

НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ  
Державна наукова установа «Науково-технологічний комплекс  
«Інститут монокристалів» НАН України»

«ЗАТВЕРДЖУЮ»

Генеральний директор  
академік НАН України

  
В. П. Семиноженко

«14» березня 2019 р.



Робоча програма навчальної дисципліни

**Хімія функціональних матеріалів**

(назва навчальної дисципліни)

рівень вищої освіти	третій (освітньо-науковий) рівень
галузь знань	10 – природничі науки
напрямок підготовки	102 – хімія

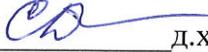
Харків 2020

Програму рекомендовано до затвердження вченою радою НТК ІМК НАНУ

«14» березня 2019 року, протокол № 5

РОЗРОБНИКИ ПРОГРАМИ:

Чергинець Віктор Леонідович,	доктор хімічних наук, професор;
Кривошей Олександр Ігоревич,	кандидат хімічних наук, старший дослідник;
Татарець Анатолій Леонідович,	кандидат хімічних наук, старший дослідник.

Гарант освітньо-наукової програми «Хімія» \_\_\_\_\_  д.х.н., проф. С.М. Десенко

## ВСТУП

Програма навчальної дисципліни «Функціональні матеріали» складена відповідно до освітньо-наукової програми підготовки третього рівня

(назва рівня вищої освіти, освітньо-кваліфікаційного рівня)

### 1. Опис навчальної дисципліни

1.1. Мета курсу: сформувати у аспірантів фундаментальну базу з сучасного хімічного матеріалознавства (процеси підготовка сировини і вихідних реагентів для одержання монокристалів, кераміки, тонких плівок, рідкокристалічних матеріалів, органічних люмінофорів, барвників; особливості процесів одержання функціональних матеріалів і вплив умов синтезу/одержання на експлуатаційні властивості).

1.2. Основним завданням вивчення дисципліни є: ознайомлення аспірантів з сучасними тенденціями у розробці функціональних матеріалів, методів їх одержання і дослідження.

1.3. Кількість кредитів **11**.

1.4. Загальна кількість годин **330**.

1.5. Характеристика навчальної дисципліни: дисципліна за вибором, денна форма навчання, рік підготовки 2-й, семестри 3-й, 4-й. Структура дисципліни: лекції - 60 год, практичні (семінарські) заняття – 20 год, самостійна робота – 310 год.

Семестр	
3-й	4-й
Лекції	
30 год	30 год
Практичні, семінарські заняття	
12 год	12 год
Самостійна робота	
123 год	123 год
Форма контролю	
залік	екзамен

1.6. Заплановані результати навчання

Після проходження даного курсу слухач повинен:

**знати:** основи сучасного хімічного матеріалознавства, основні форми застосування і тенденції подальшого розвитку функціональних матеріалів у науці, техніці і промисловості (монокристали, кераміка, плівки, скло, рідкокристалічні матеріали, органічні люмінофори, барвники), наукові основи та особливості методів синтезу/одержання функціональних матеріалів, основні експлуатаційні параметри функціональних матеріалів, їх зв'язок з властивостями вихідних матеріалів і можливості подальшої оптимізації;

**вміти:** використовувати фундаментальні знання в галузі неорганічної, органічної та фізичної хімії для проведення процесів синтезу/одержання функціональних матеріалів, оволодіти методиками синтезу і очищення вихідних речовин, знати особливості основних технологічних прийомів одержання функціональних матеріалів.

## 2. Тематичний план навчальної дисципліни

### Розділ 1. Неорганічні матеріали

#### Лекції:

- Тема 1. Сучасні функціональні матеріали. Основні форми застосування, вимоги до чистоти. Основні шляхи глибокого очищення сировини для одержання функціональних матеріалів (ректифікація, зонна плавка, спрямована кристалізація, екстракція, сорбційне очищення) і їх особливості.
- Тема 2. Монокристали. Особливості, основні переваги. Дефекти в монокристалах. Методи вирощування монокристалів.
- Тема 3. Кераміка. Різновиди кераміки. Способи одержання (твердофазний синтез, гаряче пресування, золь-гель процес, співосадження). Теоретичні основи сучасних керамічних технологій.
- Тема 4. Тонкі плівки. Класифікація, способи одержання, властивості, застосування.
- Тема 5. Скло. Фізико-хімічні характеристики скла. Вплив хімічного складу на властивості. Застосування.
- Тема 6. Сцинтилятори. Основні поняття. Застосування. Основні критерії, що визначають придатність матеріалу для певного практичного застосування. Найпоширеніші сцинтилятори, їх технічні характеристики.
- Тема 7. Екологічно чисті технології одержання і переробки неорганічних матеріалів з застосування високотемпературних іонних розчинників. Переробка оксидної сировини з метою виділення і очищення рідкісноземельних металів і актиноїдів. Одержання активних металів і сплавів.

### Розділ 2. Рідкокристалічні матеріали

#### Лекції:

- Тема 8. Мезоморфізм органічних сполук. Мезоморфний (рідкокристалічний) стан речовини. Термотропні і ліотропні рідкі кристали (РК). Особливості молекулярної структури термотропних РК. Мономолекулярні, дендрімерні, еластомерні, полімерні РК. Власні та індуквані РК матеріали. Ахіральні і хіральні мезофази. Поліморфізм в термотропних РК. Оптичні властивості орієнтованих РК. Характеристичні оптичні текстури. Мезофази нематичного типу: нематичні, холестеричні, «блакитні» фази. Мезофази смектичного типу: смектичні фази, син- та антиклинні мезофази, фази TGB, «бананові» фази. Дискотичні і колончасті мезофази. Принцип мікросегрегації. «М'яка матерія».
- Тема 9. Нематичні і холестеричні рідкокристалічні матеріали. Нематична мезофаза у електричному полі. Переходи Фредерікса у нематичних РК. Твіст-ефект. Нематичні РК з позитивною та негативною діелектричною анізотропією. Практично значущі властивості холестеричних РК. Власні та індуквані холестеричні РК матеріали. Зв'язок між структурою хіральних органічних сполук та їх здатністю до індукції холестеричної мезофази. Ступінь хіральності. Тензор спіральності. Фотохромні хіральні компоненти індукваних РК. Молекулярні мотори. Електрооптичні властивості «блакитних» фаз.
- Тема 10. Сегнетоелектричні рідкокристалічні матеріали. Сегнето- та антисегнетоелектричні властивості смектичних РК. Ефект Кларка-Лагервола. Електрооптичні ефекти у смектичних РК з деформованою гелікоїдальною структурою. Сегнетоелектричні РК недисплейного призначення: електромеханічний ефект, п'єзо- та флектоелектричний ефекти. Ключові практичні параметри сегнетоелектричних РК матеріалів. Власні та індуквані РК сегнетоелектрики. Зв'язок між структурою хіральних органічних сполук та властивостями індукваних ними РК сегнетоелектриків.
- Тема 11. Гібридні рідкокристалічні матеріали. Модифікація властивостей РК за рахунок додавання неорганічних речовин. Дисперсії наночастинок у РК: магнітні наночастинок, сегнетоелектричні наночастинок, наночастинок благородних металів,

напівпровідникові наночастинки. Стабілізація дисперсій наночастинок у РК. Промезогенні ліганди.

#### Практичні заняття:

Тема 12. Оптичні властивості мезофаз у різних межових умовах.

Тема 13. Визначення кроку гелікоїда у холестеричній мезофазі методом Гранжана-Кано.

Тема 14. Визначення кроку гелікоїда у похилій смектичній мезофазі на основі температурної залежності довжини хвилі селективного відбиття світла.

### Розділ 3. Органічні люмінофори та люмінесцентні матеріали

#### Лекції:

Тема 15. Люмінесценція та її природа. Світло і колір, сприйняття кольору. Залежність кольору від довжини хвилі. Поглинання, відбиття, розсіювання світла, люмінесценція. Джерела світла. Природа люмінесценції: молекулярна люмінесценція органічних молекул та люмінесценція неорганічних кристалів. Органічні та неорганічні люмінофори. Природні та синтетичні люмінофори.

Тема 16: Збуджений стан та способи його заселення. Діаграма Яблонського. Типи електронних переходів. Основні закони спектроскопії. Основні характеристики органічних люмінофорів. Вплив зовнішніх умов на спектральні властивості. Зв'язок між молекулярною будовою та спектральними властивостями.

Тема 17: Основні характеристики органічних люмінофорів. Ароматичні вуглеводні ланцюгової та конденсованої будови. Сполуки з арилетиленовими та арилацетиленовими групами. Азотетини. П'ятичленні гетероароматичні сполуки. Шестичленні гетероароматичні сполуки. Карбонільмісні сполуки. Похідні нафталенової кислоти. Ціанінові, стирилові, фталоціанінові барвники та металокомплекси.

Тема 18: Застосування органічних люмінофорів. Флуоресцентні мітчики та зонди для медико-біологічних досліджень та клінічної діагностики. Сенсори для фотодинамічної терапії. Активні середовища лазерів. Органічні сцинтилятори. Електро-, хемі- та електрохемілюмінесцентні композиції. Денні флуоресцентні пігменти та фарби. Люмінесцентні барвники для пластмас та синтетичних волокон. Оптичні відбілювачі. Матеріали для люмінесцентної дефектоскопії.

#### Практичні заняття:

Тема 19. Спектрофотометри та спектрофлуориметри. Типи приборів. Будова. Принцип роботи, параметри, що вимірюються. (практична робота)

Тема 20. Визначення спектральних характеристик люмінофорів. Визначення оптичної чистоти флуоресцентної сполуки. (лабораторна робота)

### 3. Структура навчальної дисципліни

Назви розділів і тем	Кількість годин			
	усього	У тому числі		
		лекції	практичні заняття	самостійна робота
<b>Розділ 1</b>				
Тема 1	2	2	-	-
Тема 2	34	6	6	22
Тема 3	58	6	-	52
Тема 4	2	2	-	-
Тема 5	20	6	-	14
Тема 6	47	6	6	35
Тема 7	2	2	-	-
<i>Разом за розділом</i>	<i>165</i>	<i>30</i>	<i>12</i>	<i>123</i>

<b>Розділ 2</b>				
Тема 8	14	4	-	10
Тема 9	24	4	-	20
Тема 10	24	4	-	20
Тема 11	12	2	-	10
Тема 12	2	-	2	-
Тема 13	2	-	2	-
Тема 14	2	-	2	-
<i>Разом за розділом</i>	<i>80</i>	<i>14</i>	<i>6</i>	<i>60</i>
<b>Розділ 3</b>				
Тема 15	4	4	-	-
Тема 16	29	4	-	25
Тема 17	29	4	-	25
Тема 18	17	4	-	13
Тема 19	3	-	3	-
Тема 20	3	-	3	-
<i>Разом за розділом</i>		<i>16</i>	<i>6</i>	<i>63</i>
<b>Усього годин</b>	<b>330</b>	<b>60</b>	<b>24</b>	<b>246</b>

### 3. Завдання для самостійної роботи

№ з/п	Вид, зміст самостійної роботи	Кільк. годин
1	Тема 2. Ріст кристалів. Основні механізми рiстi кристалів вплив пересичення розчину вiдносно речовини, що кристалiзується, на механiзм кристалiзацiї. Методи одержання (вирощування з розчину, з розплаву) i їх особливостi, практичне застосування. Вплив домишок на властивостi кристалів, методи передростової обробки. Активованi кристали, особливостi вирощування.	22
2	Тема 3. Керамiка, процеси. Ріст зерен при вiдпаленнi керамiчних матерiалів. Основи твердофазного синтезу оксидних матерiалів. Способи формування керамiки. Пресування керамiки (холодне, iзостатичне, гаряче) i їх особливостi. Види функцiональної керамiки: конденсаторна керамiка, надпровiднi матерiали, ферити, п'єзоелектрики, оптична керамiка.	52
3	Тема 5. Скло, склоутворення. Фiзико-хiмiчнi основи процесiв, що мають мiсце при варцi скла. Сировиннi матерiали для отримання скла i вимоги до їх якостi. Основнi процеси, що вiдбуваються при скловарiннi. Гомогенiзацiя, освiтлювання i вiдпалювання виробiв зi скла. Ситали. Технологiчна схема одержання ситалів. Сировиннi матерiали для виробництва технiчних ситалів.	14
4	Тема 6. Методи дослiдження властивостей сцинтиляцiйних матерiалів. Вплив чистоти вихiдної сировини на властивостi промислових сцинтиляторiв. Методи пiдготовки сировини.	35
5	Тема 8. Теоретичнi уявлення про мезоморфiзм. Статистичнi теорiї нематичного впорядкування: теорiя Майєра-Заупе, модель Ландау-де Жена. Континуальна теорiя нематичного стану. Статистичнi та континуальнi теорiї смектичних РК.	10
6	Тема 9. Методи синтезу нематичних РК (зокрема реакцiї ароматичного електрофiльного та нуклеофiльного замищення) i хiральних компонентiв iндукованих холестеричних РК (зокрема енантiо- та диастереоселективнi реакцiї конденсацiї).	20
7	Тема 10. Розрахунок кроку спіралi надмолекулярного гелiкоїда iндукованого холестеричного РК матерiалу i закручуючої здатностi	20

	хірального компонента з даних вимірювань за методом Гранжана-Кано. Розрахунок кроку спіралі надмолекулярного гелікоїда індукованого сегнетоелектричного РК матеріалу і закручуючої здатності хірального компонента з даних температурних залежностей довжини хвилі максимуму селективного відбиття світла.	
8	Тема 11. Методи синтезу смектичних РК (зокрема естерифікація за карбодіімідним методом, реакція Вільсмайера-Хаака-Арнольда, синтез Піннера, реакції регіоселективного металювання і крос-сполучення) і хіральних компонентів індукованих похилих смектичних РК (зокрема каталізовані ферментами реакції естерифікації та трансестерифікації, реакція Міцунобу з повним оберненням абсолютної конфігурації, реакція Шарплеса).	10
9	Тема 16. Методи досліджень органічних люмінофорів. Електронна спектроскопія. Загальні методи досліджень органічних сполук: температури фазових переходів, ПМР та ІЧ спектроскопія, мас-спектрометрія, рентгеноструктурний аналіз. Спеціальні дослідження: світлостійкість та фотохімічні реакції, ізобестична точка, колориметрія люмінесцентних барвників, генераційні та сцинтиляційні характеристики, розчинність, характеристики, що пов'язані з вико-ростанням в хемі-, електро- та електрохемілюмінесцентних композиціях.	25
10	Тема 17. П'ятичленні гетероароматичні сполуки. Похідні фурана, тіофена та пірола. Конденсовані системи: бензофуран, бензотіофен та їх 2-арильні похідні. Карбазол, дибензофуран та дибензотіофен. Оксазол, 1,3,4-оксадіазоли, їх сірковмісні аналоги. Конформаційна будова, роль «жорсткості» та планарності систем на їх спектрально-люмінесцентні властивості. 1,3-Діарил- та 1,3,5-триарилпіразоліни.	25
11	Тема 18. Напрямки застосування органічних люмінофорів у аналітичній хімії, гідрогеології, картографії, криміналістиці, фотографічних матеріалах, для захисту цінних паперів. Індикатори рН та комплекси, оборотні та необоротні індикатори температур.	13
	<b>Разом</b>	246

**6. Індивідуальні завдання:** Немає.

**7. Методи контролю:** поточний контроль, опитування, залік, екзамен.

**8. Схема нарахування балів**

Семестри	Поточний контроль, самостійна робота, індивідуальні завдання		Підсумковий контроль (іспит)	Сума
3	Розділ 1	60	залік 40	100
4	Розділи 2,3	60	екзамен 40	100

1. Аспірант допускається до складання екзамену за умови виконання усіх практичних занять.
2. Екзамен вважається зданим, якщо рейтинг за екзамен не менше, ніж 15 балів.

#### Шкала оцінювання

Сума балів за всі види навчальної діяльності протягом семестру	Оцінка
90 – 100	відмінно
70-89	добре
50-69	задовільно
1-49	незадовільно

## 9. Рекомендоване методичне забезпечення

1. Робоча програма навчальної дисципліни.
2. Навчальні посібники, монографії, наукові статті.
3. Описи практичних занять.

### Базова література

1. Горилецкий В.И., Гринев Б.В., Заславский Б.Г., Смирнов Н.Н., Суздаль В.С. Рост кристаллов.-Харьков: Акта, 2002.-536 с.
2. Глобус М.Е., Гринев Б.В. Неорганические скнтилляторы. Новые и традиционные материалы.-Харьков: Актаб 2000.-408 с.
3. Хамский Е.В. Кристаллизация из растворов.-Л.:Наука,1967.-150 с.
4. Суйковская Н.В. Химические методы получения тонких прозрачных пленок.-Л.:Химия, 1971.-200 с.
5. Пфанн В. Зонная плавка. Пер. с англ./Под ред. В.Н.Вигдоровича.-М.:Мир, 1970.-366с.
6. Окадзаки К. Технология керамических диэлектриков. М.: Изд-во Энергия, 1976.-327 с.
7. Handbook of dielectric, piezoelectric and ferroelectric materials. Synthesis, properties and applications, Ed. Z.-G. Ye.-Cambridge: Woodhead Publishing Ltd, 2008.-1092 p.
8. Аппен А.А. Химия стекла.-Л.:Химия, 1974.-352 с.
9. Финкельштейн Д.Н. Чистота вещества. -М. : Атомиздат, 1975.- 224с.
10. Смирнова О.М., Коток Л.А., Баник В.В. Состояние работ в области получения сырья для монокристаллов.-М.:НИИТЭХИМ, 1984.-72с.
11. Шефер Г. Химические транспортные реакции. -М.: Мир, 1964.-189 с.
12. Делимарский Ю.К., Барчук Л.П. Прикладная химия ионных расплавов.-Киев: Наукова думка, 1988.-192 с.
13. Чандрасекар С. Жидкие кристаллы. – М.: Мир, 1980.
14. Сонин А.С. Введение в физику жидких кристаллов. – М.: Наука, 1983.
15. Гребёнкин М.Ф., Иващенко А.В. Жидкокристаллические материалы. – М.: Химия, 1989.
16. Chigrinov V.G. Liquid Crystal Devices: Physics and Applications. – Boston–London: Artech-House, 1999.
17. Yang D., Wu S. Fundamentals of Liquid Crystal Devices, Second edition. – Wiley, 2014.
18. Беляков В.А., Сонин А.С. Оптика холестерических жидких кристаллов. - М.: Наука, 1982.
19. Чилая Г.С. Физические свойства и применение жидких кристаллов с индуцированной спиральной структурой. – Тбилиси: Мецниереба, 1985.
20. Кутуля Л.А. Хиральные органические соединения в жидкокристаллических системах с индуцированной спиральной структурой в сб. “Функциональные материалы для науки и техники”. – Х.: Институт монокристаллов, 2001.
21. Лосева М.В., Пожидаев Е.П., Рабинович А.З., Чернова Н.И., Иващенко А.В. Сегнетоэлектрические жидкие кристаллы // М.: Изд-во ВНИИТИ, 1990. 191 с. (Итоги науки и техники. Сер. физ. химия; Т.3).
22. Goodby J.W. Ferroelectric Liquid Crystals. Principles, Properties and Applications. – Gordon and Breach Science Publishers S.A, 1991.
23. Паркер С. Фотолуминесценция растворов. Москва: Мир, 1972.
24. Барлтруп Дж., Койл Дж. Возбужденные состояния в органической химии. Москва: Мир, 1978.
25. Нурмухаметов. Р.Н. Поглощение и люминесценция ароматических соединений. Москва: Химия, 1971.
26. Berlman I.V. Handbook of Fluorescence Spectra of Aromatic Molecules. New York – London: Academic Press, 1965.
27. Свердлова О.В. Электронные спектры в органической химии. Ленинград: Химия, 1985
28. Красовицкий Б.М., Болотин Б.М. Органические люминофоры. Москва: Химия, 1984.

29. Красовицкий Б.М., Афанасиади Л.М. Препаративная химия органических люминофоров. Харьков: Фолио, 1997.
30. Hamblin M.R., Mróz P. Advances in Photodynamic Therapy. Basic, Translational, and Clinical. Boston, London: Artech House, 2008.
31. Шефер Ф.П. Лазеры на красителях. Москва: Мир, 1976.

#### Допоміжна література

1. Бланк А.Б. Аналитическая химия в исследовании и производстве неорганических функциональных материалов. - Харьков: Институт монокристаллов, 2005. - 352 с.
2. Kelly S.M., O'Neill M. Liquid crystals for electro-optic applications, H.S. Nalwa (Ed.), Handbook of Advanced Electronic and Photonic Materials and Devices; Liquid Crystals, Display and Laser Materials, Academic Press, 2000. - Vol. 7. - P. 2-45.
3. Matteo A., Todd S.M., Gottareli G. et al. Correlation between Molecular Structure and Helicity of Induced Chiral Nematics in Terms of Short-Range and Electrostatic-Induction Interactions. The Case of Chiral Biphenyls // *J. Am. Chem. Soc.* - 2001. - V. 123. - P. 7842-7851.
4. Lagerwall S.T. Ferroelectric and Antiferroelectric Liquid Crystals, S.T. Lagerwall (Ed.). - Germany: WILEY-VCH Verlag GmbH, 1999 - P. 241-257.
5. Hird M. Fluorinated liquid crystals - properties and applications // *Chem. Soc. Rev.* - 2007. - V. 36. - P. 2070-2095.
6. Hird M. Ferroelectricity in liquid crystals - materials, properties and applications // *Liq. Cryst.* - 2011. - V. 38. - P. 1467.
7. Попова Е.В., Федоряко А.П. Пьезоэлектрический эффект в сегнетоэлектрическом жидком кристалле. Обзор // *Кристаллография.* - 2010. - Т. 55. - С. 526.
8. Srivastava A.K., Chigrinov V.G., Kwok H. S. Ferroelectric liquid crystals: Excellent tool for modern displays and photonics // *Journal of the Society for Information Display.* - 2015. - V. 23. - P. 253-270.
9. Bisoyi H.K., Kumar, K. Liquid-crystal nanoscience: an emerging avenue of soft self-assembly // *Chem. Soc. Rev.* - 2011. - V. 40. - P. 306-319.