

КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

Навчально науковий інститут високих технологій

кафедра супрамолекулярної хімії

«ЗАТВЕРДЖУЮ»

Заступник директора

з навчальної роботи

Грабчук Г.П.

«___» _____ 2022 року

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Хімія та фізика багатofункціональних матеріалів

для студентів

галузь знань 10 Природничі науки

спеціальність **102 Хімія**

освітній рівень **магістр**

освітня програма **Високі технології (Хемоінформатика)**

вид дисципліни **вибіркова**

Форма навчання	<u>денна</u>
Навчальний рік	<u>2022/2023</u>
Семестр	<u>третій</u>
Кількість кредитів ECTS	<u>5</u>
Мова викладання, навчання та оцінювання	<u>українська</u>
Форма заключного контролю	<u>екзамен</u>

Викладач: д.х.н., проф. Колотілов С.В.

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

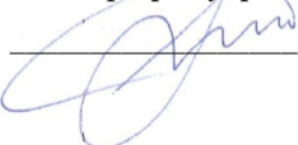
на 20__/20__ н.р. _____ (_____) «__» __ 20__ р.
(підпис, ПІБ, дата)

КИЇВ – 2022

Розробник: д.х.н., проф. Колотілов С.В.

ЗАТВЕРДЖЕНО:

Зав. кафедри супрамолекулярної хімії

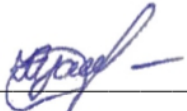

_____ (Рябухін С.В.)

Протокол №7 від «19» серпня 2022 року

Схвалено науково - методичною комісією Інституту високих технологій

Протокол №1 від «9» вересня 2022 року

Голова науково-методичної комісії _____


_____ (Русінчук Н. М.)

ВСТУП

1. Мета дисципліни :

Надати студентам базові знання в галузі створення і використання мультифункціональних матеріалів, для розуміння того, які характеристики повинна мати речовина, щоб стати основою для створення мультифункціонального матеріалу; вивчити відомі підходи до поєднання двох або більшої кількості функціональних властивостей в одному матеріалі; отримати базові знання щодо можливих сфер використання мультифункціональних матеріалів.

2. Попередні вимоги до опанування або вибору навчальної дисципліни :

Дисципліна "Хімія і фізика мультифункціональних матеріалів" є спеціальною дисципліною, для вивчення якої потрібні базові знання з більшості курсів з циклів фундаментальної природничо-наукової підготовки та професійної підготовки. Вивчення дисципліни "Хімія і фізика мультифункціональних матеріалів" потребує базових знань з неорганічної хімії, органічної хімії, каталізу, фізичної хімії (зокрема, адсорбції, спектроскопії), магнетохімії і нанохімії, а також базових знань з ряду розділів фізики (щодо теорії електропровідності, магнетизму, фізичних методів дослідження). Студент повинен вміти користуватися сучасними електронними базами даних в галузі хімії і біології, іншими Інтернет-ресурсами.

3. Анотація навчальної дисципліни

Курс складається з трьох змістовних блоків. В першому блоці

4. Завдання (навчальні цілі)

Навчання дисципліні має на меті розвивати у студентів такі компетентності:

ЗК1. Знання та розуміння предметної області та розуміння професійної діяльності.

ЗК2. Здатність вчитися і 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).

ЗК7. Здатність використовувати інформаційні та комунікаційні технології.

ЗК8. Здатність оцінювати та забезпечувати якість виконуваних робіт.

ЗК9. Здатність спілкуватися з представниками інших професійних груп різного рівня (з експертами з інших галузей знань/видів економічної діяльності).

ЗК10. Здатність спілкуватися англійською та (за можливості) іншою іноземною мовою, як усно, так і письмово.

ЗК11. Здатність діяти на основі етичних міркувань (мотивів).

ЗК12. Здатність працювати автономно.

ЗК13. Здатність до активного збереження довкілля.

ЗК14. Здатність до пошуку, критичного аналізу та обробки інформації з різних джерел.

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.

ФК3. Здатність організовувати, планувати та реалізовувати хімічний експеримент.

ФК4. Здатність інтерпретувати, об'єктивно оцінювати і презентувати результати свого дослідження.

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

ФК6. Здатність здобувати нові знання в галузі хімії та інтегрувати їх із уже наявними.

ФК7. Здатність дотримуватися етичних стандартів досліджень і професійної діяльності в галузі хімії (академічна доброчесність, ризики для людей і довкілля тощо).

ФК8. Здатність формулювати нові гіпотези та наукові задачі в галузі хімії, вибрати напрями та відповідні методи для їх розв'язання на основі розуміння сучасної проблематики досліджень в галузі хімії та беручи до уваги наявні ресурси.

ФК9. Здатність обирати оптимальні методи та методики дослідження.

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	Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни
Код	Результат навчання			
1.	Знати: 1.1 що таке мультифункціональний матеріал і які характеристики можуть дозволити відносити матеріал до мультифункціональних;	<i>Лекції</i>	<i>Контрольні роботи</i>	20%
	1.2 основні принципи і підходи до створення мультифункціональних матеріалів, методи отримання речовин і матеріалів, що мають щонайменше дві різні функціональні властивості;	<i>Лекції</i>	<i>Контрольні роботи</i>	
	1.3 сучасні світові досягнення в галузі створення мультифункціональних матеріалів;	<i>Лекції</i>	<i>Контрольні роботи</i>	
	1.4 основні методи, якими характеризують магнітні, сорбційні, спектральні, люмінесцентні, електропровідні властивості мультифункціональних матеріалів.	<i>Лекції</i>	<i>Контрольні роботи</i>	
2.	Вміти: 2.1 пояснювати причини виникнення певних магнітних, спектральних, люмінесцентних, сорбційних і електропровідних властивостей в хімічних речовинах і композитах,;	<i>Практичні заняття</i>	<i>Контрольні роботи</i>	60%
	2.2 передбачувати зміну фізичних властивостей при заданому зовнішньому впливі на речовину або при зміні її будови;	<i>Практичні заняття</i>	<i>Контрольні роботи</i>	
	2.3 прогнозувати можливість створення нового мультифункціонального матеріалу з заданими функціональними властивостями;	<i>Практичні заняття</i>	<i>Контрольні роботи</i>	
	2.4 оцінювати перспективність речовини для створення мультифункціонального матеріалу;	<i>Практичні заняття</i>	<i>Контрольні роботи</i>	
	2.5 оцінювати перспективність практичного застосування мультифункціонального матеріалу.	<i>Практичні заняття</i>	<i>Контрольні роботи</i>	
3.	Комунікація: 3.1. Працювати в групі на семінарах та практичних роботах.	<i>Практичні заняття</i>	<i>Звіти</i>	10%
4.	Автономність та Відповідальність: 4.1. Самостійно працювати з науковою та навчально-методичною літературою, здійснювати пошук та узагальнення науково-технічної інформації.	<i>Самостійна робота</i>	<i>Контрольна робота</i>	10%

6. Співвідношення результатів навчання дисципліни із програмними результатами навчання

Результати навчання дисципліни Програмні результати навчання	1	2	3	4
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, що стосуються 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 нефакхівців.		+	+	
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.			+	+
P11. Складати технічне завдання до проекту, розподіляти час, організувати свою роботу і роботу колективу, складати звіт.	+	+	+	+
P12. Оцінювати ризики у професійній діяльності та здійснювати запобіжні дії.	+	+	+	+
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.	+	+	+	+
P15. Володіння загальною методологією здійснення наукового дослідження.	+	+	+	+

7. Схема формування оцінки.

7.1 Форми оцінювання:

- семестрове оцінювання:

1. Модульна контрольна робота 1 – РН 2. – 12 балів
2. Модульна контрольна робота 2 – РН 2. – 12 балів
3. Модульна контрольна робота 3 – РН 2. – 12 балів
4. Підсумкова контрольна робота – РН 1. – 12 балів
5. Практичний звіт – РН 3. – 6 балів
6. Домашня контрольна робота. – РН 4. – 6 балів

- підсумкове оцінювання: у формі іспиту

Формою проведення іспиту є тестова контрольна робота та співбесіда на основі неї. Результатами навчання, які оцінюються в тестовій контрольній роботі, є РН 1. Максимальна кількість балів, які можуть бути отримані студентом, становить 40 балів.

- умови допуску до підсумкового іспиту:

Студент допускається до іспиту за умови виконання всіх передбачених планом практичних робіт. Студент не допускається до іспиту, якщо під час семестру набрав менше, ніж 36 балів.

7.2 Організація оцінювання:

Модульні контрольні роботи проводяться після завершення лекцій з відповідних розділів. Проміжне тестування проводиться упродовж лекційного курсу. Оцінювання роботи студента з рішення задач проводиться на практичних заняттях у формі контрольної роботи.

7.3 Шкала відповідності оцінок

Відмінно / Excellent	90-100
Добре / Good	75-89
Задовільно / Satisfactory	60-74
Незадовільно / Fail	0-59

8. Структура навчальної дисципліни.

Тематичний план лекцій та лабораторних занять

№ п/п	Номер і назва теми*	Кількість годин		
		лекції	Практичні/лабораторні заняття	самостійна робота
Змістовий модуль 1. Властивості речовин, потрібні для створення молекулярних і композитних мультифункціональних матеріалів				
1	Тема 1 Поняття "мультифункціональний матеріал" Лекція 1. Поняття "мультифункціональний матеріал" і вимоги до таких матеріалів. (2 год.) Поняття "мультифункціональний матеріал". Можливі функціональні властивості і умови їх виникнення. Загальні підходи до створення мультифункціональних матеріалів. Поєднання властивостей, що можуть знайти практичне застосування, в одній сполуці - нетривіальних магнітних властивостей, здатності сорбувати певні субстрати, електропровідності, люмінесценції. Завдання для самостійної роботи (4 год.)	2		4

	Методи чисельної характеристики магнітних, сорбційних, провідних і оптичних властивостей.			
2	<p>Тема 2. Нанопористі вуглецеві і кремнеземні матеріали Лекція 2. Принципи створення і особливості нанопористих вуглецевих і кремнеземних матеріалів. (2 год.) Підходи до створення нанопористих вуглецевих і кремнеземним сорбентів з регулярними порами. Темплатний синтез. Матричний синтез - створення "нанорешіткі". Функціоналізація нанопористих матеріалів на стадії синтезу і шляхом пост-синтетичної модифікації.</p> <p>Завдання для самостійної роботи (4 год.) Підходи до синтезу нанопористих вуглецевих і кремнеземним сорбентів з регулярними порами.</p>	2		4
3	<p>Тема 3. Пористі координаційні полімери Лекція 3. Принципи створення і особливості пористих координаційних полімерів. (2 год.) Принципи створення і особливості будови пористих координаційних полімерів. Можливості зі створення функціоналізованих пористих структур, що відкриваються завдяки використанню металвмісних "будівельних блоків" з нетривіальними фізико-хімічними (магнітними, оптичними, у тому числі люмінесцентними) властивостями.</p> <p>Завдання для самостійної роботи (4 год.) Підходи до синтезу пористих координаційних полімерів. Синтез шляхом самозборки або на основі готових "будівельних блоків".</p>	2		4
4	<p>Тема 4. Сорбційні властивості нанопористих сорбентів Лекція 4. Сорбційні властивості сорбентів вуглецевої, силікатної природи і пористих координаційних сполук. (2 год.) Особливості сорбційних властивостей сорбентів вуглецевої, силікатної природи і пористих координаційних сполук. Сорбція субстратів, які не здатні до специфічних взаємодій з каркасом сорбенту. Сорбція паливних газів - водню, метану. Фактори, що сприяють підвищенню сорбційної ємності по водню.</p> <p>Практичне заняття 1. (2 год.) Розрахунок характеристик пористої структури (питомої площі поверхні, об'єму мікро- і мезопор, характеристичної енергії адсорбції) нанопористого матеріалу по експериментальних даних. Інтерпретація результатів експерименту.</p> <p>Завдання для самостійної роботи (4 год.) Сорбційні властивості пористих і непористих речовин.</p>	2	2	4
5	<p>Тема 5. Основи молекулярного магнетизму Лекція 5. Основи молекулярного магнетизму. (2 год.) Основи молекулярного магнетизму. Поняття, які характеризують магнітні властивості координаційних сполук. Обмінні взаємодії, обмінні інтеграли. Підходи до інтерпретації магнітних характеристик координаційних сполук. Залежність параметрів магнітних взаємодій від будови молекули.</p> <p>Практичне заняття 2. (2 год.) Інтерпретація магнетохімічного експерименту. Виведення формул для розрахунків енергій спінових рівнів в системах різної топології. Розрахунок величин обмінних інтегралів і g-факторів з експериментальних даних.</p> <p>Завдання для самостійної роботи (4 год.) Магнітні властивості моноядерних сполук. Розщеплення в нульовому полі і спин-орбітальна взаємодія в іонах 3d металів.</p>	2	2	4

6	<p>Тема 6. Молекули-магніти, молекули-домени. Лекція 6. Молекули-магніти, молекули-домени. Можливості модифікації молекул-доменів для поєднання магнетизму з іншими властивостями Молекули-магніти. Однодоменний магнетизм в координаційних сполуках. Повільна магнітна релаксація в координаційних сполуках. Залежність магнітних властивостей молекул-магнітів від будови речовини. Використання молекул-магнітів як складових координаційних полімерів. Практичне заняття 2. (2 год.) Інтерпретація магнетохімічного експерименту. Розрахунок величин бар'єрів магнітної анізотропії з експериментальних даних. Завдання для самостійної роботи (4 год.) Порівняння магнітних властивостей моно- і поліядерних сполук, утворених різними парамагнітними іонами.</p>	2	2	4
7	<p>Тема 7. Створення і використання хіральних сорбентів Лекція 7. Створення і використання хіральних сорбентів. (2 год.) Принципи створення хіральних сорбентів. Вплив будови сорбента на ефективність розділення оптичних ізомерів. Залежність ефективності розділення енантіомерів від будови субстрата. Застосування хіральних сорбентів для розділення оптичних ізомерів. Практичне заняття 2. (2 год.) Розрахунок констант адсорбції субстратів і параметрів селективності сорбції по даних енергії зв'язування субстратів сайтами сорбції. Завдання для самостійної роботи (4 год.) Методи розділення оптичних ізомерів без використання хіральних сорбентів і з використанням таких сорбентів.</p>	2	2	4
Модульна контрольна робота 1				
Змістовний модуль 2. Створення мультифункціональних матеріалів молекулярної будови				
8	<p>Тема 8. Мультифункціональні матеріали зі спін-кросовером Лекція 8. Координаційні сполуки зі спін-кросовером як основа створення матеріалів з керованими магнітними і оптичними властивостями. «Перемикання» магнітних і оптичних властивостей при зміні температури або взаємодії з іншими речовинами (2 год.) Спін-кросовер в координаційних сполуках. Причини виникнення спін-кросоверу, математичний опис цього явища. Залежність параметрів спін-кросоверу від наявності субстратів. Спін-кросовер, спричинений опроміненням. Спін-кросовер в поліядерних сполуках. Практичне заняття 3. (2 год.) Розрахунок характеристик спін-кросоверу з експериментальних даних. Завдання для самостійної роботи (4 год.) Порівняння спін кросоверу в сполуках, утворених різними парамагнітними іонами.</p>	2	2	4
9	<p>Тема 9. Зміна магнітних властивостей координаційних сполук при заміні молекул-гостей в порах Лекція 9. Вплив адсорбції/десорбції субстратів на магнітні властивості координаційних полімерів. (2 год.) Структурна перебудова пористих координаційних полімерів при сорбції субстратів, здатних до утворення водневих зв'язків зі</p>	2	2	4

	<p>структурними елементами пористих координаційних полімерів. Прояв структурних перебудов, спричинених адсорбцією і десорбцією діамантних субстратів у зміні спектральних і магнітних характеристик пористих координаційних полімерів. Пористі координаційні полімери з регульованими магнітним властивостями.</p> <p>Практичне заняття 2. (2 год.) Аналіз і інтерпретація ізотерм адсорбції сполук, в яких відбувається структурна перебудова при заповненні пор субстратами.</p> <p>Завдання для самостійної роботи (4 год.) Методи синтезу конформаційно-жорстких і конформаційно-лабільних координаційних полімерів.</p>			
10	<p>Тема 10. Зміна спектральних і люмінесцентних характеристик речовин під дією зовнішніх факторів Лекція 10. Зміна спектральних характеристик речовин при зміні температури або в залежності від наявності субстратів. (2 год.) Матеріали, здатні до оборотної і необоротної зміни спектральних характеристик при зміні температури. Створення сенсорів температури і індикаторів наявності заданих субстратів, що працюють за принципом зміни забарвлення. Підходи до детектування заданих субстратів у повітрі. Створення матеріалів з регульованою люмінесценцією. Посиленні і гасіння люмінесценції при взаємодії з певними субстратами. Люмінесцентні сенсори. "Електронний ніс".</p> <p>Практичне заняття 8 (2 год.) Інтерпретація спектрів координаційних сполук</p> <p>Завдання для самостійної роботи (4 год.) Сольватохромізм - зміна спектральних характеристик (забарвлення) речовин при зміні полярності середовища.</p>	2	2	4
11	<p>Тема 11. Поєднання магнітних і електропровідних властивостей або оптичної активності в координаційних сполуках Лекція 11. Поєднання магнітних і електропровідних властивостей або оптичної активності в координаційних сполуках (2 год.) Принципи створення електропровідних матеріалів на основі органічних і координаційних сполук. Протонна провідність пористих координаційних полімерів. Підходи до поєднання магнітних і електропровідних властивостей в координаційних сполуках. Поєднання оптичної активності і нетривіальних магнітних властивостей координаційних сполук. Магнетохіральний дихроїзм. Зміна здатності сполуки до обертання поляризованого світла при її переході в магнітно-впорядкований стан.</p> <p>Практичне заняття 6 (2 год.) Інтерпретація експериментальних даних: визначення параметрів, що характеризують електропровідність органічних і гібридних матеріалів.</p> <p>Завдання для самостійної роботи (4 год.) Підходи до створення провідників на основі органічних і координаційних сполук. Підходи до введення хіральної функції в координаційних сполуках для набуття оптичної активності.</p>	2	2	4
12	<p>Тема 12. Поєднання парамагнетизму і люмінесценції Лекція 12. Підходи до поєднання парамагнетизму і люмінесценції в координаційних сполуках та композитах (2</p>	2		4

	<p>год.) Проблема поєднання парамагнетизму і люмінесценції. Механізми гасіння люмінесценції. Створення молекулярних люмінесцентних парамагнітних систем. Люмінесценція комплексів лантанодів. Парамагнітні координаційні полімери, здатні до люмінесценції, та їх взаємодія з молекулами-гостями. Поєднання магнітної і люмінесцентної компонент через "ізолюючий" шар. Завдання для самостійної роботи (4 год.) Електронні спектри і спектри люмінесценції координаційних і органічних сполук.</p>			
	<i>Модульна контрольна робота 2</i>			
Змістовний модуль 3. Створення мультифункціональних наночастинок і композитів				
13	<p>Тема 13. Композитні матеріали на основі магнітних наночастинок. Засоби доставки лікарських препаратів Лекція 13. Композитні матеріали на основі магнітних наночастинок. (2 год.) Основи магнетизму наночастинок. Композитні матеріали на основі магнітних наночастинок. Інкорпорування магнітних наночастинок в полімерні матриці. Пористі магнітні матеріали (магнітні сорбенти) на основі магнітних наночастинок. Транспорт лікарських препаратів магнітними частинками. Практичне заняття 5. (2 год.) Інтерпретація експериментальних даних: розрахунок розміру наночастинок з аналізу уширення рефлексів на рентгеновських дифрактограмах і розрахунок розподілу наночастинок по розміру за даними електронної мікроскопії. Визначення магнітних характеристик наночастинок і аналіз залежності магнітних характеристик (намагніченості насичення, коерцитивної сили) від розміру наночастинок. Завдання для самостійної роботи (4 год.) Вплив розміру частинок на їх фізичні і хімічні властивості.</p>	2	2	4
14	<p>Тема 14. Біфункціональні каталізатори Лекція 14. Прояв біфункціональності у каталізі. (1 год.) Прояв біфункціональності у каталізі. Каталізатори, іммобілізовані на магнітних носіях. Каталітичні властивості систем з активними центрами в пористих матрицях. "Ефект клітини" - реакція в закритому "нанореакторі". Відсіювання молекул за розміром завдяки створенню просторових ускладнень при доступі до активного центру каталізатору. Основи асиметричного каталізу. Практичне заняття 9 (2 год.) Розгляд і обговорення підходів до створення переваг для заданої реакції на певному каталітичному центрі шляхом обмеження доступу небажаних субстратів. Підходи до оцінки енергетичного бар'єру дифузії молекул в порах. Завдання для самостійної роботи (6 год.) Каталітичні властивості координаційних сполук в гомо- і гетерогенних умовах.</p>	1	2	6
15	<p>Тема 15. Нові підходи до формування виробів з функціональних матеріалів 15. Підходи до створення пристроїв із використанням нових матеріалів. Мембрани. 3D друк елементів пристроїв із використанням нових матеріалів (1 год)</p>	1		10

	Принцип 3D друку. 3D друк каталізаторів. 3D друк мембран. 3D друк носіїв для хроматографії. 3D друк електрохімічної комірки. 3D друк лабораторного обладнання.			
16	<p>Тема 16. Досягнення у галузі створення "молекулярних машин".</p> <p>Лекція 16. Досягнення у галузі створення "молекулярних машин" (1 год.)</p> <p>Досягнення у галузі створення "молекулярних машин". Моделювання механізмів із застосуванням окремих молекул. Створення і перспективи використання "нанороботів".</p> <p>Завдання для самостійної роботи (10 год.)</p> <p>Аналіз відомих прикладів "молекулярних машин" - принципи створення і принципи роботи.</p>	1		10
17	<p>Тема 17. Застосування функціональних матеріалів в медицині і біохімії. Багатофункціональні біомолекули.</p> <p>Лекція 17. Застосування функціональних матеріалів в медицині і біохімії. (1 год.)</p> <p>Застосування функціоналізованих пористих матеріалів, магнітних і люмінесцентних сорбентів на основі наночастинок в медицині і біохімії. Транспорт лікарських препаратів, гіпертермія, агенти для контрастування в томографії, магнітні сорбенти для вилучення молекул біологічного походження і клітин. Регулювання властивостей ферментних систем і білків при освітленні.</p> <p>Завдання для самостійної роботи (10 год.)</p> <p>Порівняння можливостей, які надають функціоналізовані магнітні наночастинок в медицині (в галузі діагностики захворювань), з традиційними методами.</p>	1		10
	Модульна контрольна робота 3			
	ВСЬОГО	30	20	100

Загальний обсяг **150** год. , в тому числі:

Лекцій – **30** год.

Лабораторні заняття – **10** год.

Практичні заняття – **10** год.

Самостійна робота - **100** год..

9. Рекомендовані літературні джерела:

1. M. Gurka (The Physics of Multifunctional Materials: Concepts, Materials, Applications . Destech Pubns Inc., 2018
2. A. D. Ferreira, P. J. R. O. Nóvoa, A. T. Marques, Multifunctional Material Systems: A state-of-the-art review, Composite Structures, 2016, 151, 3-35
3. S. Qiu, G. Zhu, Molecular engineering for synthesizing novel structures of metal–organic frameworks with multifunctional properties, *Coord. Chem. Rev.*, 2009, 253, 2891–2911.
4. C. Janiak, J. K. Vieth, MOFs, MILs and more: concepts, properties and applications for porous coordination networks (PCNs), *New J. Chem.* 2010, 34, 2366–2388.
5. L. E. Kreno, K. Leong, O. K. Farha, M. Allendorf, R. P. Van Duyne, J. T. Hupp, Metal–Organic Framework Materials as Chemical Sensors, *Chem. Rev.* 2012, 112, 1105–1125.
6. J. Gao, H. Gu, B. Xu, Multifunctional Magnetic Nanoparticles: Design, Synthesis, and Biomedical Applications, *Acc. Chem. Res.*, 2009, 42, 1097-1107.

7. S. Shylesh, V. Schünemann, W. R. Thiel, Magnetically Separable Nanocatalysts: Bridges between Homogeneous and Heterogeneous Catalysis, *Angew. Chem. Int. Ed.* 2010, 49, 3428 – 3459.
8. S. Pramanik, Z. Hu, X. Zhang, C. Zheng, S. Kelly, J. Li, A Systematic Study of Fluorescence-Based Detection of Nitroexplosives and Other Aromatics in the Vapor Phase by Microporous Metal–Organic Frameworks, *Chem. Eur. J.*, 2013, 19, 15964–15971.
9. T. Doussineau, A. Schulz, A. Lapresta-Fernandez, A. Moro, S. Körsten, S. Trupp, G. J. Mohr, On the Design of Fluorescent Ratiometric Nanosensors, *Chem. Eur. J.* 2010, 16, 10290 – 10299.
10. S. V. Kolotilov, M. A. Kiskin, I. L. Eremenko, V. M. Novotortsev The Influence of Diamagnetic Substrates Absorption on Magnetic Properties of Porous Coordination Polymers *Curr. Inorg. Chem.*, 2013, 3, 144–160.

10. Додаткові джерела та інформація:

1. J.-M. Lehn, *Supramolecular Chemistry: Concepts and Perspectives*. Wiley 1995
2. R.S.Drago, *Physical methods for chemists*, Saunders College Publishing; 2nd edition. 750 P.
3. A. Lever, *Inorganic Electronic Spectroscopy*, Elsevier 1983
4. J. W. Steed, J. L. Atwood, *Supramolecular Chemistry*. Wiley; 2nd edition, 2009.
5. В.В.Скопенко, Л.І.Савранський. Координаційна хімія. К.: Либідь, 1997.
6. R. E. Morris, P. S. Wheatley, Gas Storage in Nanoporous Materials, *Angew. Chem. Int. Ed.* 2008, 47, 4966 – 4981
7. L. Ouahab, T. Enoki, Multiproperty Molecular Materials: TTF-Based Conducting and Magnetic Molecular Materials, *Eur. J. Inorg. Chem.* 2004, 933-941.
8. S. J. Gregg, K. S. W. Sing: Adsorption, Surface Area and Porosity. Academic Press, London, New York 1967. 371 P.

ЗАВДАННЯ МОДУЛЬНОЇ КОНТРОЛЬНОЇ РОБОТИ

Модуль № 1

1. Які властивості мають бути у матеріалу, щоб його можна було вважати мультифункціональним матеріалом?
2. Методи синтезу пористих матеріалів. Чисельні характеристики пористої структури і експериментальні методи їх визначення.
3. Особливості пористих координаційних полімерів у порівнянні з сорбентами вуглецевої і силікатної природи, що є важливими для створення мультифункціональних матеріалів.
4. Обмінні взаємодії парамагнітних центрів в поліядерних сполуках і координаційних полімерах - умови виникнення, математичний опис. Які нові властивості виникають через існування обмінних взаємодій?
5. Явище "молекула-магніт" - умови виникнення, чисельні характеристики. Які фактори впливають на виникнення цього явища?
6. Від чого залежать параметри, що характеризують обмінні взаємодії в поліядерних сполуках?
7. Умови виникнення спін-кросоверу в координаційних сполуках і фактори, що впливають на його характеристики.
8. Підходи до створення хіральных сорбентів і сфери їх застосування.

Модуль № 2

1. Вплив адсорбції/десорбції субстратів на спектральні і магнітні властивості координаційних полімерів, механізми такого впливу.
2. Композитні матеріали на основі магнітних наночастинок. Властивості таких композитів у порівнянні з наночастинками або немагнітними пористими матеріалами.
3. Якими методами досягається поєднання заданих магнітних і електропровідних властивостей в координаційних сполуках?

4. Якими методами досягається поєднання заданих магнітних властивостей координаційних сполук і здатності обертати поляризоване світло?
5. Нові ефекти у сполук і композитів, в яких співіснує феромагнітне впорядкування спінів і електропровідність. В чому причина виникнення цих ефектів?
6. Нові ефекти у сполук і композитів, в яких співіснує феромагнітне впорядкування спінів і здатність обертати світло. В чому причина виникнення цих ефектів?
7. Можливі причини зміни спектральних характеристик речовини при зміні температури або при взаємодії з певними субстратами. Як це явище може бути використане на практиці?
8. Можливі причини зміни люмінесценції речовини при взаємодії з певними субстратами. Як це явище може бути використане на практиці?

Модуль № 3

1. Особливості магнетизму наночастинок у порівнянні з масивними магнітами і поліядерними сполуками. Магнітні властивості наночастинок, що забезпечують можливість їх практичного використання.
2. Створення композитних матеріалів на основі магнітних наночастинок. Поєднання різних властивостей в композитах.
3. Які особливості має каталізатор, активні центри якого розташовано в пористих матрицях, у порівнянні з масивними каталізаторами?
4. Можливості використання 3D друку для створення виробів з нових функціональних матеріалів.
5. Що таке "молекулярні машини" і як вони можуть бути створені? Рушійні сили для руху "молекулярних машин".
6. Які мультифункціональні матеріали можуть бути застосовані в медицині і біохімії? Опишіть переваги таких матеріалів.

Питання на іспит/залік

1. Підходи до створення мультифункціональних матеріалів. Практичні задачі, що можуть бути вирішені при використанні таких матеріалів.
2. Способи створення сполук і композитів, магнітні властивості яких змінюються при адсорбції або десорбції діамагнітних субстратів. Можливі причини таких змін, можливості застосування таких систем.
3. Порівняйте матеріали, магнітні властивості яких можуть змінюватися внаслідок введення або видалення молекул-гостей з причини зміни обмінних взаємодій або з причини спінкросоверу.
4. Порівняйте можливості застосування пористих магнітних матеріалів на основі координаційних полімерів або на основі композитів феро- чи ферімагнітних наночастинок.
5. Способи створення сорбентів, які можуть бути вилучені з середовища під дією зовнішнього магнітного поля. Можливості, які надає використання таких композитів у порівнянні з "немагнітними" сорбентами.
6. Способи створення сполук, забарвлення яких змінюється під впливом зовнішніх факторів. Можливі причини таких змін та можливості застосування таких систем.
7. Способи створення сполук, люмінесцентні властивості яких змінюються під впливом зовнішніх факторів. Вкажіть можливі причини таких змін та опишіть можливості застосування таких систем.
8. Як може проявлятися багатофункціональність в каталізі? Наведіть приклади та опишіть переваги біфункціональних каталізаторів.
9. Створення люмінесцентних композитів та електропровідних магнітних матеріалів. Причини, з яких може змінюватися електропровідність матеріалу під дією зовнішнього впливу.
10. Можливості 3D друку для формування виробів з функціональних матеріалів.

11. Застосування мультифункціональних матеріалів в медицині і біохімії.
12. Основні принципи створення "молекулярних машин".
13. Механізми, за якими магнітні властивості матеріалу можуть змінюватися під дією світла, та навпаки, оптичні властивості можуть регулюватися під дією магнітного поля.
14. Принципи створення хіральних сорбентів і хіральних магнітних матеріалів. Які нові ефекти можна знайти у випадку таких матеріалів у порівнянні з нехіральними аналогами?