

Міністерство освіти і науки України
Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна
Кафедра прикладної хімії

“ЗАТВЕРДЖУЮ”

Перший проректор

“ _____ ” _____ 20__ р.

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Фундаментальні основи функціональних матеріалів

За напрямом підготовки 040101 "хімія"
для спеціальностей 7. 04010101 "хімія" та 8. 04010101 "хімія"

Хімічного факультету

Кредитно-модульна система
організації навчального процесу

Харків – 2014

Робоча програма навчальної дисципліни „Фундаментальні основи функціональних матеріалів ” для студентів за напрямом підготовки 040101 "хімія" для спеціальностей 7. 04010101 "хімія" та 8. 04010101 "хімія".

Розробники: **Черановський Владислав Олегович, д.фіз-мат.н., професор кафедри прикладної хімії, Комихов Сергій Олександрович, к.х.н., доцент кафедри прикладної хімії.**

Робоча програма затверджена на засіданні кафедри прикладної хімії

Протокол № 8 від “ 24 ” 04 _____ 2014 р.

Завідувач кафедри _____ В.А. Чебанов

“ 24 ” 04 _____ 2014 р

Схвалено методичною комісією хімічного факультету

Протокол № 10 від “ 14 ” 05 _____ 2014 р.

“ 14 ” _____ 05 _____ 2014 р.

Голова _____

Юрченко О.І.

1. Опис навчальної дисципліни

Найменування показників	Галузь знань, напрям підготовки, освітньо-кваліфікаційний рівень	Характеристика навчальної дисципліни
Кількість кредитів 3	Галузь знань 0401 «Природничі науки»	денна форма навчання дисципліна вільного вибору студента
Модулів – 2	Напрямок підготовки 040101 "хімія" Спеціальність 7. 04010101 "хімія" та 8. 04010101 "хімія"	Рік підготовки: V -й
Загальна кількість годин 108		Семестр 9 -й
Тижневих годин для денної форми навчання: аудиторних – 3 самостійної роботи студента – 4		Лекції 36 год.
		Лабораторні заняття 18 год.
	Самостійна робота 54 год.	
	Освітньо-кваліфікаційний рівень: магістр, спеціаліст	Вид контролю: екзамен

2. Мета та завдання навчальної дисципліни

Мета: сформувати загальні уявлення про неорганічні та органічні функціональні матеріали, нанотехнології і наноматеріали; ознайомити студентів з основними відмінами наноматеріалів від звичайних речовин; надати студентам загальну інформацію стосовно фундаментальних основ нанотехнологій з наголосом на фізико-хімічні методи дизайну нових низько розмірних функціональних матеріалів.

У результаті вивчення даного курсу студент повинен

знати: основну термінологію, що використовується у нанотехнологіях та при опису властивостей наноматеріалів; головні методи дизайну наноматеріалів; застосування наноматеріалів у сучасних технологіях; особливості низько розмірних матеріалів у порівнянні із звичайними тривимірними речовинами; основні положення квантової хімії і фізики, що використовуються для моделювання фізико-хімічних властивостей наноматеріалів; закономірності електронного впливу у молекулах, класифікацію реакцій за характером розриву та утворення зв'язків, основні типи реагуючих частинок та шляхи їх перетворень, мати уявлення про основні механізми реакцій;

вміти: проводити прості теоретичні розрахунки фізико-хімічних характеристик наноматеріалів у рівноважному стані та інтерпретувати результати цих розрахунків; використовувати метод резонанса та теорію електронних ефектів для характеристики електронної будови сполук та інтермедіатів, обґрунтовано пропонувати механізм хімічного перетворення.

Програма навчальної дисципліни

Модуль I. Теоретичні основи наноматеріалів і нанотехнологій

Тема 1. Нанотехнології і наноструктуровані матеріали.

Визначення і термінологія. Основні класи наноструктурованих матеріалів. Композитні наноматеріали. Скануюча тунельна мікроскопія. Основні напрямки застосування наноструктурованих матеріалів і нанотехнологій.

Тема 2. Моделювання фізико-хімічних властивостей наноматеріалів.

Головні задачі і проблеми теоретичного моделювання наноматеріалів. Необхідність урахування розмірних і квантових ефектів для адекватного опису наноматеріалів. Квантовохімічні методи розрахунку структури і властивостей наноматеріалів.

Тема 3. Напівпровідникові нанокристали (квантові точки).

Розмірне квантування руху електронів у нанокристалах. Аномалія Шоткі. Структура, оптичні, електричні і магнітні властивості квантових точок. Застосування квантових точок у електроніці і медицині.

Тема 4. Низьковимірні провідники і напівпровідники.

Електрофізичні та магнітні властивості іон-радикальних солей. Метали на основі полімерів, поліацетилен. Вуглецеві і не вуглецеві нанотрубки, віскери, графен. Зонна теорія низько розмірних матеріалів. Закон Ома і провідникові вуглецеві нанотрубки. Нестабільності Пайерлса і Мотта. Спінтроніка і наноплазмоніка.

Тема 5. Наноструктуровані магнітні матеріали.

Молекулярні магнетики і стабільність магнітного стану при нульовій температурі. Необхідність урахування кореляційних ефектів для адекватного опису молекулярних магнетиків. Квантові фазові переходи. Температурні та польові залежності фізико-хімічних характеристик квазіодновимірних магнетиків.

Модуль 2. Теоретичні основи хімії органічних матеріалів

Тема 6. Електронна будова органічних сполук та метеріалів на їх основі.

Октетна теорія Льюїса, типи зв'язків: іонний, ковалентний, координаційний, дативний. Двох-, трьох- та багатоцентрові зв'язки. σ -Комплекси. Комплекси з переносом заряду. Залежність властивостей органічних сполук від характеру зв'язку. Гідрогенний зв'язок у органічних матеріалах та його вплив на їх властивості..

Поняття про електронегативність. Теорія електронних зміщень та ефектів: індуктивний та резонансний, статичний і динамічний. Ефект поля. Розкладання сумарних властивостей на властивості окремих зв'язків по адитивним схемам: енергії зв'язків, полярність зв'язків та груп. Експериментальні характеристики зв'язків. Енергія дисоціації, валентні кути, довжини, полярність, поляризовність, дипольні моменти.

Фізична природа хімічних зв'язків. Квантовомеханічні уявлення про хімічний зв'язок. Поняття про атомні та молекулярні орбіталі, σ, π -наближення, квантовохімічні методи розрахунків. Правила взаємодії орбіталей (відповідність симетрії, інтеграл перекривання, розщеплення рівнів). Співвідношення класичної і квантової теорій. Молекулярні діаграми. Ароматичність та антиароматичність.

Сполуки з топологічним зв'язком. Молекулярні перемикачі та молекулярні машини.

Кислотно-основні властивості органічних сполук. визначання кислот і основ по Бренстеду та Льюїсу. Кислотно-основна рівновага. Рівняння Бренстеда. Загальний і

специфічний кислотний та основний каталіз. Принцип ЖМКО та приклади його використання. Таутомерні протонні перетворення. Кето-енольна таутомерія та її механізм. Вплив структурних факторів на стан таутомерної рівноваги. Таутомерія нітрогенвмісних органічних матеріалів.

Тема 7. Стереохімія

Поняття про стереохімію. Історична довідка. Статична стереохімія. Енантіомерія. Поняття про асиметрію, хіральність та хіральний центр. Типи хіральності. Еквівалентні (гомотопні), енантіотопні та діастереотопні функціональні групи. Номенклатура оптичних ізомерів.

Динамічна стереохімія. Геометрична ізомерія. Поняття про конформацію. Фактори, що визначають енергетичну вигідність конформерів (стеричні, полярні, Н-зв'язки). Конформації етана та бутана. Конформації в ненасичених структурах (бутадієн-1,3, акролеїн, халкон). Конформації циклічних структур (карбоцикли, вуглеводи).

Фізичні методи у дослідженні стереохімії органічних матеріалів.

Тема 8. Механізми органічних хімічних перетворень.

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.

Загальні принципи реакційної здатності. Класифікація реакцій: за типом розриву зв'язків, за характером перетворень, за типом реагуючої частинки. Принцип структурної відповідності інтермедіату (постулат Хемонда). Теорія перехідного стану. Гіперповерхня енергії. Координата реакції та зміни енергії вздовж неї. Вільна енергія активації, ентальпія та ентропія реакції.

Емпіричний підхід до оцінки реакційної здатності. Кореляційні рівняння, принцип лінійності вільних енергій. Рівняння Гаммета і Тафта.

Реакції заміщення. Нуклеофільне заміщення у насиченого атома Карбону. Стереохімія заміщення. Електрофільне заміщення у насиченого атома Карбону.

Реакції приєднання та елімінування. Направленість реакцій приєднання, їх стереохімія. Правило Марковникова та перекичний ефект. Механізми реакцій елімінування та їх стереохімія. Реакції перегрупувань.

3. Структура навчальної дисципліни

Модулі і теми	Кількість годин					
	Денна форма					
	Усього	у тому числі				
Л		п	лаб	інд	ср	
1	2	3	4	5	6	7
Модуль 1						
Тема 1	8	2		1		5
Тема 2	12	4		2		6
Тема 3	13	4		2		7
Тема 4	16	4		2		10
Тема 5	13	4		2		7
Разом за	52	18		9		25

модулем 1						
Модуль 2						
Тема 6	20	6		4		10
Тема 7	12	4		2		6
Тема 8	24	8		3		13
Разом за модулем 2	56	18		9		29
Усього годин	108	36		18		54

5. Теми практичних занять

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
1	Нанотехнології і наноструктуровані матеріали.	1
2	Моделювання фізико-хімічних властивостей наноматеріалів.	2
3	Напівпровідникові нанокристали (квантові точки).	2
4	Низьковимірні провідники і напівпровідники.	2
5	Наноструктуровані магнітні матеріали.	2
6	Електронна будова органічних сполук та метеріалів на їх основі.	4
7	Стереохімія.	2
8	Механізми органічних хімічних перетворень.	3

6. Самостійна робота

Назва теми	Кількість годин	
	ср	пір
Тема 1. Застосування наноструктурованих матеріалів і нанотехнологій у хімії та медицині.	5	
Тема 2. Основні квантовохімічні методи наближеного розрахунку будови і властивостей наноматеріалів.	5	
Тема 3. Оптичні та магнітні властивості квантових точок та їх практичне використання.	4	
Тема 4. Вступ до спінтроніки.	4	
Тема 5. Моделювання магнітних характеристик низько розмірних сполук перехідних металів.	9	
Тема 6. Якісна оцінка міцності гідrogenного зв'язку у органічних матеріалах на основі факторів хімічної структури. Застосування адитивних схем для розрахунків властивостей органічних матеріалів.	10	
Тема 7. Хіральні органічні матеріали. Конформаціні рівноваги.	4	
Тема 8. Відносна стабільність реагуючих часток. Механізми органічних хімічних перетворень.	13	

7. Методи навчання

Лекції, виконання лабораторних робіт, самостійна робота.

8. Методи контролю

Рішення задач на практичних заняттях, індивідуальні завдання для самостійної роботи; моделювання професійних ситуацій при вирішенні задач щодо створення функціональних матеріалів, тестові завдання, екзамен.

9. Розподіл балів, які отримують студенти

Поточне тестування та самостійна робота		Підсумковий семестровий контроль (екзамен)	Сума
Модуль 1	Модуль 2	40	100
Теми 1-5	Теми 6-10		
Розв'язання задач 30	Практичні роботи 30		

Для допуску до підсумкового семестрового контролю студент повинен набрати не менше **30** балів за розв'язання тестових задач.

Екзамен вважається зданим, якщо рейтинг за екзамен не менше, ніж 20 балів.

Шкала оцінювання

Сума балів за всі види навчальної діяльності протягом семестру	Оцінка ECTS	Оцінка за національною шкалою
90 – 100	A	відмінно
80-89	B	добре
70-79	C	
60-69	D	задовільно
50-59	E	
1-49	FX	незадовільно

10. Методичне забезпечення

1. Робоча програма навчальної дисципліни.
2. Науково-методична література.
3. Мультимедійні презентації лекційного матеріалу.

11. Рекомендована література

Базова

1. Н.А. Азаренков, А.А. Веревкин, Г.П. Ковтун. Основы нанотехнологий и наноматериалы. – Харьков 2009. –69 с.
2. В.В.Еремин. Нанохимия и нанотехнология. – М. Педагогический университет, 2009.-92с.
3. В.А. Кульбачинский. Полупроводниковые квантовые точки. – Соросовский образовательный журнал -2001.-т.7, №4, с.98-104.
4. П. Эткинс Физическая химия. т.2. –М.: Мир, 1980. – 584 с.
5. Д. Маттис Теория магнетизма. – М.: Мир, 1965. – 407 с.4.
6. Марч Дж. Органическая химия / Пер. с англ. под ред. И. П. Белецкой. – М.: Химия. –1987. –т. 1-4.
7. Кери Ф., Сандберг Р. Углубленный курс органической химии / Пер. с англ. под ред. В. Б. Потапова. –М.: Химия. -1981. –т. 1, 2.
8. Днепровский А. С., Темникова Т. И. Теоретические основы органической химии. Л.: Химия, 1979. -520с.

Допоміжна

1. С.М. Комаров Квантовые точки Дубны. –Химия и Жизнь –2010. – №5.– с.10-13
2. Г.В. Эрлих. Мифы нанотехнологий. – Химия и Жизнь– 2010. – №5.– с.22-27.
3. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц Статистическая физика. Часть 1. – М.: Наука, 1976. – 584 с.
4. В. Чебанов, С. Десенко Многокомпонентные гетероциклизации с управляемой селективностью. Реакции карбонильных соединений с азотсодержащими моно-, би- и полинуклеофилами. – LAP LAMBERT Academic Publishing, 2011. – 340 с.
5. В.А. Чебанов В.А., С.М. Десенко Многокомпонентные реакции гетероциклизации с управляемой селективностью. – Химия гетероцикл. соед., 2012. - №4. – с. 607 - 625