

Міністерство освіти і науки України

Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна

Кафедра прикладної хімії

“ЗАТВЕРДЖУЮ”

Декан хімічного факультету



Калугін О.М.

“ 31 ” серпня 2023 р.

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

**Фундаментальні основи органічних функціональних матеріалів**

(назва навчальної дисципліни)

рівень вищої освіти \_\_\_\_\_ магістр \_\_\_\_\_  
/  
галузь знань \_\_\_\_\_ 10 Природничі науки \_\_\_\_\_  
(шифр і назва)  
спеціальність \_\_\_\_\_ 102 Хімія \_\_\_\_\_  
(шифр і назва)  
освітня програма \_\_\_\_\_ Освітньо-професійна програма “Хімія” \_\_\_\_\_  
(шифр і назва)  
спеціалізація \_\_\_\_\_  
(шифр і назва)  
вид дисципліни \_\_\_\_\_ за вибором \_\_\_\_\_  
(обов’язкова / за вибором)  
факультет \_\_\_\_\_ хімічний \_\_\_\_\_

2023 / 2024 навчальний рік

Програму рекомендовано до затвердження вченою радою факультету (інституту, центру)

“ 30 ” серпня 2023 року, протокол № 8

РОЗРОБНИКИ ПРОГРАМИ: (вказати авторів, їхні наукові ступені, вчені звання та посади)

Чебанов Валентин Анатолійович,

д.х.н., проф., чл-кор. НАН України, професор кафедри прикладної хімії

Комихов Сергій Олександрович,

к.х.н., доцент кафедри прикладної хімії

Програму схвалено на засіданні кафедри прикладної хімії

Протокол від “ 29 ” серпня 2023 року № 1

Завідувач кафедри прикладної хімії



(підпис)

Валентин ЧЕБАНОВ

(прізвище та ініціали)

Програму погоджено з гарантом освітньо-наукової програми “Хімія”

Гарант освітньо-наукової програми “Хімія”



(підпис)

Микола МЧЕДЛОВ-ПЕТРОСЯН

(прізвище та ініціали)

Програму погоджено з гарантом освітньо-професійної програми “Хімія”

Гарант освітньо-професійної програми “Хімія”



(підпис)

Андрій ДОРОШЕНКО

(прізвище та ініціали)

Програму погоджено методичною комісією

хімічного факультету

назва факультету, для здобувачів вищої освіти якого викладається навчальна дисципліна

Протокол від “ 29 ” серпня 2023 року № 1

Голова методичної комісії хімічного факультету



(підпис)

Павло ЄФІМОВ

(прізвище та ініціали)

## ВСТУП

Програма навчальної дисципліни «Фундаментальні основи функціональних матеріалів» складена відповідно до освітньо-професійної (освітньо-наукової) програми підготовки магістра, спеціаліста

(назва рівня вищої освіти, освітньо-кваліфікаційного рівня)  
спеціальності (напрямку) 102 – «Хімія»

### 1. Опис навчальної дисципліни

#### 1.1. Мета викладання навчальної дисципліни.

Метою викладання навчальної дисципліни є: поглиблення знань теоретичних основ органічної хімії і їх практичного застосування при інтерпретації експериментальних даних; формування уявлень про органічні функціональні матеріали, застосування теоретичних основ органічної хімії у розробці нових матеріалів.

#### 1.2. Основні завдання вивчення дисципліни.

Завдання: дати студентам уявлення про електронну будову органічних сполук, розуміння концепцій стереохімії, реакційної здатності та механізмів реакцій, про принципи функціонування органічних напівпровідників, рідких кристалів та інших функціональних матеріалів.

#### 1.3. Кількість кредитів – 5.

#### 1.4. Загальна кількість годин – 150.

#### 1.5. Характеристика навчальної дисципліни

Нормативна / за вибором	
Термін навчання – 1 рік 4 місяці	Термін навчання – 1 рік 9 місяців
Рік підготовки	
1-й	1-й
Семестр	
1-й	1-й
Лекції	
16 год.	16 год.
Практичні, семінарські заняття	
-- год.	- год.
Лабораторні заняття	
32- год.	32 год.
Самостійна робота	
102 год.	102 год.
Загальний обсяг	
150 год.	150 год.

#### 1.6. Програмні компетентності та результати навчання.

##### Загальні компетентності:

1. Знання та розуміння предметної області та розуміння професійної діяльності.
2. Здатність вчитися і оволодівати сучасними знаннями.

3. Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу.
4. Здатність застосовувати знання у практичних ситуаціях.
5. Здатність до адаптації та дії в новій ситуації.
6. Здатність генерувати нові ідеї (креативність).
7. Здатність використовувати інформаційні та комунікаційні технології.
8. Здатність оцінювати та забезпечувати якість виконуваних робіт.
9. Здатність спілкуватися з представниками інших професійних груп різного рівня (з експертами з інших галузей знань/видів економічної діяльності).
10. Здатність спілкуватися англійською та (за можливості) іншою іноземною мовою, як усно, так і письмово.
11. Здатність діяти на основі етичних міркувань (мотивів).
12. Здатність працювати автономно.
13. Здатність до активного збереження довкілля.
14. Здатність до пошуку, критичного аналізу та обробки інформації з різних джерел.

#### **Фахові компетентності спеціальності:**

1. Здатність використовувати закони, теорії та концепції хімії у поєднанні із відповідними математичними інструментами для опису природних явищ.
2. Здатність будувати адекватні моделі хімічних явищ, досліджувати їх для отримання нових висновків та поглиблення розуміння природи, в тому числі з використанням методів молекулярного, математичного і комп'ютерного моделювання.
3. Здатність організовувати, планувати та реалізовувати хімічний експеримент.
4. Здатність інтерпретувати, об'єктивно оцінювати і презентувати результати свого дослідження.
5. Здатність застосовувати методи комп'ютерного моделювання для вирішення наукових, хіміко-технологічних проблем та проблем хімічного матеріалознавства.
6. Здатність здобувати нові знання в галузі хімії та інтегрувати їх із уже наявними.
7. Здатність дотримуватися етичних стандартів досліджень і професійної діяльності в галузі хімії (академічна доброчесність, ризики для людей і довкілля тощо).
17. Здатність проводити хімічний аналіз і контролю якість об'єктів довкілля.

#### **Програмні результати навчання:**

- P1. Знати та розуміти наукові концепції та сучасні теорії хімії, а також фундаментальні основи суміжних наук.
- P2. Глибоко розуміти основні факти, концепції, принципи і теорії, щостосуються предметної області, опанованої у ході магістерської програми, використовувати їх для розв'язання складних задач і проблем, а також проведення досліджень з відповідного напрямку хімії.
- P3. Застосовувати отримані знання і розуміння для вирішення нових якісних та кількісних задач хімії.
- P4. Синтезувати хімічні сполуки із заданими властивостями, аналізувати їх і оцінювати відповідність заданим вимогам.
- P5. Володіти методами комп'ютерного моделювання структури, параметрів і динаміки хімічних систем.
- P6. Знати методологію та організації наукового дослідження.
- P7. Вільно спілкуватися англійською та (за можливості) іншою іноземною мовою з професійних питань, усно і письмово презентувати результати досліджень з хімії іноземною мовою, брати участь в обговоренні проблем хімії.
- P8. Вміти ясно і однозначно донести результати власного дослідження до фахової аудиторії та/або нефаківців.
- P9. Збирати, оцінювати та аналізувати дані, необхідні для розв'язання складних задач хімії, використовуючи відповідні методи та інструменти роботи з даними.

P10. Планувати, організувати та здійснювати експериментальні дослідження з хімії з використанням сучасного обладнання, грамотно обробляти їх результати та робити обґрунтовані висновки.

P13. Аналізувати наукові проблеми та пропонувати їх вирішення на абстрактному рівні шляхом декомпозиції їх на складові, які можна дослідити окремо.

P14. Інтерпретувати експериментально отримані дані та співвідносити їх з відповідними теоріями в хімії.

## **2. Тематичний план навчальної дисципліни**

### **Розділ 1. Електронна будова органічних сполук**

*Тема 1. Вступ. Міжмолекулярна взаємодія і міжмолекулярна самоорганізація.*

Октетна теорія Льюїса, типи зв'язків: іонний, ковалентний, координаційний, дативний. Двох-, три- та багатоцентрові зв'язки. Залежність властивостей органічних сполук від характеру зв'язку.

Види міжмолекулярної взаємодії. Гідрогенний зв'язок. Комплекси з переносом заряду. Гідрофобна взаємодія.  $\pi$ -стекинг.

Приклади міжмолекулярної самоорганізації в природі та при створенні нових матеріалів.

*Тема 2. Кисотно-основна взаємодія. Молекулярні пристрої.*

Кисотно-основні властивості органічних сполук. визначання кислот і основ по Бренстеду та Льюїсу. Кисотно-основна рівновага.

Катенани та ротаксани як приклади механічно заблокованих молекулярних архітектур.

Уявлення про молекулярну машину, хімічні реакції, придатні для їх функціонування.

Молекулярні пристрої у природі. Приклади штучних молекулярних пристроїв.

*Тема 3. Фізична природа хімічного зв'язку. Органічні барвники і люмінофори.*

Квантовомеханічні уявлення про хімічний зв'язок. Поняття про атомні та молекулярні орбіталі, квантовохімічні методи розрахунків. Методи МО, ВС.

Уявлення про органічні барвники (природні і синтетичні).

Поглинання світла. Спектральні діапазони. Електронні спектри – природа, основні характеристики та їх залежність від будови сполуки. Електронні рівні молекул, Типи електронних переходів.

Органічні люмінофори. Спектри люмінесценції їх основні властивості. Квантовий вихід люмінесценції.

Матеріали і пристрої на основі органічних люмінофорів.

*Тема 4. Електронні ефекти в органічній хімії. Органічні напівпровідники.*

Індуктивний і резонансний ефекти. Ефект поля. Ароматичність і антиароматичність.  $\pi$ -Електронні властивості органічних сполук.  $\pi$ -надлишковість і  $\pi$ -дефіцитність.

Органічні напівпровідники, їх основні типи. OLED-пристрої.

Органічна фотовольтаїка.

### **Розділ 2. Просторова будова органічних сполук**

*Тема 5. Статична стереохімія. Рідкокристалічні матеріали.*

Поняття про хіральність та хіральний центр. Типи хіральності. Еквівалентні, енантіотопні та діастереотопні функціональні групи. Енантіомери, діастереомери.

Рідкокристалічні речовини та матеріали на їх основі. Перехід Фредерікса та LCD-дісплей.

*Тема 6. Уявлення про динамічну стереохімію.*

Конформація і конфігурація. Фактори, які визначають енергетичну вигідність конформерів. Конформації ациклічних та циклічних молекул.

### **Розділ 3. Механізми хімічних перетворень у органічних матеріалах.**

*Тема 7. Загальні принципи реакційної здатності. Реагуючі частинки. магнітні властивості органічних сполук.*

Класифікація реакцій, ентальпія та ентропія реакцій. Постулат Хемонда. Кінетичний та термодинамічний контроль реакцій.

Основні типи проміжних частинок. Гетеролітична дисоціація зв'язків. Карбокатиони та карбаніони, їх стабільність та фактори, що її визначають (просторові та електронні ефекти, ефект середовища). Будова. Основні методи генерації. Хімічні перетворення карбокатионів та карбаніонів.

Гомолітична дисоціація. Вільні радикали, причини їх утворення та стійкості. Електронна будова. Методи визначення стабільності вільних радикалів. Ароматичні та аліфатичні вільні радикали. Методи їх отримання, хімічні властивості. Бірадикали, карбени, арини. Іон-радикали.

Тема 8. Реакції нуклеофільного та електрофільного заміщення. Реакції приєднання та елімінування.

Нуклеофільне заміщення при  $sp^3$ -гібридному атомі Карбону. Механізми  $S_N1$  та  $S_N2$ : оцінка впливу різних факторів на перевагу того чи іншого варіантів механізму.

Механізми елімінування:  $E1$ ,  $E2$ ,  $E1_{св}$ . Напрямки елімінування: правила Зайцева та Гофмана, їх інтерпретація відповідно до механізму.

### 3. Структура навчальної дисципліни

Назви розділів	Кількість годин											
	Термін навчання 1 рік 4 місяці						Термін навчання 1 рік 9 місяців					
	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
<b>Розділ 1. Електронна будова органічних сполук.</b>												
Тема 1		2		4		10		2		4		10
Тема 2		2		4		12		2		4		12
Тема 3		2		4		14		2		4		14
Тема 4		2		4		14		2		4		14
Разом за розділом 1	74	8		16		50	74	8		16		50
<b>Розділ 2. Просторова будова органічних сполук</b>												
Тема 5	20	2		2		14	20	2		2		14
Тема 6	16	2		4		10	16	2		4		10
Разом за розділом 1	34	4		6		24	34	4		6		24
<b>Розділ 3. Механізми хімічних перетворень у органічних матеріалах.</b>												
Тема 7	22	2		6		14	22	2		6		14
Тема 8	20	2		4		14	20	2		4		14
Разом за розділом 1	42	4		10		28	42	4		10		28
<b>Всього годин</b>	150	16		32		102	150	16		32		102

### 4. Теми семінарських (практичних, лабораторних) занять

№ з/п	Назва теми	Кількість Годин	
		1 рік 4 місяці	1 рік 9 місяців
1	Гідрогенний зв'язок. Міжмолекулярна організація у побудові нових матеріалів	4	4
2	Електронні ефекти в органічних сполуках	4	4
3	Кислотні властивості сполук. Молекулярні пристрої	4	4

4	$\pi$ -Електронні властивості сполук. Органічні напівпровідники	4	4
5	Енантіомери, діастереомери. Рідкокристалічні матеріали.	6	6
6.	Карбокатиони, карбаніони. Вільні радикали. Магнітні матеріали.	6	6
7	Механізми реакцій. Реакції заміщення, приєднання	4	4
	Разом	32	32

### 5. Завдання для самостійної роботи

№ з/п	Види, зміст самостійної роботи	Кількість Годин	
		1 рік 4 місяці	1 рік 9 місяці
1	Вивчення теоретичного матеріалу з типів міжмолекулярної взаємодії. Виконання завдань з якісної оцінки міцності водневого зв'язку	10	10
2	Вивчення теоретичного матеріалу з електронної будови органічних сполук. Виконання завдань з застосування методу резонансу для оцінки електронної будови сполуки.	12	12
3	Вивчення теоретичного матеріалу з кислотних властивостей органічних сполук і принципів функціонування молекулярних пристроїв	14	14
4	Вивчення теоретичного матеріалу з принципів функціонування органічних напівпровідникових матеріалів	14	14
5	Вивчення теоретичного матеріалу зі стереохімії органічних сполук. Виконання завдань з енантіомерії, діастереомерії.	24	24
6	Вивчення теоретичного матеріалу з механізмів хімічних перетворень органічних сполук. Виконання завдань на якісну оцінку відносної стабільності реагуючих частинок у хімічних перетвореннях.	28	28
	Разом	102	102

### 6. Індивідуальні завдання

Не передбачено навчальним планом.

### 7. Методи контролю

Опитування, розв'язування задач на практичних заняттях, залік.

### 8. Схема нарахування балів

Поточний контроль, самостійна робота, індивідуальні завдання				Сума
Розділ 1	Розділ 2	Розділ 3	Екзамен	
Теми 1-4	Теми 5-6	Теми 7-8	Теми 1-8	100
20	20	20	40	

Критерії оцінювання: правильність розв'язання задач стосовно теоретичних розрахунків фізико-хімічних характеристик наноматеріалів у рівноважному стані та інтерпретації результатів цих розрахунків.

## Шкала оцінювання

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

### 9. Рекомендована література

1. Carey F.A., Sundberg R.J. Advanced Organic Chemistry, Part A: Structure and Mechanisms, 5th Edition, Springer, 2008, 1199 p.
2. Smith W.B. Introduction to Theoretical Organic Chemistry and Molecular Modelling, Wiley, 1996, 208 p.
3. Callister W. D. Fundamentals of Material Science and Engineering. 5th Ed. J. Wiley & Sons, Inc.: 2015; 960 p.
4. Fraxedas J.. Molecular Organic Molecules. From Molecules to Crystalline Solids. Cambridge University Press: 2006; 356 p.
5. Smith M. B. March's Advanced Organic Chemistry: Reactions, Mechanisms, and Structure. 7th Ed. Wiley: 2013. 2080 p.
6. Clayden J., Greeves N., Warren S. Organic Chemistry. 2nd Ed. Oxford University Press: 2012. 1261 p.

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

1. Nanotechnology and Nanosensors: Part 1, 2. Hossam Haick, Technion - Israel Institute of Technology, <https://www.coursera.org/learn/nanotechnology1/home/welcome>  
<https://www.coursera.org/learn/nanotechnology2/home/welcome>
2. Organic Electronic Devices. Bryan Boudouris, Purdue university.  
<https://courses.edx.org/courses/course-v1:MITx+3.15x+1T2015/info>
3. Organic Solar Cells - Theory and Practice. Eva Bundgaard, Technical University of Denmark.  
<https://www.coursera.org/learn/solar-cell/home/welcome>
4. Electrical, Optical, Magnetic Materials and Devices, Massachusetts Institute of Technology.  
<https://courses.edx.org/courses/course-v1:MITx+3.15x+1T2015/course/>