974.-352 с.
59. Бланк А.Б. Аналитическая химия в исследовании и производстве неорганических функциональных материалов.-Харьков: Институт монокристаллов, 2005.-352 с.
60. Handbook of dielectric, piezoelectric and ferroelectric materials. Synthesis, properties and applications, Ed. Z.-G. Ye.-Cambridge: Woodhead Publishing Ltd, 2008.-1092 p.
61. Kang H., Buchman J. T., Rodriguez R. S., Ring H. L., He J., Bantz K. C., Haynes C. L. / Stabilization of Silver and Gold Nanoparticles: Preservation and Improvement of Plasmonic Functionalities // Chem. Rev., 2019. **119**(1): p. 664-699.
62. Mai B. T., Fernandes S., Balakrishnan P. B., Pellegrino T. / Nanosystems Based on Magnetic Nanoparticles and Thermo- or pH-Responsive Polymers: An Update and Future Perspectives // Acc. Chem. Res., 2018. **51**(5): p. 999-1013.

Допоміжна література

1. Н. О. Мchedlov-Петросян. Дифференцирование силы органических кислот в истинных и организованных растворах. Харків: Вид. Харківського національного університету імені В. Н. Каразіна, 2004. 326 с.
2. Н. А. Водолазкая, Н. О. Мchedlov-Петросян. Кислотно-основные равновесия индикаторных красителей в организованных растворах. Харків: Вид. Харківського національного університету імені В. Н. Каразіна, 2014. 460 с.
3. N. O. Mchedlov-Petrosyan. Protolytic equilibrium in lyophilic nano-sized dispersions: Differentiating influence of the pseudophase and salt effects. *Pure Appl. Chem.* 2008. Vol. 80. No. 7. P. 1459-1510. doi: 10.1351/pac200880071459.
4. N. O. Mchedlov-Petrosyan. Fullerenes in Liquid Media: An Unsettling Intrusion into the Solution Chemistry. *Chem. Rev.* 2013. V. 113. No. 7. P. 5149-5193. doi: 10.1021/cr3005026.
5. N. O. Mchedlov-Petrosyan. The Davies equation of state of ionic surfactant adsorbed monolayer and related problems. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects.* 2018. Vol. 537. P. 325–333. <https://doi.org/10.1016/j.colsurfa.2017.10.030>.
6. K. Ariga, H. Ito, J. P. Hill, H. Tsukube Molecular recognition: from solution science to nano/materials technology // *Chem. Soc. Rev.*, 2012, 41, 5800–5835.
7. J.A. Dahl, B.L.S. Maddux, J.E. Hutchison Toward Greener Nanosynthesis // *Chem. Rev.* 2007, 107, 2228-2269.
8. Kushch I., Korenev N., Kamarchuk L., Pospelov A., Kravchenko A., Bajenov L., Kabulov M., Amann A., Kamarchuk G. On the importance of developing a new generation of breath tests for *Helicobacter pylori* detection.- *J. Breath Res.* -2015, 9, 047111, P. 1-14.
9. Golovko S.A., Gudimenko V.A., Klimkin A.S., Pletnev A.M., Vakula V.L., Zaika A.S., Kamarchuk L.V., Kushch I.G., Pospelov A.P., Kravchenko A.V., Kamarchuk G.V. Development of criteria for analysis of point – contact sensor characteristics in complex gas media. *Universal journal of materials science.* -2016, 4 (2), P. 32 -39.
10. Bregadze V.I., Dyachenko O.A., Kazheva O.N., Kravchenko A.V., Sivaev I.B., Starodub V.A. Tetrathiafulvalene-based radical cation salts with transition metal bis(dicarbollide) anions. –*Cryst. Eng. Comm. The Royal Society of Chemistry.* -2015. DOI: 10.1039/c5ce00835b. -14 P.
11. Cheranovskii V.O., Ezerskaya E.V., Klein D.J., Kravchenko A.A., Magnetic properties of model non-carbon nanotubes with macroscopic value of ground state spin // *J. Magn. Magn. Mater.* – 2011. – V.323. – P.1636–1642. (IF - 1,78; SNIP -1.408).
12. Silverstain R.M., Webster F.X., Kiemle D.J. Spectrometric identification of organic compounds. 7th Ed. J.Wiley & Sons, 2005.
13. Claridge T. D. W. High-Resolution NMR Techniques in Organic Chemistry. 2nd Ed. Elsevier Science, Oxford, 2009.
14. Macomber R.S. A complete introduction to modern NMR spectroscopy. J. Wiley & Sons, 1998. - 357 p.
15. Downard K. Mass Spectrometry: A Foundation Course. Royal Society of Chemistry, 2004. – 210 p.
16. Gross J. H. Mass Spectrometry: A Textbook. Springer, 2004. – 518 p.
17. Nyquist R. Interpreting Infrared, Raman and Nuclear Magnetic Resonance Spectra. –Vol. 1. Elsevier, 2001. – 447 p.
18. Stuart B. H. Infrared Spectroscopy: Fundamentals and Applications. J. Wiley & Sons, Ltd, 2004. – 224 p.
19. R. Van Leeuwen. Key concepts in time-dependent density-functional theory // *Int. Journal of Modern Physics B.* – 2001. – v. 15, no. 14. – p. 1969 – 2023.

20. C. F. Guerra, J.-W. Handgraaf, E. J. Baerends, F. M. Bickelhaupt, Voronoi Deformation Density (VDD) Charges: Assessment of the Mulliken, Bader, Hirshfeld, Weinhold, and VDD Methods for Charge Analysis // *J. Comp. Chem.* – 2003. – v. 25, №. 2. – P. 189–210.
21. R. F. W. Bader, *Atoms in Molecules. A quantum theory.* Clarendon Press, Oxford, 1994. 438 p.
22. *The Quantum Theory of Atoms in Molecules. From Solid State to DNA and Drug Design*, Eds. C. Matta and R. J. Boyd. Wiley-VCH Verlag, 2007, 527 p.
23. Becker O. M., MacKerell Jr. A. D., Roux B., Watanabe W. *Computational Biochemistry and Biophysics.* - NY.: Marcel Dekker Inc. 2001. – 512 p.
24. Andreoni, W. and A. Curioni, New advances in chemistry and materials science with CPMD and parallel computing. *Parallel Computing*, 2000. 26(7–8): p. 819-842.
25. Tuckerman M.E., G.J. Martyna / *Understanding Modern Molecular Dynamics: Techniques and Applications* // *J. Phys. Chem. B*, 1999. 104(2): p. 159-178.
26. R. Car R., M. Parrinello / *Unified Approach for Molecular Dynamics and Density-Functional Theory* // *Phys. Rev. Lett.*, 1985. 55(22): p. 2471-2474.
27. Intermolecular interactions, ion solvation, and association in mixtures of 1-n-butyl-3-methylimidazolium hexafluorophosphate and gamma-butyrolactone: insights from Raman spectroscopy / B. A. Marekha, V. A. Koverga, M. Moreau, M. Kiselev, T. Takamuku, O. N. Kalugin, A. Idrissi // *J. Raman Spectrosc.* 2015. – V. 46, No. 3. – P. 339–352
28. Intermolecular interactions in mixtures of 1-n-butyl-3-methylimidazolium acetate and water: Insights from IR, Raman, NMR spectroscopy and quantum chemistry calculations / B. A. Marekha, M. Bria, M. Moreau, I. De Waele, F.-A. Miannay, Ye. Smortsova, T. Takamuku, O. N. Kalugin, M. Kiselev, A. Idrissi // *J. Mol. Liquids.* – 2015. – V. 210, Part B. – P. 227-237.
29. Oleksandr M. Korsun, Oleg N. Kalugin, Andrey S. Vasenko, and Oleg V. Prezhdo/ *Electronic Properties of Carbon Nanotubes Intercalated with Li⁺ and Mg²⁺: Effects of Ion Charge and Ion Solvation* // *J. Phys. Chem. C.* - 2016. - V. 120, No. 46. - P. 26514–26521
30. Sicong Ma, Cheng Shanga, and Zhi-Pan Liua. Heterogeneous catalysis from structure to activity *J. Chem. Phys.* 151, 050901 (2019); <https://doi.org/10.1063/1.5113673>. OPEN ACCESS.
31. Matthew G. Quesne, Fabrizio Silveri, Nora H. de Leeuw and C. Richard A. Catlow. *Advances in Sustainable Catalysis: A Computational Perspective.* *Front. Chem.*, 2019, V.7, 182. <https://doi.org/10.3389/fchem.2019.00182>. OPEN ACCESS.

10. Посилання на інформаційні ресурси в Інтернеті, відео-лекції, інше методичне забезпечення

1. Файл-сервер хімічного факультету ХНУ імені В.Н. Каразіна: <http://www-chemistry.univer.kharkov.ua/uk/node/424>
2. Application of Spectroscopic Methods in Molecular Structure Determination : відкритий інтернет-курс. <http://nptel.ac.in/courses/104106075/>
3. Infrared spectroscopy : відкритий інтернет-курс. <https://www.khanacademy.org/science/organic-chemistry/spectroscopy-jay/infrared-spectroscopy-theory/v/introduction-to-infrared-spectroscopy>
4. GROMACS: <http://www.gromacs.org/>
5. DL_POLY: http://www.ccp5.ac.uk/DL_POLY_CLASSIC/
6. AMBER: <http://ambermd.org/>
7. LAMMPS: <http://lammps.sandia.gov/>
8. NAMD: <http://www.ks.uiuc.edu/Research/namd/>
9. CHARMM: <http://www.charmm.org/>

10. CPMD: <http://www.cpmc.org/>
11. CP2K: <http://www.cp2k.org/>
12. AIMALL: <http://aim.tkgristmill.com/>
13. VMD: <http://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/>
14. Basic Steps in Magnetic Resonance <https://www.edx.org/course/basic-steps-magnetic-resonance-epflx-nmr101x-0>
15. Посібник з розрахунку невизначеності результатів вимірювань
http://www.bipm.org/utils/common/documents/jcgm/JCGM_100_2008_E.pdf