

КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

Інститут високих технологій

Кафедра супрамолекулярної хімії

Кафедра теоретичних основ високих технологій



**РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ
ЕЛЕКТРОННА БУДОВА І ФОТОНІКА МОЛЕКУЛ**

для студентів

галузь знань 10 Природничі науки
спеціальність **102 Хімія**
освітній рівень **магістр**
освітня програма **Високі технології (Хемоінформатика)**

вид дисципліни обов'язкова

Форма навчання	денна
Навчальний рік	2021/2022
Семестр	2
Кількість кредитів ECTS	3.0
Мова викладання, навчання та оцінювання	українська
Форма заключного контролю	екзамен

Викладачі: 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

Зав. кафедри супрамолекулярної хімії

 Ігор КОМАРОВ

Протокол № 7 від «25» 02 2021 р.

ЗАТВЕРДЖЕНО

Зав. кафедри теоретичних основ високих технологій

 Валерій ЛОЗОВСЬКИЙ

Протокол № 11 від «03» 03 2021 р.

Схвалено науково - методичною комісією Інституту високих технологій

Протокол від «05» 03 2021 року № 3

Голова науково-методичної комісії  (Наталія РУСІНЧУК)

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 новітніх технологій оптоелектроніки, нанофізики, лазерної техніки, голографії, фотовольтаїки, біології та медицини.

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

Програма курсу побудована на засадах інтеграції та синтезу попередньо набутих знань. Магістри можуть успішно засвоїти дану дисципліну за умови наявності у них базових знань з хімії і фізики.

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, фотовольтаїки, 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. Остання частина курсу буде присвячена нанофотоніці – науці, що вивчає закономірності виникнення та розповсюдження світла в нанооб'єктах; нанолазери; підсилення поверхнею розсіювання світла, мікроскопія нанооб'єктів, мета матеріали, та інше.

4. Завдання дисципліни:

Дисципліна забезпечує набуття студентами таких компетентностей:

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.

ЗК 6. Здатність генерувати нові ідеї (креативність).

ЗК7. Навички використання інформаційних і комунікаційних технологій.

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

ЗК 12. Здатність працювати автономно.

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

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.

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 (за необхідності)	Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни
Код	Результат навчання			
1.1	Знати можливості застосування фотоніки в хімії як для вирішення науково - дослідних, так і прикладних задач, зокрема закономірності, що зв'язують будову речовини з її фотоактивністю	Лекції	Модульна контрольна робота: 4 запитання	15%
1.2	Знати основні квантово-хімічні методи розрахунку електронної і стеричної будови молекул.	Лекції	Модульна контрольна робота: 3 запитання	10%
1.3	Знати прогнозуючу здатність фотоніки при цілеспрямованому синтезі речовин з заданими спектрально-люмінесцентними властивостями.	Лекції	Модульна контрольна робота: 1-2 запитання	5%
1.4	Знати перелік задач сучасної біології, до розв'язання яких застосовуються специфічні математичні методи	Самостійна робота студента	Доповідь під час інтерактивних лекцій: зміст	5%
2.1	Вміти застосовувати спеціальне програмне забезпечення для розв'язання задач фотоніки молекул 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 і нанофотоніки 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	Програмні результати навчання							
	1.1	1.2	1.3	1.4	2.1	3.1	4.1	
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.	+	+	+	+				
P8. Вміти ясно і однозначно донести результати власного дослідження до фахової аудиторії та/або нефакхівців.						+	+	

P11. Скласти технічне завдання до проекту, розподіляти час, організувати свою роботу і роботу колективу, скласти звіт.					+	+	+
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.	+	+	+	+			

7. Схема формування оцінки.

7.1 Форми оцінювання студентів:

- семестрове оцінювання:

1. Модульна контрольна робота: 40 балів/24 бали.
 2. Самостійна семестрова робота: 48 балів/32 бали.
 3. Доповідь під час лекції: 12 балів/6 балів.
- Усього: 100 балів/60 балів.

- підсумкове оцінювання: відсутнє.

Оцінювання	Min	Max
Семестрове оцінювання	60	100
Всього	60	100

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. Кожне завдання складається з 8 частин. Кожна окрема частина присвячена темі окремого практичного заняття з другого по дев'яте. Кожна частина оцінюється в 6 балів: 4 бали за правильність розв'язку та 2 бали за обґрунтування методів розв'язку, викладене у звіті. У випадку помилок у розв'язку завдання студенту дозволяється їх виправити після перевірки. Мінімальну кількість балів студент може отримати у випадку правильного розв'язання усіх завдань без представлення їх письмового обґрунтування.

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

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

№ п/п	Назва теми	Кількість годин		
		лекції	практичні	самостійна робота
Розділ 1				
1	Вступ. Тема 1 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.	1		
2	Тема 2 Фізика і хімія зору. Фізична теорія кольоровості. Адитивний та субтрактивний методи одержання кольору.	1		
	Самостійна робота. Фотосинтез у природі і живих організмах.			10
3	Тема 3. Фотосенсибілізація. Чорно-білий і кольоровий фотографічний процес. Фізико-хімія реєструвальних середовищ сучасних оптичних лазерних дисків.	1		
4	Тема 4. Поняття і закони фотохімії. Енергетичні та хвильові характеристики. Взаємозв'язок між ними. Закон Ламберта - Бугера - Бера. Принцип Франка - Кондона. Інтенсивність вібронних переходів.	1		
	Практична робота. Обробка експериментальних електронних спектрів поглинання молекул. Визначення екстинкцій і сили осцилятора.		2	
	Практична робота. Перевірка закону Ламберта - Бугера – Бера різноманітних хромофорних сполук.			
5	Тема 5. 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.	1		
	Самостійна робота. Нелінійно-оптичні ефекти в хромофорах. Застосування дфотонних процесів для діагностики аномалій біомолекул.			10
Розділ 2				
6	Тема 6. Діаграма Яблонського. Синглетний і	1		

	триплетний стани. Дезактивація збудженого стану. Випромінювальні та безвипромінювальні процеси. Коливальна релаксація. Внутрішня та інтеркомбінаційна конверсія. Квантовий вихід люмінесценції.			
	Практична робота. Експериментальне визначення відносного квантового вихода флуоресценції.		1	
7	Тема 7. Перенос енергії. Динамічне та статичне гасіння люмінесценції. Кінетика люмінесценції, Рівняння Штерна - Фольмера. Фотоперенос електрону. Прикладні аспекти переносу електрону та енергії.	1		
8	Тема 8 Фотоперенос електрону. Прикладні аспекти переносу електрону та енергії.	1		
	Практична робота. Експериментальне визначення констант Штерна-Фольмера на прикладі молекул ДНК.		1	
	Самостійна робота. Біохемілюмінесценція. Механізм дії. Розповсюдження у природі.			5
9	Тема 9. 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.	1		
	Практична робота. Вирішення задач по фотоніці основних класів органічних і неорганічних сполук.		2	
10	Тема 10. Електростатичні та електродинамічні міжмолекулярні взаємодії. Позитивна, негативна та обернена сольватохромія і сольватофлуорохромія.	1		
11	Тема 11. Асоціація молекул. Н- та J- агрегати. Фотодимери, ексимери та ексиплекси. Комплекси з переносом заряду.	1		
	Розділ 3			
12	Тема 12. Сенсифікація і десенсифікація синглетного кисню. Фотодинамічна терапія. Шляхи підвищення фотостабільності функціональних матеріалів на основі органічних сполук.	1		
	Самостійна робота. 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			15
13	Тема 13. Критерії пошуку органічних сполук для активних лазерних середовищ, модуляції	1		

	лазерного випромінювання, фотовольтаїки, електролюмінесценції, голографії та флуоресцентних зондів для біології та медицини.			
	Розділ 4			
14	Тема 14. Електрони та електромагнітні хвилі в наноматеріалах: Хвильова оптика і хвильова механіка. Еванесцентні хвилі та тунелювання. Резонансне тунелювання в квантовій механіці та оптиці. Напівпровідникові нанокристали. Квантові точки.	1		
15	Тема 15. Металеві наночастинки і наноструктури: Оптичний відгук металів. Плазмони. Оптичні властивості металевих наночастинок. Поглинання і розсіювання світла, що залежить від розміру об'єкта. Явище резонансного підсилення розсіювання поверхнею з наноструктурами (SERS)	1		
	Практична робота. Вивчення принципів поглинання і розсіювання випромінювання наночастинок в залежності від параметрів оточуючого середовища, діаметра частинки і типу металу.		2	
16	Тема 16. Світло в періодичних і неперіодичних нано структурах: Фотонні кристали. Зонна структура у тривимірної решітки. Теорія багатократного розсіювання світла в періодичних структурах. Періодичні структури в природі. Швидкість світла в фотонних кристалах. Властивості фотонних кристалів. Закон 1/L, як оптичний аналог закону Ома. Когерентне розсіювання назад.	1		
	Самостійна робота. Андерсонівська локалізація світла. Світло у фрактальних структурах. Фільтри Крістіансена і лазери Летохова.			7
	Практична робота. Вивчення фізики одновимірних фотонних кристалів і параметрів, що впливають на їх спектральні характеристики (в системі MatLab).		2	
17	Тема 17. Плазмонне підсилення вторинного випромінювання: Класифікація вторинного випромінювання. Принципи підсилення випромінювання та розсіювання світла наноструктурами. Локальна густина станів в плазмонних наноструктурах. «Горячі точки» наноструктурах із плазмонами. Підсилення раманівського розсіювання світла в наноструктурах метал-діелектрик. Підсилення люмінесценції в наноструктурах метал-діелектрик	1		
18	Тема 18. Нанорозмірні лазери: Принципи побудови нано лазерів. Формування стабільного	1		

	резонатора. VCSEL лазери. Безпорогові нанолазери. Лазери на нанодротиках. Лазери на плазмонному резонансі. Лазери на фотонних кристалах.			
19	Тема 19. Мікроскопія нанооб'єктів: Вступ до мікроскопії. Принципи мікроскопії темного поля, флуоресцентної мікроскопії та конфокальної мікроскопії. Сучасна фазово-контрастна мікроскопія. STED (stimulated emission depletion) мікроскопія. Інтерферометрична спектроскопія фази об'єкту.	1		
	Самостійна робота. Мікроскопія нанооб'єктів з використанням другої гармоніки.			6
20	Тема 20. Лінійні оптичні методи вивчення поверхневих наночастинок та наночастинок: Еліпсометрія шару речовини, що менший за довжину світла. Спектроскопічна еліпсометрія. Метод диференційного відбиття від поверхні. Спектроскопія фото поглинання поверхнею. Сучасна спектроскопія пропускання світла в нанофізиці. Спектроскопія фото поглинання поверхнею. Сучасна спектроскопія пропускання світла в нанофізиці. Метаматеріали.	1		
	Самостійна робота. Методи розрахунків основних властивостей метаматеріалів.			7
	ВСЬОГО	20	10	60

Загальний обсяг 90 год., в тому числі:

Лекцій – **20 год.**

Практичні заняття - **10 год.**

Самостійна робота - **60 год.**

9. Рекомендовані джерела:

Основна:

1. T. H. James, The Theory of the Photographic Process, 4th edn, Macmillan, New York, 1977.
2. Topics in Applied Physics. Vol. 1. Laser dyes (Edited by F. P. Schafer). Third Enlarged and Revised Edition. Springer-Verlag, 1990.
3. 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.
4. А.А.Ищенко. Строение и спектрально-люминесцентные свойства полиметиновых красителей. Киев: Наукова думка, 1994.
5. Christian Reichardt. Solvents and Solvent Effects in Organic Chemistry (Fourth, Updated and Enlarged Edition) WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim, 2011. - 598p.
6. Н.А.Давиденко, А.А.Ищенко, Н.Г.Кувшинский. Фотоника молекулярных полупроводниковых композитов на основе органических красителей. Киев: Наукова думка, 2005. - 296с.
7. Joseph R. Lakowicz. Principles of Fluorescence Spectroscopy. New York: Springer Science+Business Media, 2006.- 954p.
8. S.-H.Kim (Ed.). Functional Dyes. Elsevier, Amsterdam, 2006.

9. A. A. Ishchenko and G. P. Grabchuk. Physical and chemical problems of the creation of photostable converters of light energy on the basis of dyed polymers (Review). - Theoretical and Experimental Chemistry. 2009. Vol. 45. No. 3. P. 143 - 167.
10. Jonathan P. Celli, Bryan Q. Spring, Imran Rizvi, Conor L. Evans, Kimberley S. Samkoe, Sarika Verma, Brian W. Pogue, and Tayyaba Hasan. Imaging and Photodynamic Therapy: Mechanisms, Monitoring, and Optimization. Chem. Rev. 2010. Vol. 110. No.5. P.2795 – 2838.
11. Organic light emitting diode – material process and devices (Edited by Seung Hwan Ko). Published by InTech, Rijeka, Croatia, 2011.
12. 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.
13. 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.
14. А.Г. Білоус, О.О. Іщенко, О.І. В'юнов, П.В. Торчинюк. Одержання та властивості плівок органо-неорганічних перовскитів MAPbX₃ (MA = CH₃NH₂; X = Cl, Br, I) для сонячних елементів (огляд). Теоретична і експериментальна хімія. 2020. Т.56. №6. С.333 – 357.
15. А.В.Кулініч, О.О.Іщенко. Електронна будова та спектрально-флуоресцентні властивості мероціанінів. Київ: Наукова думка, 2021.
16. Paras N. Prasad, "Nanophotonics", A John Wiley&Sons Inc. 2004, 418 p..
17. Paras N. Prasad, "Introduction to Biophotonics", A John Wiley&Sons Inc. 2003, 619 p.
18. Jin Zhong Zhang, "Optical properties and spectroscopy of nanomaterials", WordScientific, 2009, 383 p.
19. V.G. Bordo, H.-G. Rubahn "Optics and spectroscopy at surfaces and interfaces", Wiley-VCH Verlag GmbH&KGaA, 2005, 283 p.

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.
4. Michael Quinten, "Optical properties of nanoparticles", Wiley-VCH Verlag GmbH&KGaA, 2011, 504 p.

10. Додаткові ресурси:

1. www.chem-finder.camsoft.com
2. www.chembank.broad.harvard.edu
3. www.chemspider.com
4. www.nanophotonics-journal.com