

**КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ  
УНІВЕРСИТЕТ ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА**

**Інститут високих технологій**

Кафедра супрамолекулярної хімії



**«ЗАТВЕРДЖУЮ»**

Заступник директора з  
науково – педагогічної роботи  
\_\_\_\_\_ Галина ГРАБЧУК

«22» березня 2021 року

**РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ**

**ЕЛЕКТРОННА БУДОВА І ФОТОНІКА МОЛЕКУЛ**

для студентів

галузь знань	10 Природничі науки
спеціальність	102 Хімія
освітній рівень	другий (магістр)
освітньо-наукова програма	Високі технології (хімія та наноматеріали)
вид дисципліни	обов'язкова

Форма навчання	денна
Навчальний рік	2021/2022
Семестр	2
Кількість кредитів ECTS	6
Мова викладання, навчання та оцінювання	українська
Форма заключного контролю	іспит

Викладач: Іщенко О.О., Шило С.О.

Пролонговано: на 20\_\_/20\_\_ н.р. \_\_\_\_\_ («\_\_» \_\_ 20\_\_ р.  
(підпис, ПІБ, дата)

на 20\_\_/20\_\_ н.р. \_\_\_\_\_ («\_\_» \_\_ 20\_\_ р.  
(підпис, ПІБ, дата)

**КИЇВ – 2021**

Розробники:

Іщенко Олександр Олександрович, доктор хімічних наук, професор кафедри супрамолекулярної хімії

Шило Сергій Олександрович, кандидат фізико-математичних наук, доцент кафедри теоретичних основ високих технологій

ЗАТВЕРДЖЕНО

В. о. зав. кафедри супрамолекулярної хімії

  
\_\_\_\_\_ Дмитро ВОЛОЧНЮК

Протокол №7 від «25» лютого 2021р.

ЗАТВЕРДЖЕНО

Зав. кафедри теоретичних основ високих технологій

  
\_\_\_\_\_ Валерій ЛОЗОВСЬКИЙ

Протокол №11 від «03» березня 2021р.

Схвалено науково - методичною комісією  
інституту високих технологій  
Київського національного університету імені Тараса Шевченка

Протокол від «05» березня 2021 року №3

Голова науково-методичної комісії  \_\_\_\_\_ Наталя РУСІНЧУК

«05» березня 2021 року

## ВСТУП

**1. Мета дисципліни** – ознайомлення студентів з основними процесами поглинання, перетворення і випромінювання світлової енергії в молекулах, виявлення зв'язку цих процесів з електронною будовою молекул, опанування стратегії і тактики цілеспрямованого пошуку нових сполук з наперед заданими властивостями для світлочутливих матеріалів, а також новітніх технологій оптоелектроніки, лазерної техніки, голографії, фотovoltaїки, біології та медицини. Розглянути особливості явищ фотоніки, які виникають на нанорозмірному рівні.

**2. Попередні вимоги до опанування або вибору навчальної дисципліни (за наявності):**

Базові знання з фізики та хімії.

**3. Анотація навчальної дисципліни:**

Навчальна дисципліна «Електронна будова і фотоніка молекул» є однією з базових у підготовці фахівців у міждисциплінарній галузі хімії, фізики і фотобіології, оскільки дає можливість опанувати знання щодо електронної і просторової будови молекул, їх люмінесцентної здатності, сольватохромії і асоціації у різних агрегатних станах і середовищах, шляхах перетворення світлової енергії, що є керівництвом для цілеспрямованого створення нових молекул для лазерної техніки, сенсифікації фотоматеріалів, інформаційних технологій, голографії, оптоелектроніки, електролюмінесценції, фотovoltaїки, фотодинамічної терапії та біомідицини в медицині і біології. Студенти познайомляться з фотонікою основних класів хімічних сполук, їх зв'язком зі структурою молекул, з сучасними квантово-хімічними методами розрахунку електронної будови молекул в основному і збудженому станах з метою прогнозування їх фотофізичних і фотохімічних властивостей. Будуть розглянуті реальні приклади застосування фотоактивних речовин в сучасних прикладних сферах. Також буде надано інформацію про явища фотоніки у нанорозмірних структурах та їх застосування.

**4. Завдання дисципліни:**

*Дисципліна забезпечує набуття студентами таких компетентностей:*

ЗК1. Знання та розуміння предметної області та розуміння професійної діяльності

ЗК2. Здатність вчитися та оволодівати сучасними знаннями.

ЗК3. Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу.

ЗК4. Здатність застосовувати знання у практичних ситуаціях.

ЗК5. Здатність до адаптації та дії в новій ситуації.

ЗК6. Здатність генерувати нові ідеї (креативність), а також формулювати судження, маючи неповну або обмежену інформацію.

ЗК7. Навички використання інформаційних і-комунікаційних технологій в хімічних дослідженнях та професійній діяльності.

ЗК8. Здатність оцінювати та забезпечувати якість виконуваних робіт.

ФК1. Здатність використовувати закони, теорії та концепції хімії у поєднанні із відповідними математичними інструментами для опису природних явищ.

ФК2. 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.

ФК5. Здатність застосовувати методи комп'ютерного моделювання для вирішення наукових, хіміко-технологічних проблем та проблем хімічного матеріалознавства.

**5. Результати навчання за дисципліною:**

Результат навчання (1. знати; 2. вміти; 3. комунікація; 4. автономність та відповідальність)		Форми (та/або методи і технології) викладання і навчання	Методи оцінювання та пороговий критерій оцінювання (за необхідності)	Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни
Код	Результат навчання			

1.1	Знати шляхи дезактивації електронно-збудженого стану молекул, електронні стани в нанорозмірних об'єктах	Лекції	Модульна контрольна робота: 4 запитання	15%
1.2	Знати основні квантово-хімічні методи розрахунку електронної і стеричної будови молекул, розрахунку електронних рівнів наноструктур	Лекції	Модульна контрольна робота: 3 запитання	10%
1.3	Знати типи сольватохромії (позитивну, негативну, реверсивну) молекул і міжмолекулярні взаємодії, що її спричиняють.	Лекції	Модульна контрольна робота: 1-2 запитання	5%
1.4	Знати перелік задач сучасної біотехнології, до розв'язання яких застосовуються методи фотоніки	Самостійна робота студента	Доповідь під час інтерактивних лекцій: зміст	5%
2.1	Вміти застосовувати спеціальне програмне забезпечення для розв'язання задач фотоніки молекул та наноструктур та створення комп'ютерних моделей реальних об'єктів та процесів.	Практичні роботи	Семестрова робота студента: опис результатів	25%
3.1	Вміти донести інформацію про постановку задач фотоніки сучасних перетворювачів світлової енергії до аудиторії.	Самостійна робота студента	Доповідь під час інтерактивних лекцій: якість представлення	5%
4.1	Прийняти і обґрунтувати рішення щодо вибору методу.	Інтерактивні лекції, практичні заняття, самостійна робота студента	Семестрова робота студента. Розв'язання задачі на семінарських заняттях	20% 15%

## 6. Співвідношення результатів навчання дисципліни із програмними результатами навчання

Результати навчання дисципліни	1.1	1.2	1.3	1.4	2.1	3.1	4.1
<b>Програмні результати навчання</b>							
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.	+	+	+	+			
5. Здатність застосовувати методи комп'ютерного моделювання для вирішення наукових, хіміко-технологічних проблем та проблем хімічного матеріалознавства.	+	+	+	+		+	
8. Здатність формулювати нові гіпотези та наукові задачі в галузі хімії, вибирати напрями та відповідні методи для їх розв'язання на основі розуміння сучасної проблематики досліджень в галузі хімії та беручи до уваги наявні ресурси.	+	+	+	+	+	+	+

## 7. Схема формування оцінки.

### 7.1 Форми оцінювання студентів:

- семестрове оцінювання:

1. Модульна контрольна робота: РН 1.1-1.3, 4.1 - 40 балів/24 бали.
  2. Самостійна семестрова робота: РН 2.1. - 48 балів/32 бали.
  3. Доповідь під час лекції: РН 1.4,3.1 - 12 балів/6 балів.
- Усього: 100 балів/60 балів.

- підсумкове оцінювання: відсутнє.

Оцінювання	Min	Max
Семестрове оцінювання	60	100
<b>Всього</b>	<b>60</b>	<b>100</b>

### 7.2 Організація оцінювання:

На початку семестру студенти отримують теми для підготовки коротких (3-5 хвилин) доповідей під час проведення лекцій. Починаючи з 2 лекційного заняття студенти роблять свої доповіді із використанням будь-яких методів та форм представлення інформації: зміст доповіді оцінюється з точки зору її новизни, актуальності, науковості (використання наукових джерел інформації) та повноти викладення у 7 балів, а якість донесення інформації до аудиторії – у 5 балів. Мінімум за дане завдання – 6 балів – може бути отримано за умови підготовки доповіді у текстовому форматі з презентацією без усної доповіді під час лекції.

Після другого практичного заняття студенти отримують індивідуальні завдання до семестрової роботи.

У кінці семестру після завершення вивчення тем на останньому практичному занятті (№10) проводиться модульна контрольна робота. Контрольна робота спрямована на визначення рівня знань студентами матеріалів лекцій за весь семестр та вміння застосовувати отримані знання до розв'язання задач. Результати контрольної роботи студенти дізнаються у той самий день. Контрольна робота вважається складеною, якщо студент розв'язав задачу та надав хоча короткі відповіді на кожне з запитань. У цьому випадку він отримує мінімально можливу оцінку за контрольну роботу – 24 бали. У випадку неуспішного написання контрольної роботи студенту дозволяється один раз її перескласти.

Студент отримує залік лише за умови успішного виконання кожного з трьох оцінювань хоча б на мінімально можливий бал: підготовку доповіді, розв'язання семестрової роботи та написання модульної контрольної роботи.

### 7.3. Шкала відповідності оцінок

Оцінка (за національною шкалою) / National grade	Рівень досягнень, % / Marks, %
<b>Відмінно</b> / Excellent	90-100%
<b>Добре</b> / Good	75-89%
<b>Задовільно</b> / Satisfactory	60-74%
<b>Незадовільно</b> / Fail	0-59%

## 8. Структура навчальної дисципліни. Тематичний план лекцій і лабораторних занять

№ п/п	Назва теми	Кількість годин		
		лекції	практичні	самостійна робота
<b>Розділ 1</b>				
1	<b>Вступ.</b> <b>Тема 1</b> Вступ. Визначення поняття фотоніки і кола проблем, які вона вивчає. Фотофізичні і фотохімічні процеси в органічних і біологічних молекулах. Фізика і хімія зору. Фізична теорія кольоровості. Адитивний та субтрактивний методи одержання кольору.	2		
2	<b>Тема 2</b> Фізика і хімія зору. Фізична теорія кольоровості. Адитивний та субтрактивний методи одержання кольору.	2		
	<b>Самостійна робота.</b> Фотосинтез у природі і живих організмах.			20
3	<b>Тема 3.</b> Фотосенсибілізація. Чорно-білий і кольоровий фотографічний процес. Фізико-хімія реєструвальних середовищ сучасних оптичних лазерних дисків.	2		
4	<b>Тема 4.</b> Поняття і закони фотохімії. Енергетичні та хвильові характеристики. Взаємозв'язок між ними. Закон Ламберта - Бугера - Бера. Принцип Франка - Кондона. Інтенсивність вібронних переходів.	2		
	<b>Практична робота.</b> Обробка експериментальних електронних спектрів поглинання молекул. Визначення екстинкцій і сили осцилятора.		2	
	<b>Практична робота.</b> Перевірка закону Ламберта - Бугера – Бера різноманітних хромофорних сполук.		2	
5	<b>Тема 5.</b> Типи електронних переходів в органічних молекулах. Дозволені і заборонені переходи. Вимушене випромінювання. Лазери. Двофотонні процеси. Квантово-хімічний аналіз електронної будови молекул в основному і збудженому станах.	2		
	<b>Самостійна робота.</b> Нелінійно-оптичні ефекти в хромофорах. Застосування дфотонних процесів для діагностики аномалій біомолекул.			20
<b>Розділ 2</b>				
6	<b>Тема 6.</b> Діаграма Яблонського. Синглетний і триплетний стани. Дезактивація збудженого стану. Випромінювальні та безвипромінювальні процеси. Коливальна релаксація. Внутрішня та інтеркомбінаційна конверсія. Квантовий вихід люмінесценції.	2		
	<b>Практична робота.</b> Експериментальне визначення відносного квантового вихода флуоресценції.		2	
7	<b>Тема 7.</b> Перенос енергії. Динамічне та статичне гасіння люмінесценції. Кінетика люмінесценції, Рівняння Штерна - Фольмера. Фотоперенос електрону. Прикладні аспекти переносу електрону та енергії.	2		
8	<b>Тема 8</b> Фотоперенос електрону. Прикладні аспекти переносу електрону та енергії.	2		
	<b>Практична робота.</b> Експериментальне визначення констант Штерна-Фольмера на прикладі молекул ДНК.		2	
	<b>Самостійна робота.</b> Біохемілюмінесценція. Механізм дії. Розповсюдження у природі.			10
9	<b>Тема 9.</b> Фотоніка основних класів органічних сполук. Алкани та їх похідні. Галоїдзаміщені сполуки, спирти, меркаптани, аміни, етери, Алкени. Карбонільні та карбоксильні сполуки. Тіакарбонільні сполуки. азометини. Нітро - та нітрозосполуки. Спряжені полієнові системи. Алкіни. Поліалкіни. Ароматичні сполуки Гетероциклічні сполуки.	2		
	<b>Практична робота.</b> Вирішення задач по фотоніці основних класів органічних і неорганічних сполук.		4	

10	<b>Тема 10.</b> Електростатичні та електродинамічні міжмолекулярні взаємодії. Позитивна, негативна та обернена сольватохромія і сольватофлуорохромія.	2		
11	<b>Тема 11.</b> Асоціація молекул. Н- та J- агрегати. Фотодимери, ексимери та ексиплекси. Комплекси з переносом заряду.	2		
	<b>Практична робота.</b> Модульна контрольна робота		2	
<b>Розділ 3</b>				
12	<b>Тема 12.</b> Сенсibiliзація і десенсибилізація синглетного кисню. Фотодинамічна терапія. Шляхи підвищення фотостабільності функціональних матеріалів на основі органічних сполук.	2		
	<b>Самостійна робота.</b> Нобелівська премія 2008 р. за відкриття зеленого флуоресцентного білка. Історія відкриття. Будова та спектрально-флуоресцентні властивості цього білка. Застосування. Нові різно кольорові білки. Останні досягнення			30
13	<b>Тема 13.</b> Критерії пошуку органічних сполук для активних лазерних середовищ, модуляції лазерного випромінювання, фотовольтаїки, електролюмінесценції, голографії та флуоресцентних зондів для біології та медицини.	2		
14	<b>Тема 14.</b> Фотонні явища в нанорозмірних структурах. Матеріали для нанофотоніки. Біоматеріали для нанофотоніки.	4		10
15	<b>Тема 15.</b> Надпровідні джерела та детектори електромагнітного випромінювання на основі наноматеріалів. Застосування в біології та біотехнології.	4	2	10
16	<b>Тема 16.</b> Напівпровідникові та органічні лазери. Зв'язок біотехнологій та лазерної техніки.	4	2	10
17	<b>Тема 17.</b> Біоматеріали у сонячній енергетиці. Нелінійна оптика та мініатюризація фотонних пристроїв.	2	2	10
	<b>ВСЬОГО</b>	<b>40</b>	<b>20</b>	<b>120</b>

**Загальний обсяг 180 год.,** в тому числі:

Лекцій – **40 год.**

Практичні заняття - **20 год.**

Самостійна робота - **120 год.**

## 9. Рекомендовані джерела:

### Основна:

1. А.Н. Теренин Фотоника молекул красителей и родственных соединений. Ленинград: Наука, 1967.
2. Michael B.Smith, Jerry March. March's Advanced Organic Chemistry: Reactions, Mechanisms, and Structure (Sixth Edition). - John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, New Jersey, 2007. - 2357.
3. А.А.Ищенко. Строение и спектрально-люминесцентные свойства полиметиновых красителей. Киев: Наукова думка, 1994.
4. Christian Reichardt. Solvents and Solvent Effects in Organic Chemistry (Fourth, Updated and Enlarged Edition) WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim, 2011. - 598p.
5. Н.А.Давиденко, А.А.Ищенко, Н.Г.Кувшинский. Фотоника молекулярных полупроводниковых композитов на основе органических красителей. Киев: Наукова думка, 2005. - 296с.
6. Joseph R. Lakowicz. Principles of Fluorescence Spectroscopy. New York: Springer Science+Business Media, 2006.- 954p.
7. S.-H.Kim (Ed.). Functional Dyes. Elsevier, Amsterdam, 2006.
8. А.А.Ищенко, Г.П.Грабчук. Физико-химические проблемы создания фотостабильных преобразователей световой энергии на основе окрашенных

- полимеров(Обзор). - Теорет. и эксперим. химия. 2009. Т.45. №3. С.133 - 155.
9. Г.В. Булавко, А.А. Ищенко. Органические фотовольтаические структуры с объемным гетеропереходом: дизайн, морфология и свойства. – Успехи химии. – 2014. Т.83. №.7. С.575 – 599.
  10. Ю.А. Пентин, Л.В.Вилков. Физические методы исследования в химии. М. Мир. 2003. 683.
  11. Alexander Ishchenko. Photo-Converters Based on Dye-Doped Polymers. In book "Specialty Polymers. *Materials and Applications*" (Ed. Faiz Mohammad), I.K. International Publishing House Pvt. Ltd. New Delhi - Bangalore - Mumbai. 2007. P.301 - 356.
  12. Nikolay A. Davidenko, Irina I. Davidenko, Alexander A. Ishchenko. Spin-dependent processes in information media based on photoconductive polymer composites. Kyiv: Taras Shevchenko National University of Kyiv. 2020. - 182p.
  13. А.В.Кулініч, О.О.Ищенко. Електронна будова та спектрально-флуоресцентні властивості мероціанінів. Київ: Наукова думка, 2021.

### ***Додаткова:***

1. Valery N. Bliznyuk, Ayman F. Seliman, Alexander A. Ishchenko, Nadezhda A. Derevyanko, and Timothy A. DeVol. New Efficient Organic Scintillators Derived from Pyrazoline. ACS Appl. Mater. Interfaces. 2016. Vol. 8. No.20. P. 12843–12851.
2. Alexander A Ishchenko and Andrii V Kulinich. The unusual solvatochromism and solvatofluorochromism of longwave absorbing and emitting barbiturate merocyanine dyes. Methods and Applications in Fluorescence. 2016. Vol. 4. P. 034001 (1-8).
3. Nadezhda A. Derevyanko, Alexander A. Ishchenko and Andrii V. Kulinich. Deeply coloured and highly fluorescent dipolar merocyanines based on tricyanofuran. - Phys.Chem.Chem.Phys. 2020. Vol. 22. No.5. P. 2748 – 2762.

### **10. Додаткові ресурси:**

1. [www.chem-finder.camsoft.com](http://www.chem-finder.camsoft.com)
2. [www.chembank.broad.harvard.edu](http://www.chembank.broad.harvard.edu)
3. [www.chemspider.com](http://www.chemspider.com)