

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

Фізико-органічна хімія і функціональні матеріали

(назва навчальної дисципліни)

Спеціальність 102 Хімія

Хімічний факультет

2020 / 2021 навчальний рік

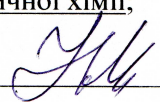
Програму рекомендовано до затвердження Вченою радою хімічного факультету
"27" серпня 2020 року, протокол № 8

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
Дорошенко А. О., д.х.н., проф., завідувач кафедри органічної 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., д.х.н., професор кафедри неорганічної хімії
Колос Н.М., д.х.н., проф., професор кафедри органічної хімії
Колосов М.О., к.х.н., доц., доцент кафедри органічної 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
Решетняк О. О., к.х.н., доц., доцент кафедри хімічної метрології
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
Чергинєць 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.)

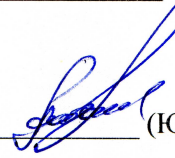
Програму схвалено на засіданні кафедри неорганічної хімії

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.)

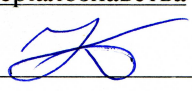
Програму схвалено на засіданні кафедри органічної хімії;

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.)

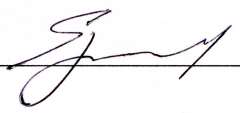
Програму схвалено на засіданні кафедри прикладної хімії;

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 № 1

Голова методичної комісії хімічного факультету  (Сфімов П.В.)

ВСТУП

Програма навчальної дисципліни “Фізико-органічна хімія і функціональні матеріали” 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 експериментальних та теоретичних принципів фізико-органічної хімії, їх тонких взаємозв'язків, навчити виявляти відповідність між структурою речовини та її фізико-хімічними властивостями, висвітлити значущість цих принципів для хімічного матеріалознавства, а саме створення, дослідження та втілення в практику різноманітних функціональних матеріалів, сформувати навички постановки та вирішення досить масштабних фундаментальних та прикладних задач в цій вагомій галузі сучасної хімії.

1.2. Основні завдання вивчення дисципліни

сформувати чіткі уявлення щодо

- закономірностей стереохімічної будови молекул органічних сполук
- основних прийомів визначення конфігурації хіральних центрів
- фізичних основ та принципів формування тонкої структури спектрів ЯМР, двовимірних гомо- та гетероядерних спектрів, їх можливості для визначення стереохімічної будови органічних молекул
- фізичних основ та принципів двохчастотної ЯМР-спектроскопії
- застосування ефекту Оверхаузера для встановлення геометрії органічних сполук у трьохвимірному просторі
- 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 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.
- основних класів функціональних матеріалів (неорганічних, органічних, гібридних) та фундаментальних основ технологій їх створення;
- супрамолекулярних, нанорозмірних і низькорозмірних функціональних матеріалів та галузей їх застосування;

- 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;

навчити аспірантів

- застосуванню типових приладів для вимірювання спектрів ядерного магнітного резонансу.
- основам первинної обробки експериментальних даних магнітно-резонансних спектрометрів, що налаштовані на ядра ізотопів ^1H , ^{13}C
- виявляти відповідність між структурою речовини та її фізико-хімічними властивостями;
- грамотно планувати експеримент, обробляти та презентувати експериментальні дані;
- робити адекватний вибір інструментального методу (методів) аналізу для вирішення поставленого завдання;
- використовувати існуючі програмні комплекси, які дозволяють розрахувати шукані молекулярні характеристики.

1.3. Кількість кредитів – 18

1.4. Загальна кількість годин – 540

1.5. Характеристика навчальної дисципліни			
За вибором			
Денна форма навчання		Заочна (дистанційна) форма навчання	
Рік підготовки			
2-й		2-й	
Семестри			
1-й	2-й	1-й	2-й
Лекції			
12 год.	13 год.	6 год.	6 год.
Практичні, семінарські заняття			
39.5 год.	8.5 год.	20 год.	4 год.
Лабораторні заняття			
14.5 год.	20.5 год.	7 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:

- загальні основи стереохімії органічних сполук,

- ідентифікація та встановлення будови органічних речовин за допомогою сучасних магнітно-резонансних методів дослідження
- 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:

- використовувати комплекс сучасних магнітно-резонансних методів дослідження для визначення особливостей стереохімічної будови органічних молекул
- досліджувати внутрішньомолекулярні взаємодії в молекулах органічних речовин
- проводити первинну обробку спектральних даних, що отримані на серійних спектрометрах
- проводити ідентифікацію та встановлення особливостей просторової будови органічних сполук на основі спектрів їх ЯМР
- використовувати комплекс сучасних фізико-хімічних методів дослідження для 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 основі їх взаємодії 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 в 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. Стереохімічні особливості органічних реакцій

Тема 1. Хіральність молекул органічних сполук.

Точкові групи симетрії. Симетрійне визначення хіральності. Правила класифікації молекул за симетрією. Типи хіральності. Абсолютна і відносна конфігурації. Проекції Фішера. Система Кана – Інгольда – Прелога. Сполуки з декількома хіральними центрами. Енантіомерні конформації. Методи встановлення конфігурації. Встановлення абсолютної конфігурації: рентгеноструктурний аналіз, теоретичний розрахунок оптичного обертання. Встановлення відносної конфігурації: хімічна кореляція, застосування фізичних методів.

Тема 2. Асиметричний синтез і каталіз.

Методи розділення енантіомерів: розділення через діастереомери, хроматографічне, механічне розділення, ферментативне розщеплення. Визначення оптичної чистоти. Енантіотропні та діастереотропні атоми, групи і поверхні. Синтези на основі карбонільних сполук: асиметричне відновлення карбонільної групи, асиметричне алкілювання карбонільної групи. Приєднання до подвійних зв'язків $C=C$. Асиметричний синтез амінокислот. Синтези в хіральному середовищі. «Абсолютний» асиметричний синтез. Асиметрична індукція аксіальної і планарної хіральності. Асиметричний каталіз.

Розділ 2. 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 нітрогенвмісних органічних сполук.

Розділ 3. 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 спін-спінове розщеплення в спектрах ЯМР. Відносний хімічний зсув. Спін-спінова взаємодія ядер, її природа, число компонент мультиплетів, розподіл інтенсивності, правило сум, константа спін-спінової взаємодії. Аналіз спектрів ЯМР спінових систем типу AB, AX, A₂B, AA'B, ABX, AMX, AA'BB', AA'XX'. Вплив швидкої релаксації ядер на мультиплетну структуру спектрів ЯМР. Хімічний обмін і динамічний ЯМР. Ядерний ефект Оверхаузера. Спектроскопія на ядрах ¹³C, ¹⁹F, ³¹P. Програми для візуалізації та обробки спектрів ЯМР: MESTREC, ADVASP analyzer, NUTS32.

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

Кореляційна двовірна спектроскопія ЯМР (COSY). Принципи одержання двовірних 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 двовірних кореляційних експериментів при визначенні структури нових органічних сполук і функціональних матеріалів. Розділення хімічного зсуву і констант

спін-спінової взаємодії: двомірна спектроскопія J-здатності. Трьохмірна 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.

Тандемна 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, сонолюмінісцентної 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 4. 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, Льовдінім 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. Неемпіричне молекулярно-динамічне моделювання конденсованих систем

Порівняльна характеристика методів молекулярного моделювання багатоатомних систем. *Ab initio* молекулярно-динамічне (МД) моделювання. Використання теорії функціоналу (електронної) густини (DFT) у неемпіричному 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. Неемпіричне молекулярно-динамічне моделювання рідкої води

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

Розділ 5. 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.

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. Стереохімічні особливості органічних реакцій												
Разом за розділом 1	120	2	18	4	-	96	120	1	9	2	-	107
Розділ 2. Фотоніка органічних сполук та функціональних матеріалів на їх основі												
Разом за розділом 2	52.5	6	-	4.5	-	42	52.5	3	-	2	-	53
Розділ 3. Фізичні методи досліджень у хімічному матеріалознавстві												
Разом за розділом 3	157.5	4	21.5	6	-	126	157.5	2	10	3	-	137
Розділ 4. Комп’ютерний дизайн молекул та процесів												
Разом за розділом 4	105	8	-	13	-	84	105	4	-	6	-	95
Розділ 5. Сучасні функціональні матеріали для прикладної хімії												
Разом за розділом 5	105	5	8.5	7.5	-	84	105	2	5	4	-	95
Усього годин	540	25	48	35	-	432	540	12	24	17	-	490

4. Теми семінарських (практичних, лабораторних) занять

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
1	Види хіральності. Терміни. Способи зображення хіральних об'єктів. Діастереомерія. Центральна хіральність. Типи номенклатур. Проекції Фішера. Хіральність атомів, що відрізняються від карбону. Поняття про стереоселективний синтез.	4
2	Фізичні основи ЯМР. Поняття. Вид спектру. Розчинники. Програми прогнозування спектрів ЯМР. Електронний вплив замісників (I, M-ефекти) у насичених, ненасичених та ароматичних системах. Хімічний зсув. Константа спін-спінової взаємодії. Залежність Карплуса. Типи спінових систем.	4
3	Хімічна та магнітна еквівалентність. Енантіотопні та диастереотопні групи. Поняття про спеціальні методи (дейтерообмін, лантаноїдні зсувні реагенти тощо), методики подвійного резонансу, кореляційні методи. Поведінка у спектрах ЯМР насичених та частково гідрованих циклічних сполук.	4
4	Загальні поняття про перетворення біля хірального центра (енолізація, проміжний стан, рацемізація через утворення катіонів, інверсія тощо). Стабільність проміжних частинок як ключовий фактор впливу на тип механізму. Реакції аліфатичного нуклеофільного заміщення та спостереження за їхнім стереохімічним результатом методом ЯМР. Тетраедричний механізм та реакції аліфатичного електрофільного заміщення. Стереохімічні особливості та ЯМР-контроль.	4
5	Реакції приєднання (у тому числі – гідрування) та оцінка їхнього стереохімічного результату методом ЯМР. Особливості реакцій циклічних сполук. Приклади хіральних природних об'єктів та проблема встановлення відносної та абсолютної конфігурації. Синтез похідних азолоазинів та проблеми встановлення відносної конфігурації діастереомерних пар.	4
6	Відновлення гетероциклічної сполуки комплексними гідридами з отриманням продуктів різного ступеню гідрування. (лабораторна робота)	4
7	Спектри поглинання і чотири види спектрів флуоресценції органічних сполук (лабораторна робота)	1.5
8	Квантовий вихід і час згасання флуоресценції (лабораторна робота)	1.5
9	Фотохімічна цис-транс ізомеризація ненасичених органічних сполук (лабораторна робота)	1.5
10	Сучасні фізичні методи аналізу функціональних матеріалів	5.5
11	Поглиблення уявлень про мас-спектрометрію та ІЧ-спектроскопію	5
12	Розрахунок невизначеності результатів хімічного аналізу. Частина 1 (семінар).	5
13	Розрахунок невизначеності результатів хімічного аналізу. Частина 2 (семінар).	6
14	Експериментальна оцінка валідаційних характеристик методики атомно-абсорбційного визначення металів (лабораторна робота).	6
15	Параметри електронного розподілу в основному стані (лабораторна робота)	3

16	Електронні збудження у молекулах (лабораторна робота)	3
17	Молекулярно-динамічне моделювання наночастинок золота та срібла (лабораторна робота)	3.5
18	Неемпіричне молекулярно-динамічне моделювання рідкої води (лабораторна робота)	3.5
19	Функціональні матеріали для хімічних сенсорів та електроніки (семінар).	4.5
20	Методи дослідження просторової будови комплексів (семінар).	2
21	Властивості координаційних сполук у наближенні ТКП. Магнітні властивості координаційних сполук (семінар).	2
22	Склоутворення. Технологічні особливості варки скла	2
23	Твердофазний синтез функціональної кераміки	2
24	Методи вирощування монокристалів різного призначення	3.5
	Разом	85

5. Завдання для самостійної роботи

№ з/п	Види, зміст самостійної роботи	Кількість годин
1	Методи встановлення конфігурації молекул органічних сполук. Абсолютна конфігурація: рентгеноструктурний аналіз, теоретичний розрахунок оптичного обертання. Відносна конфігурація: хімічна кореляція, застосування фізичних методів.	15
2	Методи розділення енантіомерів: розділення через діастереомери, хроматографічне, механічне розділення, ферментативне розщеплення. Визначення оптичної чистоти.	15
3	Асиметричний синтез амінокислот. Синтези в хіральному середовищі. «Абсолютний» асиметричний синтез. Асиметрична індукція аксіальної і планарної хіральності. Асиметричний каталіз.	16
4	Аналіз спектрів ЯМР спінових систем типу АВ, АХ, А ₂ В, АА'В, АВХ, АМХ, АА'ВВ', АА'ХХ'. Вплив швидкої релаксації ядер на мультиплетну структуру спектрів ЯМР. Хімічний обмін і динамічний ЯМР.	16
5	Кореляційна двовірна спектроскопія ЯМР (COSY). Принципи одержання двовірних спектрів. Інтерпретація структури мультиплетів в спектрах COSY. Спектроскопія тотальних кореляцій (TOCSY). Методи, засновані на ядерному ефекті Оверхаузера: NOESY, ROESY. Метод INADEQUATE.	16
6	Гетероядерна кореляційна спектроскопія: HMQC, HSQC, HMBC, методи HETCOR і COLOC. Сучасна стратегія використання двовірних кореляційних експериментів при визначенні структури нових органічних сполук. Розділення хімічного зсуву і констант спин-спінової взаємодії: двовірна J-RES спектроскопія.	16
7	Електронна абсорбційна спектроскопія органічних сполук	16
8	Флуоресцентна спектроскопія органічних сполук	14
9	Фотохімічні перетворення органічних сполук	14
10	Електронна мікроскопія (ТЕМ та СЕМ) в аналізі функціональних матеріалів	14
11	Сучасні аспекти застосування ІЧ спектроскопії	14
12	Резонансні методи в аналізі функціональних матеріалів	14

13	Методи атомної спектроскопії. Атомно-флуоресцентна спектроскопія. Поєднання методу генерації гідридів з методами атомної спектроскопії.	14
14	Методи електронної спектроскопії. Скануюча електронна мікроскопія. Рентгенівський мікроаналіз. Мікродифракція.	14
15	Раманівська спектроскопія	14
16	Спектроскопія порушеного повного внутрішнього відбиття.	14
17	Твердофазна спектрофотометрія та спектроскопія дифузного відбиття — методи дослідження оптично прозорих і непрозорих сорбентів з іммобілізованими реагентами	14
18	Сонолюмінісцентна спектроскопія: визначення поглиненої акустичної енергії в технологічних розчинах. Використання ефекту гасіння сонолюмінісценції у хімічному аналізі	14
19	Квантова теорія атомів в молекулі	8
20	Електронно-збуджені стани в теорії функціоналу густини	8
21	Теоретичні методи дослідження наночастинок благородних металів	8
22	Молекулярно-динамічне моделювання наночастинок золота та срібла	8
23	Неемпіричне молекулярно-динамічне моделювання конденсованих систем	8
24	Параметри електронного розподілу в основному стані	11
25	Електронні збудження у молекулах	11
26	Молекулярно-динамічне моделювання наночастинок золота та срібла	11
27	Неемпіричне молекулярно-динамічне моделювання рідкої води	11
28	Галузі застосування супрамолекулярних функціональних матеріалів.	10.5
29	Аналітичний огляд перспективних напрямків застосування квантових точок та наноманетиків.	10.5
30	Функціональні матеріали для хімічних сенсорів та електроніки	10.5
31	Супрамолекулярні координаційні сполуки. Сполуки з нульовим і негативним ступенями окиснення ЦА. Координаційні сполуки на поверхні твердого тіла. Фізичні властивості комплексів.	10.5
32	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
33	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
34	Основні механізми росту кристалів вплив пересичення розчину на механізм кристалізації. Методи одержання (виросування з розчину, з розплаву) і їх особливості, практичне застосування. Вплив домішок на властивості кристалів, методи передростової обробки.	14
	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 5			Розділ 4			Разом		
T1	T2	T1	T2	T3	T6	T7	T8	T9		
9	9	5	5	6	6	6	8	6	60	40
										100

Другий семестр

Поточний контроль, самостійна робота, індивідуальні завдання								Екзамен	Сума	
Розділ 2			Розділ 3							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

Рекомендована література

Основна література

1. Потапов В.М. Стереохімія. - М.: Хімія, 1988.
2. Ногради М. Стереохімія. - М.: Мир, 1984.
3. Ковтуненко В.О. Загальна стереохімія. – Київ: Кондор, 2009.
4. Браун Д., Флойд А., Сейнзбери М. Спектроскопія органічних речовин. – М.: Мир, 1992.
5. Ионин Б.И., Ершов Б.А. ЯМР-спектроскопия в органической химии. - Л.: Химия, 1983.
6. Агрономов А. Е. Избранные главы органической химии. - Л.: Химия, 1990.

7. Марч Д. Органическая химия: реакции, механизмы и структура. Тт. 1-4.
8. Титце Л., Айхер Т. Препаративная органическая химия. - М.: Мир, 2004.
9. Реутов О.А., Курц А.Л., Бутин К.П. Органическая химия. В 4 частях. – М., 1999.
10. Шветлик К., Беккер Г. Органикум, в 2-х тт. – М., Мир, 2008.
11. Функциональные материалы для науки и техники (под. ред. В.П. Семиноженко) / Харьков: Институт монокристаллов, 2001 г., 605 с.
12. Прогресивні матеріали і технології (под. ред. І.К. Походні) / в 2 т. Київ: Академперіодика, 2003
13. Супрамолекулярная химия: Концепции и перспективы / Ж.-М. Лен, пер. с англ. – Новосибирск: Наука. Сиб. предприятие РАН, 1998. – 334 с.
14. Супрамолекулярная химия / Д.В. Сид, Д.Л. Этвуд, пер. с англ. В 2 т., М.: ИКЦ «Академкнига», 2007
15. Основы современного электрохимического анализа / Г.К.Будников, В.Н.Майстренко, М.Р.Вяселев. -М.: Мир, 2003. –592с.
16. 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.
17. Эггинс Б. Химические и биологические сенсоры. -М: Техносфера, 2005. –336с.
18. Стародуб В.А., Стародуб Т.Н. Анион - радикальные соли и комплексы с переносом заряда на основе тетрацианохинодиметана и других сильных π - электронных акцепторов. // Усп. химии. – 2014. – Т. 83. – № 5. – С. 391-438.
19. Дьячков П.Н. Углеродные нанотрубки: строение, свойства, применения – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2006. – 293 с.
20. Раков Э.Г. Нанотрубки и фуллерены: Учебн. пособие. – М.: Университетская книга, Логос. 2006. – 376 с.
21. С.О. Алексеев. Хімія координаційних сполук. К., Київський університет, 2010
22. Сverdlova O.V. Электронные спектры в органической химии. Л.: Наука, 1986. (Сайдов Г.В., Сverdlova O.V. Методы молекулярной спектроскопии.- Санкт-Петербург: Професионал, 2008.- 338 с.)
23. Берштейн И.Я., Каминский Ю.Л. Спектрофотометрический анализ в органической химии. Л.: Наука, 1986.
24. Lakowicz J.R. Principles of Fluorescence Spectroscopy. Third Edition. N.Y.: Springer Science+Business Media, LLC, 2006.
25. Барлтроп Дж., Койл Дж. Возбужденные состояния в органической химии. М.: Мир, 1978.
26. 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.
27. Дероум Э. Современные методы ЯМР для химических исследований. М.: Мир, 1992. - 403 с.
28. Гюнтер Х. Введение в курс спектроскопии ЯМР. М.: Мир, 1984. - 478 с.
29. Эрнст Р., Боденхаузен Дж., Вокаун А. ЯМР в одном и двух измерениях. М.: Мир, 1990. - 711 с.
30. Пентин Ю. А., Вилков Л. В. Физические методы исследования в химии – М.: Мир. – 2006. 690 с.
31. Лебедев А. Т. Масс-спектрометрия в органической химии. М.: Бином, 2003. 496с.
32. Gross J. Mass Spectrometry: A Textbook. 2nd Ed. Springer, 2011. -779 p.
33. 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.
34. 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.

35. Holčapek M., Jirásko R., Lída 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.
36. Иванов В. В., Слета Л. А. Квантовая химия. Харьков: “Фолио”, 2007, 443 с.
37. Jensen F. Introduction to Computational Chemistry. Wiley, 2006, 624 p.
38. Степанов Н. Ф. Квантовая механика и квантовая химия. Изд-во Московского университета: М., 2001. 519 с.
39. Tsuneda T. Density Functional Theory in Quantum Chemistry. Springer.– Japan. – 2014. – 200 p.
40. Х. Окабе, Фотохимия малых молекул. М. Мир. 1981, 500 с.
41. 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.
42. Волков, С. В., Ковальчук, Є. П., Огненко, В. М., Решетняк, О. В. Нанохімія, Наносистеми, Наноматеріали. Наукова думка: Київ, 2008; 426 с.
43. Mingos, D. M. P. Gold Clusters, Colloids and Nanoparticles I, Springer International Publishing, 2014, Vol. 161, – 282 p.
44. Пичугина, Д. А., Кузьменко, Н. Е., Шестаков, А. Ф. Индивидуальные кластеры золота, стабилизированные лигандами: Строение, синтез и применение. Успехи химии 2015, 84, 1114-1144.
45. 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
46. 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.
47. О.М. Калугін, Я.В. Колесник. Молекулярно-динамічне моделювання конденсованих невідпорядкованих систем. Методичні вказівки з курсу.– Х.: ХНУ імені В. Н. Каразіна, 2006.– 95 с.
48. J. M. Haile. Molecular dynamics simulation. Elementary methods. John Wiley & Sons Inc., New York, 1992, 489 p.
49. 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.
50. Васильев В.П. Аналитическая химия. В 2 кн. – 6-е изд., стереотип. Кн. 2: Физико-химические методы анализа. – М.: Дрофа, 2007. – 383 с
51. 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.
52. 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.
53. Отто М. Современные методы аналитической химии. В 2 т. Пер. с нем. – М.: «Техносфера», 2004. Т.1. – 328 с. Т. 2. – 281 с.
54. 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.
55. ГОСТ Р 52361-2005. Контроль объекта аналитический. Термины и определения. М.: ИПК Издательство стандартов, 2005.
56. ГОСТ ИСО 11843-4-2005. Межгосударственный стандарт. Статистические методы. Способность обнаружения. М.: Стандартинформ, 2006.
57. ДСТУ ГОСТ ИСО 5725-1:2005.Точність (правильність і прецизійність) методів та результатів вимірювання. К.: Держстандарт України, 2006.

58. 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.
59. 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.
60. Горилецкий В.И., Гринев Б.В., Заславский Б.Г., Смирнов Н.Н., Суздаль В.С. Рост кристаллов.-Харьков: Акта, 2002.-536 с.
61. Глобус М.Е., Гринев Б.В. Неорганические сцинтилляторы. Новые и традиционные материалы.- Харьков: Акта.-2000.-408 с.
62. Окадзаки К. Технология керамических диэлектриков. М.: Изд-во Энергия, 1976.-327 с.
63. Аппен А.А. Химия стекла.-Л.: Химия, 1974.-352 с.
64. Бланк А.Б. Аналитическая химия в исследовании и производстве неорганических функциональных материалов.-Харьков: Институт монокристаллов, 2005.-352 с.
65. Handbook of dielectric, piezoelectric and ferroelectric materials. Synthesis, properties and applications, Ed. Z.-G. Ye.-Cambridge: Woodhead Publishing Ltd, 2008.-1092 p.
66. 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.
67. 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. 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.
2. J.A. Dahl, B.L.S. Maddux, J.E. Hutchison Toward Greener Nanosynthesis // *Chem. Rev.* 2007, 107, 2228-2269.
3. 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.
4. 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.
5. 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.
6. 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).
7. Silverstain R.M., Webster F.X., Kiemle D.J. Spectrometric identification of organic compounds. 7th Ed. J.Wiley & Sons, 2005.
8. Claridge T. D. W. High-Resolution NMR Techniques in Organic Chemistry. 2nd Ed. Elsevier Science, Oxford, 2009.
9. Macomber R.S. A complete introduction to modern NMR spectroscopy. J. Wiley & Sons, 1998. - 357 p.
10. Downard K. Mass Spectrometry: A Foundation Course. Royal Society of Chemistry, 2004. – 210 p.
11. Gross J. H. Mass Spectrometry: A Textbook. Springer, 2004. – 518 p.

12. Nyquist R. Interpreting Infrared, Raman and Nuclear Magnetic Resonance Spectra. –Vol. 1. Elsevier, 2001. – 447 p.
13. Stuart B. H. Infrared Spectroscopy: Fundamentals and Applications. J. Wiley & Sons, Ltd, 2004. – 224 p.
14. 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.
15. 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.
16. R. F. W. Bader, Atoms in Molecules. A quantum theory. Clarendon Press, Oxford, 1994. 438 p.
17. 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.
18. 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.
19. Tuckerman M.E., G.J. Martyna / Understanding Modern Molecular Dynamics: Techniques and Applications // J. Phys. Chem. B, 1999. **104**(2): p. 159-178.
20. R. Car R., M. Parrinello / Unified Approach for Molecular Dynamics and Density-Functional Theory // Phys. Rev. Lett., 1985. **55**(22): p. 2471-2474.
21. Stamplecoskie K. Silver Nanoparticles: From Bulk Material to Colloidal Nanoparticles. Silver Nanoparticle Applications: The Fabrication and Design of Medical and Biosensing Devices. Ed. E.I. Alarcon, M. Griffith, and K.I. Udekwu. Springer International Publishing: Cham., 2015. – 165 p.
22. 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
23. 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.
24. Oleksandr M. Korsun, Oleg N. Kalugin, Andrey S. Vasenko, and Oleg V. Prezhdo/ Electronic Properties of Carbon Nanotubes Intercalated with Li^+ and Mg^{2+} : Effects of Ion Charge and Ion Solvation // J. Phys. Chem. C.- 2016. - V. 120, No. 46. - P. 26514–26521

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/utis/common/documents/jcgm/JCGM_100_2008_E.pdf