

Міністерство освіти і науки України

Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна

Кафедра хімічного матеріалознавства

Кафедра фізичної хімії

“ЗАТВЕРДЖУЮ”

Проректор з науково-педагогічної
роботи

“ _____ ” _____ 2018 р.

Робоча програма навчальної дисципліни

АКТУАЛЬНІ ПРОБЛЕМИ ФІЗИЧНОЇ ХІМІЇ

рівень вищої освіти магістр

галузь знань 10 Природничі науки

спеціальність 102 Хімія

освітня програма освітня-професійна програма “Хімія”

вид дисципліни обов’язкова

факультет хімічний

2018 / 2019 навчальний рік

Програму рекомендовано до затвердження вченою радою хімічного факультету
31 серпня 2018 року, протокол № 7

РОЗРОБНИКИ ПРОГРАМИ:

Мчедлов-Петросян М. О., доктор хімічних наук, професор, завідувач кафедри фізичної хімії

Коробов О. І., доктор хімічних наук, професор кафедри хімічного матеріалознавства

Програму схвалено на засіданні кафедри фізичної хімії;
протокол від ____ серпня 2018 року, № 1

Завідувач кафедри фізичної хімії

_____ / М. О. Мчедлов-Петросян /
(підпис)

Програму схвалено на засіданні кафедри хімічного матеріалознавства;
протокол від 31 серпня 2018 року, № 1

Завідувач кафедри хімічного матеріалознавства

_____ / О. І. Коробов /
(підпис)

Програму погоджено методичною комісією хімічного факультету

Протокол від 31 серпня 2018 року № 1

Голова методичної комісії хімічного факультету

_____ / П. В. Єфімов /
(підпис)

ВСТУП

Програма навчальної дисципліни «Актуальні проблеми фізичної хімії» складена відповідно до освітньо-професійної (освітньо-наукової) програми підготовки магістрів; спеціальність: 102 – хімія.

1. Опис навчальної дисципліни

1.1. Мета викладання навчальної дисципліни

Метою викладання навчальної дисципліни є надання студентам уявлення щодо основних типів організованих систем: молекул-рецепторів та молекулярних ансамблів, рушійних сил взаємодій типу Хазяїн – Гість, термодинаміки супрамолекулярного комплексоутворення, використання організованих систем для цілеспрямованого впливу на властивості розчинених речовин та вирішення таким чином різноманітних наукових та прикладних задач. Ознайомлення з основами нанохімії, з найважливішими методами синтезу наночастинок та нанопоруватих сорбентів з заданими властивостями, з основними галузями використання наносистем у сучасній науці та технології. Надання студентам уявлення про сучасний стан низки фундаментальних проблем, які пов'язані з експериментальним та теоретичним вивченням закономірностей елементарного акту хімічних реакцій, з переходом від хімічної кінетики до хімічної динаміки. Зараз прогрес в цій галузі хімії як ніколи раніше швидко впливає на розвиток наукоємних технологій, і матеріал курсу викладається саме у такому контексті і суттєво базується на уявленнях про кінетику та механізми складних, зокрема нелінійних, хімічних реакцій, які студенти отримали раніше.

1.2. Основні завдання вивчення дисципліни

- Мотивація студентів до вивчення головних сучасних напрямків супрамолекулярної хімії та нанохімії.
- Формування уявлень щодо взаємодій «хазяїн» + «гість» та природи сил, що їх зумовлюють; знайомство з основними типами молекул-рецепторів – циклодекстринів, краун-етерів, криптантів, каліксаренів, дендримерів, тощо, включаючи різноманітні гібридні системи на їх основі.
- Знайомство з галузями застосування методів супрамолекулярної хімії, зокрема для керування хімічними процесами та в аналітичній практиці.
- Знайомство з основними підходами до синтезу наночастинок та застосуванням останніх у сучасних нанотехнологіях, медицині та інших областях.
- Мотивація студентів до вивчення сучасних проблем і результатів хімічної фізики, зокрема досягнень в галузі фемто- та аттосекундної спектроскопії, шляхом докладного обговорення її місця і ролі у розумінні різноманітних біологічних процесів на клітинному рівні, у розвитку одномолекулярної хімії поверхні, тощо.
- Формування уявлень про особливості експериментального та теоретичного дослідження динаміки елементарних актів хімічних перетворень, фемтосекундну спектроскопію, поверхню потенційної енергії реагуючої системи, траєкторні розрахунки, статистичні підходи.
- Висвітлення можливого впливу тунельних та спінових ефектів на динаміку хімічних перетворень та обговорення можливостей їх застосування з метою управління хімічними перетвореннями.
- Розвиток навичок роботи з сучасною оглядовою літературою, зокрема, здатності проаналізувати і викласти обрану чи задану тему.

1.3. Кількість кредитів: 3

1.4. Загальна кількість годин: 90

1.5. Характеристика навчальної дисципліни	
Нормативна / за вибором	
Денна форма навчання	Заочна (дистанційна) форма навчання
Рік підготовки	
1-й	1-й
Семестр	
2-й	2-й
Лекції	
32 год.	8 год.
Практичні, семінарські заняття	
16 год.	6 год.
Лабораторні заняття	
Не передбачені	Не передбачені
Самостійна робота	
42 год.	76 год.
Індивідуальні завдання	
Не передбачені	

1.6. Заплановані результати навчання

Знати: найважливіші типи організованих систем, їх класифікацію за різними ознаками, найголовніші властивості та призначення, основні літературні джерела для оцінки реакційної здатності молекул-рецепторів та молекулярних ансамблів; теоретичні основи супрамолекулярної хімії та нанохімії, принципи, на яких ґрунтуються взаємодії Хазяїн – Гість, можливості міцел ПАР та споріднених систем як мікро- та нанореакторів; принципи виготовлення нанодисперсних систем, їх головні фізико-хімічні властивості, галузі використання у нанотехнології, включаючи біологічні та медичні напрямки застосування; експериментальні та теоретичні можливості сучасної хімічної кінетики; основні положення динаміки хімічних реакцій: фемтосекундна спектроскопія, можливості управління елементарним актом хімічної реакції, траєкторні розрахунки на поверхні потенціальної енергії; статистичні теорії швидкості хімічних реакцій; тунельні та спінові ефекти в хімії.

Вміти: довести механізм дії організованих розчинів і наносистем та сформулювати основні підходи до синтезу молекул-рецепторів та нанодисперсних частинок, знайти необхідну довідкову інформацію про структурні та фізико-хімічні властивості, реакційну здатність різноманітних організованих систем, тобто молекул-рецепторів, молекулярних ансамблів, а також нанорозмірних дисперсних систем; оптимально спланувати вибір та умови застосування відповідної системи для вирішення тієї чи іншої наукової та прикладної хімічної задачі; вільно орієнтуватися в сучасних публікаціях в галузі фізичної хімії, в першу чергу оглядових; бути здібним стисло і логічно викласти самостійно обрану чи задану тему в галузі сучасної фізичної хімії.

2. Тематичний план навчальної дисципліни

Розділ 1. Організовані системи, мікрореактори та нанохімія

Тема 1. Основні уявлення щодо організованих систем, мікрореакторів та нанохімії.

Організовані системи в природі. Біомембрани, ДНК, РНК, ферменти, хлорофіл та гемоглобін. Клатрати. Міцелярні розчини. Молекули-рецептори та молекули-субстрати. Взаємодії типу Хазяїн + Гість (рецептор + субстрат). Відкриття краун-етерів (Ч. Педерсен), криптантів (Ж.-М. Лен) та молекул-контейнерів (Д. Крем). Циклодекстрини. Супрамолекулярні комплекси. Термодинаміка та кінетика комплексоутворення. Основні уявлення про нанохімію. Взаємовідношення колоїдної хімії та нанохімії. Квантові ефекти та квантові точки. Нові можливості, що відкриває застосування організованих розчинів, мікрореакторів та наночастинок.

Тема 2. Супрамолекулярні системи.

Класифікація та природа сил, що зумовлюють взаємодії Хазяїн + Гість. Гідрофобні взаємодії, іон-дипольні та ван-дер-Ваальсівські взаємодії, водневі зв'язки. Принцип геометричної відповідності. Молекулярне впізнавання. "Хімія за межами молекул". Молекулярні ансамблі. Плівки Ленгмюра–Блоджетт. Реагенти, прищеплені до твердої поверхні. Узагальнена класифікація за Леном.

Тема 3. Властивості та застосування краун-етерів, криптантів, каліксаренів та інших молекул-рецепторів.

Приклади найтипівіших краун-етерів та криптантів. Розміри іонів металів та порожнин макроциклічних лігандів. Стехіометрія комплексоутворення, значення констант стійкості комплексів у воді та органічних розчинниках. Комплекси краун-етерів с органічними катіонами. Комплекси криптантів з аніонами. Використання краун-етерів та криптантів. Підвищення розчинності неорганічних солей у органічних розчинниках. Екстракція. Транспорт іонів. Міжфазний каталіз. Стабілізація аніонів натрію та калію, одержання електридів, ауридів, тощо. Комплексоутворення з молекулами та іонами. Водорозчинні каліксарени. Використання в аналітичній практиці, в біомедичних дослідженнях. Сферанди та інші молекули-рецептори. Гібридні супрамолекулярні системи.

Тема 4. Циклодекстрини.

Будова, класифікація та основні властивості циклодекстринів; α -, β - та γ -циклодекстрини. Гідрофільні та гідрофобні ділянки в молекулах циклодекстринів. Моделювання ферментативного каталізу. Взаємодія з молекулами та іонами, у тому числі з ПАР та барвниками. Використання циклодекстринів для здійснення цілеспрямованого зсуву рівноваги у розчині. Ковалентно-модифіковані циклодекстрини. Застосування циклодекстринів в аналітичній хімії, фармакології та інших областях.

Тема 5. Дендримери та полімерні поліелектролітні "щітки".

Структура та синтез дендримерів. Галузі використання дендримерів. Водорозчинні дендримери як мономолекулярні міцели. Їх властивості та специфіка поведінки. Сферичні поліелектролітні щітки: синтез, властивості у розчинах, використання. Сферичні поліелектролітні щітки – новий тип мікро- та нанореакторів.

Тема 6. Синтези наночастинок.

Методи синтезу наночастинок. Органозолі металів та неметалів. Синтези у мікро- та нанореакторах – прямих та обернених міцелах. Золь-гель-технології. Темплатний синтез мезопоруватих наноматеріалів та їх властивості як адсорбентів. Синтези у сферичних поліелектролітних щітках. Синтези гетеронаночастинок; core-shell-

наночастинки. Використання наночастинок в сучасних технологіях та вимоги щодо якості наночастинок. Біомаркери, молекулярні маяки.

Тема 7. Розчинні форми нанокарбону.

Галузі використання фулеренів, нанодіамантів та графену. Ковалентна модифікація фулеренів. Солюбілізація ансамблями амфіфілів та молекулами-рецепторами (каліксаренами, γ -циклодекстринами, тощо). Природа розчинів немодифікованих фулеренів. Гідрозоли та органозоли фулеренів. Колоїдні розчини нанодіамантів та графену.

Розділ 2 Фізика хімічних реакцій

Тема 8. Сучасні проблеми хімічної фізики.

Огляд сучасних проблем і результатів хімічної фізики; зокрема прогрес у розумінні різноманітних біологічних процесів та дії лікарських засобів на клітинному рівні, у розвитку одномолекулярної хімії поверхні, досягнення в галузі фемто- та аттосекундної спектроскопії.

Тема 9. Експериментальні та теоретичні можливості сучасної хімічної кінетики.

Завдання хімічної кінетики: ресурсозбереження у фундаментальних аспектах; оптимізація хіміко-технологічних процесів; управління елементарним актом; вивчення нових структур далеко від рівноваги. Експериментальні можливості хімічної кінетики. Класичний кінетичний експеримент і його обмеженість. Методи вимірювання швидкостей швидких реакцій: струєві методи, адіабатичний стиск, релаксаційні методи, імпульсний фотоліз. Метод молекулярних пучків. Розподіл продуктів реакції. Зривні і рикошетні реакції.

Тема 10. Динаміка хімічних реакцій.

Експериментальне вивчення перехідного стану. Фемтосекундна спектроскопія. Схема фемтосекундної спектроскопії. Приклад: дисоціація NaJ. Цілеспрямоване управління елементарним актом хімічної реакції. Приклад: фотодисоціація HOD. Поняття механізму реакції. Динаміка молекулярних взаємодій. Поверхня потенційної енергії. Шлях реакції і координата реакції на поверхні потенційної енергії; сідлова точка; власна координата реакції. Рух зображуючої точки по поверхні потенційної енергії. Фазовий простір, траєкторії. Обмеження по симетрії. Збереження орбітальної симетрії при русі зображуючої точки по поверхні потенційної енергії. Правило неперетинання. Кореляційні діаграми. Правила Вудворда-Хофмана. Загальна схема класичного траєкторного розрахунку: запис та інтегрування рівнянь руху, дія, змінні дія-кут; перевірка точності інтегрування; аналіз продуктів реакції. Вірогідність переходів, перерізи реакцій, мікроскопічні і макроскопічні константи швидкості - на прикладі бімолекулярних реакцій. Врахування квантових ефектів в траєкторних розрахунках. Статистичні моделі. Теорія перехідного стану з погляду траєкторних розрахунків - оцінка наближеного характеру теорії. Теорія РРКМ мономолекулярних реакцій. Реакції в конденсованій фазі. Модель Крамерса; рівняння Ланжевена.

Тема 11. Тунельні ефекти в хімічній кінетиці.

Тунельні ефекти в хімії. Загальні уявлення про тунелювання. Експериментальне спостереження тунельного ефекту: кінетичний підхід, спектроскопічний підхід. Приклади тунельних переходів: інверсія аміаку, внутрішньомолекулярний тунельний перенос атому водню в малоновому альдегіді, полімеризація формальдегіду при гелієвих температурах. Низькотемпературна границя швидкості реакції; критична температура тунелювання. Кінетичний ізотопний ефект.

Тема 12. Спінові та магнітні ефекти в хімічній кінетиці.

Спінові і магнітні ефекти в хімії. Спін мікрочастинки. Реакції дисоціації і рекомбінації. Молекулярна і спінова динаміка радикальних пар. Швидкість спінової еволюції радикальних пар; спін-решіточна і спін-спінова релаксація. Магнітний ізотопний ефект. Ефект хімічної поляризації ядер і електронів. Друга генерація магнітних ефектів. Спіновий каталіз

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. Назва												
Разом за розділом 1	45	16	8	-	-	21	45	4	3	-	-	38
Розділ 2. Назва												
Разом за розділом 2	45	16	8	-	-	21	45	4	3	-	-	38
Усього годин	90	32	16			42	90	8	6	-	-	76

4. Темі семінарських (практичних, лабораторних) занять

№ з/п	Назва теми	Кількість годин	
		ден.	заочн.
1	Основні уявлення щодо організованих систем, мікрореакторів та нанохімії.	1	1
2	Загальні концепції супрамолекулярної хімії. Краун-етери, криптанди та сферанди.	2	1
3	Циклодекстрини та каліксарени як типові молекули - рецептори	1	
4	Дендримери та полімерні поліелектролітні щітки – новий тип мікро- та нанореакторів.	2	1
5	Наночастинки, нанореактори, розчинні форми нанокарбону	2	1
6	Експериментальні і теоретичні методи хімічної кінетики	1	
7	Динаміка хімічних реакцій	3	1
8	Тунельні ефекти в хімічній кінетиці	2	
9	Спінові та магнітні ефекти в хімічній кінетиці	2	1

5. Завдання для самостійної роботи

№ з/п	Види, зміст самостійної роботи	Кількість годин	
		денне	заочне
1	Організовані системи в природі. Біомембрани, ДНК, РНК, ферменти, хлорофіл та гемоглобін.	3	5
2	Термодинаміка та кінетика утворення супрамолекулярних комплексів.	4	6
3	Застосування краун-етерів у екстракції, транспорті іонів, міжфазному каталізі	3	5
4	Використання циклодекстринів для здійснення цілеспрямованого зсуву рівноваги у розчині.	4	6
5	Синтези гетеронаночастинок; core-shell-наночастинок.	3	6

6	Колоїдні розчини нанодіамантів та графену.	4	7
7	Методи дослідження швидких реакцій.	3	6
8	Поверхня потенційної енергії реагуючої системи.	4	7
9	Траєкторні розрахунки динаміки елементарного акту .	3	6
10	Статистичні моделі ТПС.	4	8
11	Тунельні ефекти в хімічній кінетиці.	3	7
12	Спінові та магнітні ефекти в хімічній кінетиці.	4	7
	Разом	42	76

6. Індивідуальні завдання

Не передбачені

7. Методи контролю

Семінари, контрольна робота, екзамен.

8. Схема нарахування балів

Приклад для підсумкового семестрового контролю при проведенні семестрового екзамену або залікової роботи

Поточний контроль, самостійна робота, індивідуальні завдання				Екзамен (залікова робота)	Сума
Розділ 1	Розділ 2	Контрольна робота	Разом		
T1 – T7	T8 – T12				100
15	15	30	60	40	100

T1, T2 ... – теми розділів.

Умовою допуску до екзамену є обов'язковий виступ на семінарах та написання контрольної роботи.

Шкала оцінювання

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

9. Рекомендована література

Основна література

1. Ж.-М. Лен. Супрамолекулярная химия. Концепции и перспективы. Новосибирск: Наука, 1998. 334 с.
2. Химия комплексов "гость-хозяин", под ред. Ф.Фегтле, Э. Вебера. М.: Мир, 1988. С. 511.
3. М. Хираока. Краун-соединения. М.: Мир, 1986. 363 с.

4. С. Н. Штыков. Организованные среды – мир жидких наносистем. Природа. 2009. № 7. С. 12-20.
5. Chemical Reviews. 1998. Vol. 98. No. 5. (выпуск журналу посвящений циклодекстринам).
6. S. M. Grayson, J. M. Fréchet J. Convergent Dendrons and Dendrimers: from Synthesis to Application. Chem. Rev. 2001. V. 101. P. 3819-3867.
7. Б. Д. Сумм, Н. И. Иванова. Объекты и методы коллоидной химии в нанохимии. Успехи химии. 2000. Т. 69. № 11. С. 995-1007.
8. А. В. Логинов, В. В. Горбунова, Т. Б. Бойцова. Методы получения металлических коллоидов. Журнал общей химии. 1997. Т. 67. Вып. 2. С. 189-201.
9. Г. Б. Сергеев. Нанохимия. М.: Изд. МГУ, 2003. 299 с.
10. Семиохин И.А., Страхов Б.В., Осипов А.И. Кинетика химических реакций. Москва, МГУ, 1995
11. Воронин А.И., Ошеров В.И. Динамика молекулярных реакций. М.: Наука, 1990.
12. Уманский С.Я.. Лекции по теории элементарного акта химических превращений в газовой фазе. М.: МГУ, 2001.
13. Воробьев А.Х. Лекции по теории элементарного акта в конденсированной фазе. М.: МГУ, 2000.
14. Эйринг Г., Лин С.Г., Лин С.М. Основы химической кинетики. М.: Мир, 1983.
15. Ahmed H. Zewail. Femtochemistry: Atomic-Scale Dynamics of the Chemical Bond Using Ultrafast Lasers (Nobel Lecture) // Angew. Chem. – 2000. – V. 112. – P. 2688–2738; Angew. Chem. Int. Ed. – 2000. – V. 39. – P. 2586–2631.

Допоміжна література

1. П. М. Зоркий, И. Е. Лубнина. Супрамолекулярная химия: возникновение, развитие, перспективы. Вестник МГУ. Сер. 2. Химия. 1999. Т. 40. № 5. С. 300-307.
2. С.Н. Штыков. Организованные среды как альтернатива традиционным растворителям. Universitates. 2003. № 2. С. 20-25.
3. В. В. Янилкин Электрохимия макроциклических соединений. Глава в коллективной монографии «Электрохимия органических соединений в начале XXI века». Под ред. В. П. Гулятя, А. Г. Кривенко, А. П. Томилова. М.: Компания Спутник. 2008. С.378-429.
4. Encyclopedia of Supramolecular Chemistry. Ed. J. L. Atwood, J. W. Steed. 2004.
5. N. Funasaki. Chemistry and Application of Cyclodextrin Complexes. Вестник Харьковского национального университета. 2002. № 549. Химия. Вып. 8 (31). С. 7-14.
6. M. Ballauff. Spherical polyelectrolyte brushes. Prog. Polym. Sci. 2007. Vol. 32. P. 1135–1151.
7. А. А. Вертегел. Первые шаги в наномире. Химия в школе. 2002. № 2. С. 7-17.
8. И. П. Суздаев. Физико-химия нанокластеров, наноструктур и наноматериалов. М.: КомКнига, 2006. 592 с.
9. Л. А. Дыкман, В.А. Богатырев. Наночастицы золота: получение, функционализация, использование в биохимии и иммунохимии. Успехи химии. 2007. Т. 76. № 2. С. 199-213.
10. В. А. Богатырев, Л. А. Дыкман, Н. Г. Хлебцов. Методы синтеза наночастиц с плазмонным резонансом. Саратов: Саратовский государственный университет им. Н. Г. Чернышевского, 2009. 35 с.
11. J. S. Beck et al. A New Family of Mesoporous Molecular Sieves Prepared with Liquid Crystal templates. J. Amer. Chem. Soc. 1992. Vol. 114. N. 27. P. 10834-10843.
12. М. В. Алфимов. Фотоника супрамолекулярных наноразмерных структур. Известия АН. Сер. хим. 2004. № 7. С. 1303.
13. Энергетические ресурсы сквозь призму фотохимии и катализа. Ред. М. Гретцель. М.: Мир, 1986. 632 с.

14. Э. Демлов, З. Демлов. Межфазный катализ. Пер. с англ. М.: Мир, 1987. 485 с.
15. Н. О. Мchedlov-Петросян. Дифференцирование силы органических кислот в истинных и организованных растворах. Харьков: Изд. ХНУ, 2004. 326 с.
16. В. Н. Вережников. Организованные среды на основе коллоидных поверхностно-активных веществ. Воронеж: Издательско-полиграфический центр Воронежского государственного университета, 2008. 74 с.
17. 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.
18. Yuan Tseh Lee. Molecular Beam Studies of Elementary Chemical Processes (Nobel Lecture) // *Angew. Chem.* – 1987 – V. 99. – P. 967–980; *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* – 1987. – V. 26. – P. 939–951.
19. Gerd Binnig, Heinrich Rohrer. Scanning Tunneling Microscopy—From Birth to Adolescence (Nobel Lecture) // *Angew. Chem.* – 1987. – V. 99. – P. 622–631; *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* – 1987. – V. 26. – P. 606–614.
20. Ernst Ruska. The Development of the Electron Microscope and of Electron Microscopy (Nobel Lecture) // *Angew. Chem.* 1987. – V. 99. – P. 611–621; *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* – 1987. – V. 26. – P. 595–605.
21. А. Л. Бучаченко. Новые горизонты химии: одиночные молекулы // *Успехи химии.* – 2006. – Т. 75. – С. 3.
22. А. Л. Бучаченко, В. Л. Бердинский. Спиновый катализ — новый тип катализа в химии // *Успехи химии.* – 2004. – Т. 73. – С. 1123.
23. А. Л. Бучаченко, Ф. И. Далидчик, С. А. Ковалевский, Б. Р. Шуб. Парамагнитный резонанс и детектирование единичного электронного спина // *Успехи химии.* – 2001. – Т. 70. – С. 611.
24. А.Л. Бучаченко. Химия на рубеже веков: свершения и прогнозы // *Успехи химии.* – 1999. – Т. 68. – С. 99.
25. Гольданский В.И., Трахтенберг Л.И., Флеров В.П. Туннельные явления в химической физике, М.: Наука, 1986.
26. Philip H. Bucksbaum. The Future of Attosecond Spectroscopy // *Science.* – 2007. – V. 317. – P. 766.
27. E. Goulielmakis, V. S. Yakovlev, A. L. Cavalieri, M. Uiberacker, V. Pervak, A. Apolonski. Attosecond Control and Measurement: Lightwave Electronics // *Science.* – 2007. – V. 317. – P. 769.
28. Rudolph A. Marcus. Electron Transfer Reactions in Chemistry: Theory and Experiment (Nobel Lecture) // *Angew. Chem.* – 1993. – V. 105. – P. 1161–1172; *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* – 1993. – V. 32. – P. 1111–1121.
29. Richard R. Ernst. Nuclear Magnetic Resonance Fourier Transform Spectroscopy (Nobel Lecture) // *Angew. Chem.* – 1992. – V. 104. – P. 817–836; *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* – 1992. – V. 31. – P. 805–823.
30. Dudley R. Herschbach. Molecular Dynamics of Elementary Chemical Reactions (Nobel Lecture) // *Angew. Chem.* – 1987. – V. 99. – P. 1251–1275; *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* – 1987. – V. 26. – P. 1221–1243.
31. John C. Polanyi. Some Concepts in Reaction Dynamics (Nobel Lecture) // *Angew. Chem.* – 1987. – V. 99. – P. 981–1001; *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* – 1987. – V. 26. – P. 952–971.

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>

Критерії оцінювання навчальних досягнень студентів
з дисципліни
АКТУАЛЬНІ ПРОБЛЕМИ ФІЗИЧНОЇ ХІМІЇ

Знання студентів оцінюється за наступними критеріями:

– «відмінно» – екзаменаційна робота свідчить про те, що студент міцно засвоїв теоретичний матеріал, всебічно орієнтується в усіх основних темах курсу: завдання та можливості сучасної хімічної динаміки та кінетики, методи дослідження скоростей швидких реакцій, фемтосекундна спектроскопія, траєкторні розрахунки на поверхні потенціальної енергії, статистичні моделі, тунельні та спінові ефекти в хімії; відповідь побудовано логічно; дано переконливі відповіді на запитання, які потребують висловити своє ставлення до тієї чи іншої проблеми; вдало підбрано та викладено тему на семінарі, дано відповіді на всі запитання щодо цієї теми;

– «добре» – екзаменаційна робота свідчить про те, що студент добре засвоїв теоретичний матеріал та орієнтується в усіх основних темах курсу: завдання та можливості сучасної хімічної динаміки та кінетики, методи дослідження скоростей швидких реакцій, фемтосекундна спектроскопія, траєкторні розрахунки на поверхні потенціальної енергії, статистичні моделі, тунельні та спінові ефекти в хімії; відповідь побудовано логічно; дано відповіді на запитання, які потребують висловити своє ставлення до тієї чи іншої проблеми, при цьому можуть бути похибки у логіці викладу; вдало викладено тему на семінарі, але можливо тему вибрано не самостійно і дано відповіді не на всі запитання щодо цієї теми;

– «задовільно» – екзаменаційна робота свідчить про те, що студент в основному засвоїв теоретичний матеріал, але орієнтується не в усіх основних темах курсу: завдання та можливості сучасної хімічної динаміки та кінетики, методи дослідження скоростей швидких реакцій, фемтосекундна спектроскопія, траєкторні розрахунки на поверхні потенціальної енергії, статистичні моделі, тунельні та спінові ефекти в хімії; відповідь побудовано не досить логічно; не дано відповіді на запитання, які потребують висловити своє ставлення до тієї чи іншої проблеми; зроблено доповідь на семінарі, але відповіді на задані запитання свідчать про відсутність у студента стабільних знань;

– «незадовільно» – екзаменаційна робота свідчить про те, що студент не засвоїв теоретичний матеріал, не орієнтується у більшості основних тем курсу: завдання та можливості сучасної хімічної динаміки та кінетики, методи дослідження скоростей швидких реакцій, фемтосекундна спектроскопія, траєкторні розрахунки на поверхні потенціальної енергії, статистичні моделі, тунельні та спінові ефекти в хімії; не зроблено доповідь на семінарі або тема не відповідає вимогам і суттєві запитання слухачів залишилися без відповіді.

Теми семінарських завдань

Основні уявлення щодо організованих систем, мікрореакторів та нанохімії.

Загальні концепції супрамолекулярної хімії. Краун-етери, криптанди та сферанди.

Циклодекстрини та каліксарени як типові молекули - рецептори

Дендримери та полімерні поліелектролітні щітки – новий тип мікро- та нанореакторів.

Наночастинки, нанореактори, розчинні форми нанокарбону

Експериментальні і теоретичні методи хімічної кінетики

Динаміка хімічних реакцій

Тунельні ефекти в хімічній кінетиці

Спінові та магнітні ефекти в хімічній кінетиці

Приклад екзаменаційного завдання

ПІБ _____

Група _____ № місця _____

Обмін інформацією під час екзамену – 5 балів

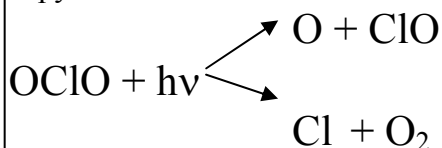
Завдання 1 (15 балів)

Що вивчає кінетика хімічних реакцій?

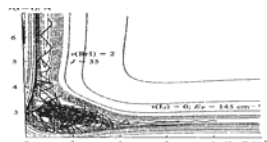
Що вивчає динаміка хімічних реакцій?

Фемтохімія привнесла в хімію нове поняття - хвильової пакет. Що це таке?

Фемтосекундний імпульс дозволяє не тільки вивчати елементарний акт реакції, але і керувати ним. Поясніть на наведеному прикладі, як це відбувається.



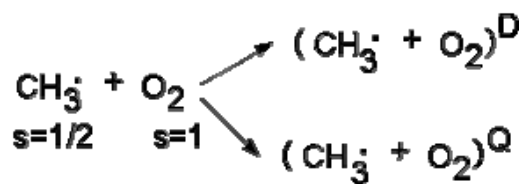
На рисунку наведено приклад "топографічного" зображення поверхні потенційної енергії. Що означають лінії, наведені на рисунку?



Завдання 2 (15 балів)

Назвіть стаціонарні точки поверхні потенційної енергії

Яка з цих реакцій дозволена по спину, а яка заборонена? Відповідь обґрунтуйте. Який продукт утворюється в тому випадку, коли реакція дозволена?



У чому полягає ефект хімічної поляризації ядер?

Яким експериментальним методом він реєструється і в чому саме проявляється?

Які критерії дозволяють судити про те, протікає реакція по тунельному механізму чи ні?

Завдання 3 (10 балів)

Перерахуйте всі відомі Вам типи молекул-рецепторів. З якими субстратами вони можуть взаємодіяти?

Яка природа сил, що утримують субстрат в молекулі-рецепторі?