

**Програма кваліфікаційного іспиту
зі спеціальності 102 Хімія
для здобувачів освітнього ступеня Магістр**

Нанохімія і нанотехнологія

1. Класифікація вуглецевих нанотрубок (НТ). Методи синтезу НТ.
2. Методи отримання неуглецевих нанотрубок.
3. Методи одержання наночастинок. Золь-Гель метод. Сольватотермальний синтез. Нанореактори. Газофазний синтез. Детонаційний метод. Метод електровибуху. НВЧ-обробка. Ультразвук. Механосинтез.
4. Наночастинки (НЧ) срібла і золота. Традиційні та нетрадиційні методи синтезу НЧ срібла і золота.
5. Органічні наночастинки. Методи одержання.
6. Фулерени. Методи синтезу фулеренів. Альтернативні методи одержання фулеренів. Структурні та хімічні властивості фулеренів.
7. Дендримери. Методи синтезу дендримерів. Структурні та фізичні властивості дендримерів.
8. Методи одержання та використання фотонних кристалів.
9. Використання методу надкритичної сушки для одержання оксидних аерогелів.
10. Порівняльна характеристика методів синтезу, фізичних та хімічних властивостей графену та оксиду графену.
11. Переваги та недоліки використання конфокальної мікроскопії для дослідження наноматеріалів: роль контрастуючих агентів.
12. Методи синтезу та використання напівпровідникових квантових точок.

Функціональні наноматеріали

13. Порівняльна характеристика методів синтезу, фізичних та хімічних властивостей графену та відновленого оксиду графену
14. Переваги та недоліки використання конфокальної мікроскопії для дослідження наноматеріалів: роль контрастуючих агентів.
15. Роль екситонного резонансу в фізико-хімічних властивостях напівпровідникових наносистем
16. Порівняння проявів поверхневого та локалізованого плазмонного резонансу в оптичних властивостях наносистем.
17. Методи одержання одновимірних наноматеріалів. Застосування методики «пара-рідина-кристал» для одержання вуглецевих нанотрубок.
18. Порівняння методу CVD та PVD для одержання вуглецевих нанотрубок.

Супрамолекулярна хімія

19. Типи специфічних міжмолекулярних взаємодій у конденсованій фазі та їх вплив на просторову організацію супермолекул.
20. Типи неспецифічних міжмолекулярних взаємодій у конденсованій фазі та їх вплив на просторову організацію супермолекул.
21. Конформаційна обмеженість і структурна жорсткість молекул, їх вплив на селективність взаємодії та міцність супрамолекулярного комплексу. Навести приклади.

22. Молекулярна природа температурного шуму в рідинах. Механізми плавлення, розчинення, міцелоутворення, хімічної реакції та каталізу з точки зору амплітуди колективних коливань молекул.
23. Рецептори катіонів лужних металів з високим афінітетом та селективністю. Вплив протонодонорного середовища на афінітет.
24. Рецептори катіонів кальцію у хімії та біології, їх афінітет та селективність.
25. Рецептори катіонів цинку у хімії та біології, їх афінітет та селективність.
26. Молекулярне розпізнавання, афінітет та селективність у супрамолекулярній хімії. Механізм розпізнавання супермолекули її рецептором.
27. Просторова будова протеїнів. Найбільш відомі комплекси білкових молекул з катіонами металів Ca^{2+} , Zn^{2+} , Cu^{2+} та малими органічними молекулами.
28. Типи водневих зв'язків. Вплив природи розчиненої речовини на їх міцність та на локальну густину води. Природа та енергетика гідрофобного зв'язування; роль гідрофобних взаємодій в організації середовищ та міжмолекулярних взаємодій органічних субстратів.
29. Просторова будова рибонуклеїнових та дезоксирибонуклеїнових кислот та їх агрегатів. Афінітет і селективність у агрегатах ДНК та РНК.
30. Солюбілізація субстратів в організованих системах: явище, природа, закономірності, способи регулювання, кількісні характеристики; локалізація субстратів; вплив на властивості органічних субстратів, ефекти відповідності.
31. Кислотно-основні властивості органічних протолітів в організованих середовищах: протолітичні рівноваги у до- та міцелярних розчинах; вплив іонних та неіонних ПАР на властивості кислотних та основних протолітів; диференціація властивостей протолітів у залежності від їх гідрофобності.
32. Комплексоутворення органічних реагентів й лігандів з іонами металів в організованих середовищах: основні явища, специфіка та закономірності.
33. Дифільні органічні молекули як структуроутворювачі організованих середовищ; структурно-молекулярні та функціональні ознаки ПАР; класифікації ПАР; типи ПАР для створення організованих середовищ, представники, властивості; гідрофільно-гідрофобний баланс ПАР.
34. Основні типи та варіативність організованих середовищ й систем на основі ПАР, приклади, природа, загальні та специфічні особливості; місце в системі об'єктів супрамолекулярної хімії.

Методи встановлення структури хімічних сполук та матеріалів

35. Флуоресцентна спектроскопія у стаціонарних умовах. Механізми гасіння флуоресценції. Агрегація сполук у збудженому стані.
36. Часово-розділена флуоресцентна спектроскопія. Міжмолекулярне та внутрішньо молекулярне фото перенесення електрону та внутрішньо молекулярне фотоперенесення заряду.
37. Резонансне перенесення енергії збудження. Внутрішньомолекулярне фотоперенесення протону.
38. Порівняння пробопідготовки зразків для дослідження SEM та TEM
39. Типи джерел електронів в сканувальній, просвічуючій та сканувальній просвічуючій мікроскопії.
40. Можливості застосування рентгенфлуоресцентного аналізу зразків в електронній мікроскопії: обмеження та вимоги до зразків.
41. Кріоелектронна мікроскопія: принципи використання, переваги, обмеження та сфери застосування.

42. Типи детекторів в просвічуючій електронній мікроскопії
43. Порівняння TEM та STEM: різниця в пробопідготовці та можливостях дослідження.
44. Типи детекторів в STEM мікроскопії.
45. Пробопідготовка непровідних зразків для SEM та TEM
46. Розгляд дифракції рентгенівських променів на кристалах на прикладі рівняння Брега. Аналіз цього рівняння.
47. Геометричне місце точок дифракційних максимумів у просторі. Сфера Евальда. Дифракція від полікристалічного та монокристалічного зразків.
48. Обернена ґратка її зв'язок із рівнянням Брега. Взаємозв'язок між параметрами елементарних комірок оберненої та кристалічної ґраток.
49. Квадратичні форми для різноманітних кристалічних ґраток. Рентгенодифракційні методи встановлення макромолекулярних структур: молекулярного заміщення, ізоморфного заміщення та фазування за допомогою аномальної дисперсії.
50. Параметри наноструктурованих матеріалів та фізикохімічні явища, що відбуваються при адсорбції парів. Що таке наноструктуровані матеріали і навіщо їх досліджувати? Питома поверхня, об'єм пор та розподіл пор за розмірами. Фрактальна розмірність. Специфічна та неспецифічна адсорбція. Адсорбція парів: рівняння Ленгмюра та БЕТ. Явище капілярної конденсації: рівняння Кельвіна. Класифікація пор за розмірами: мікро-, мезо, та макропори.
51. Методи дослідження структурно-сорбційних параметрів. Критерії вибору адсорбату для структурно-сорбційних досліджень. Ізотерми адсорбції азоту. Класифікація ізотерм за ІЮПАК. Мезопористі адсорбенти та метод ВЖН. Критерії наявності мікропор в адсорбентах: метод t-plot. Методи розрахунку розподілів мікропор за розмірами. Ртутна порометрія – метод дослідження макропор.
52. Оптичні методи дослідження наночастинок. Явище світлорозсіювання. Рівняння Релея. Метод динамічного світлорозсіювання: фізичні основи, математичне наближення, можливості та обмеження. Вимірювання зета-потенціалу. Метод лазерної дифракції.
53. Методи іонізації високомолекулярних сполук - методи FD, FAB, SIMS, MALDI. Переваги та недоліки цих методів для «м'якої» іонізації високомолекулярних сполук. Роль матриці в одержанні мас-спектра високомолекулярної сполуки.
54. Принцип роботи детектора TOF – лінійного та з рефлектроном, різниця в MALDI спектрах, формула залежності дрейфу від співвідношення маса/заряд.
55. Правила підбору катіонізуючого агента. Умови одержання коректного мас-спектра полімерів – вплив різних факторів.

Хімічні аспекти створення новітніх матеріалів

56. Гетероповерхневі сорбційні матеріали на основі сіліцій оксиду: властивості та способи отримання.
57. Основні властивості, що обумовлюють перспективи використання магнітних нанокompatитів в практиці аналізу і медицині.
58. Молекулярно імпринтовані полімерні матеріали: особливості синтезу і властивостей.
59. Класифікація максенів та методи їх одержання.
60. Порівняльна характеристика методів одержання "сірого" та "зеленого водню"
61. Фотокаталізатори розкладу води: кристалохімічні принципи їх інженерії.
62. «Зелені методи» одержання амоніаку в промисловості.
63. Матеріали для накопичення та зберігання водню.
64. Неорганічні і органічні світлодіоди, відмінності. Будова електролюмінесцентної комірки OLED. Конструкції органічної електролюмінісцентної структури.

65. Типи OLED. Методи виготовлення OLED.
66. Матеріали для OLED-пристроїв. Анодні, катодні матеріали. Матеріали для емітерів, зарядо-транспортних шарів. Класифікація електролюмінофорів – емітерів.
67. Сонячні батареї. Будова та принцип роботи. Типи фотоелектричних перетворювачів. Сонячні батареї на основі кремнію.
68. Полімерні та органічні аналоги сонячних панелей. Принцип роботи органічних сонячних батарей. Конфігурації органічних фотовольтаїчних комірок.
69. Структура сонячної батареї з об'ємним гетеропереходом. Матеріали, які використовуються для батарей з об'ємним гетеропереходом.
70. Структура сонячної батареї шаруватого типу. Матеріали, які використовуються для батарей шаруватого типу. Тандемні батареї. Прозорі сонячні панелі. Сонячні біопанелі.

Хімічні основи життя

71. Опишіть фотохімічні процеси, які відбувались у верхніх шарах анаеробної атмосфери первинної Землі? Чи відбуваються ці процеси зараз?
72. Перелічити функціональні складові клітини еукаріотів. Зробити рисунок клітини тварин. Вказати, складові клітини, що оточені ліпідними мембранами.
73. Описати процес реплікації ДНК.
74. Описати процес транскрипції в ядрі клітини.
75. Описати процес біосинтезу білка в клітині.
76. Що таке ланцюгова полімеразна реакція (ЛПР) і як її проводять?
77. Сучасні уявлення про механізм дії ферментів. Активний та регуляторні центри ферментів.
78. Класифікація і номенклатура ферментів.
79. Основні уявлення про кінетику ферментативних процесів. Рівняння Міхаеліса–Ментен.
80. Вплив температури та pH на швидкість ферментативних реакцій.
81. Інгібування ензимів, типи інгібіторів ферментів.
82. Механізми регуляції ферментативної активності.
83. Особливості застосування ензимів для визначення субстратів на прикладі ензимів класу оксидо-редуктаз або гідролаз
84. Біопаливні елементи. Особливості будови і приклади застосування.
85. Особливості застосування флюоресцентних міток для дослідження біолігандів та в біологічних методах аналізу
86. Загальна характеристика біосенсорів. Навести приклад електрохімічного або оптичного біосенсора на основі іммобілізованого біополімеру(ензими, білки імунної системи, нуклеїнові кислоти), пояснити принцип його роботи та можливі області застосування.
87. ЯМР спектроскопія на ядрах ^{19}F , ^{31}P , ^{15}N . Особливості практичного застосування.
88. Особливості застосування ЯМР для дослідження біологічних об'єктів. Вивчення первинної, вторинної та третинної структури білків методом ЯМР. Використання 2D ЯМР спектрів.

Статистичні та комбінаторні методи в хімії

89. Синтетичні підходи в комбінаторній хімії
90. Методи утворення амідного зв'язку - найважливішої реакції паралельного синтезу
91. Реакція Сузукі як метод класичного та паралельного синтезу
92. Реакція Бухвальда-Хартвіга як метод класичного та паралельного синтезу

93. Гетероциклізації у комбінаторній хімії
94. Сучасні принципи дизайну бібліотек сполук для потреб медичної хімії
95. Скринінгові стратегії пошуку сполук-"лідерів"
96. Ліганд- та структурно-орієнтований дизайн лікарських засобів
97. Предмет і задачі математичної статистики. Полігон частот і відносних частот. Числові характеристики дискретного та інтегрального статистичного розподілу.
98. Задача вирівнювання статистичних рядів. Метод моментів.
99. Статистичні гіпотези та їх різновиди. Похибки перевірки гіпотез. Критерії узгодження для перевірки гіпотези. Критична область.
100. Порівняння статистичних критеріїв χ^2 -Пірсона і Колмогорова. В чому перевага і недоліки критерію Колмогорова в порівнянні з критерієм χ^2 -Пірсона?
101. Порядок дій при перевірці статистичних гіпотез. Критерії перевірки статистичних гіпотез: перевірка гіпотези про рівність математичних сподівань нормальних генеральних сукупностей.
102. Параметричні і непараметричні критерії перевірки гіпотез приналежності вибірки нормальному розподіленню. Переваги непараметричних критеріїв. Критерій Колмогорова-Смирнова.

Рекомендована література

Нанохімія і нанотехнологія

1. Савченко І.О. Нанохімія і нанотехнології. Підручник для ЗВО. Київ: ВПЦ "Київський університет", 2019. – 443 с.
2. Завражна О. М., Пасько О. О., Салтикова А. І. Основи нанотехнологій. Навчально-методичний посібник для вчителів та студентів педагогічних університетів. Суми: Вид-во СумДПУ імені А. С. Макаренка, 2016. – 184 с.
3. Нанохімія і нанотехнології. [Електронний ресурс]: навчальний посібник для студентів напряму підготовки 6.051401 «Біотехнологія» / НТУУ «КПІ»; уклад. І. В. Коваленко, В. І. Лисін, О. О. Андрійко. – Київ: НТУУ «КПІ», 2014. – 63 с.
4. Заячук Д. М. Нанотехнології і наноструктури: навч. Посібник. Нац. університет "Львівська політехніка". – Львів, 2009. – 580 с.
5. Афтандіянц Є.Г., Зазимко О.В., Лопатько К.Г. Наноматеріалознавство. – Херсон: ОЛДІ-ПЛЮС, 2015. – 550 с.
6. Волков С.В., Ковальчук Є.П. Нанохімія, наносистеми, наноматеріали. – Київ: Наукова думка, 2008. – 423 с.
7. Чекман І.С., Ульберг З.Р., Маланчук В.О. Нанонаука, нанобіологія, нанофармація. – Київ: Поліграф плюс, 2012. – 328 с.

Супрамолекулярна хімія

1. Пивоваренко В.Г. Основи супрамолекулярної хімії. (Частина 1 рукопису) 2022. – 104 с.
2. <https://drive.google.com/drive/folders/1ABLG2YiwO0NvGDx-bOp6qWkRQ6u-sE14>
3. Куліченко С.А., Дорошук В.О. Організовані середовища поверхнево-активних речовин в аналізі: навч. посіб. – Київ: ВПЦ «Київський університет», 2010. – 108 с.
4. Ariga K., Kunitake T. Supramolecular Chemistry – Fundamentals and Applications. Springer, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 2006. – 208 p.
5. J. Steed, J. Atwood. Supramolecular Chemistry. Second edition. Vol. 1, 2. Wiley, 2013. – 1056 p.

Методи встановлення структури хімічних сполук та матеріалів

1. R. Drago. Physical Methods in Chemistry. – Surfside Scientific Publishers, 1992. – 753 p.
2. Demchenko A.P. Introduction to Fluorescence Sensing// 2009.- Springer.- 586 P.
3. B. Valeur. Molecular Fluorescence. – New York, Wiley-VCH., 2002.
4. J.R. Lakowicz. Principles of fluorescence spectroscopy. Second edition. Kluwer Academic/Plenum Publishers NY, Boston, Dordrecht, London, Moscow, 1999. – 698 P.
5. Амірханов В.М. Люмінесценція координаційних сполук лантаноїдів. – Київ: ВПЦ «Київський університет». 2017. – 79 с.
6. Пивоваренко В.Г. Абсорбційна та флуоресцентна спектроскопія органічних сполук. К., Вид-во Київський університет, 2023, 284 с. (Прийнято до друку)
7. В.П. Казіміров, Е.Б. Русанов. Рентгенографія кристалічних матеріалів - – ВПЦ «Київський університет». 2016. – 287 с.
8. Gregg, S.J. and Sing, K.S.W. Adsorption, Surface Area and Porosity. 2nd Edition, Academic Press, London, 1982.
9. Pash H., Schrepp W., MALDI-TOF Mass Spectrometry of Synthetic Polymers, 1st Edition, Springer, 2003.-299 p.
10. J.L. Koenig Spectroscopy of Polymers, 2nd Edition, Elsevier, 1999.- 491 p.
11. Jürgen H. Gross Mass Spectrometry -A text book, 3rd Edition, Springer, 2017.-993 p.

Хімічні аспекти створення новітніх матеріалів

1. Готра З.Ю. Органічна електроніка: стан та перспективи розвитку. Науковий Вісник Чернівецького університету. 2011. Том 1, випуск 1. Фізика. Електроніка. с.5–14.
2. R. Xie, Z. Wang, W. Zhou et al. Graphene quantum dots as smart probes for biosensing // Anal. Methods, 2016, 8, 4001-4016.
3. Пристрої відображення та реєстрації інформації. [Електронний ресурс]: навч. посіб. для студ. Укладач Миколаєць Д.А. – Електронні текстові дані (1 файл: 8279 кбайт). – Київ: КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2019. – 388 с.
4. Yu Sh. et al. Recent advances in metal-organic framework membranes for water treatment: a review. – Science of The Total Environment, 2021. – V. 800. – 149662.
5. Савченко І.О. Нанохімія та нанотехнології. Підручник для ЗВО. Київ: ВПЦ “Київський університет”, 2019. – 443 с.

Хімічні основи життя

1. D.M. Nelson, M.M. Cox. Lehninger Principles of Biochemistry. 8th Edition. W.H. Freeman, 2021. – 1248 p.
2. J. Koolman, K.-H. Röhm. Color Atlas of Biochemistry. Thieme; 3rd edition, 2012, – 506 p.
3. D. Holme, H. Peck. Analytical Biochemistry. 3rd ed. Pearson College Div., 1998. – 501 p
4. A. Turner, I. Karube, G.S. Wilson. Biosensors: Fundamentals and Applications. – Oxford: University Press, 1990. – 786 p.

Статистичні та комбінаторні методи в хімії

1. Бабак В. П., Марченко Б. Г., Фриз М. Є. Теорія ймовірностей, випадкові процеси та математична статистика. — К. : Техніка, 2004. — 288с.

2. Білушак Г. І., Бобик І. О., Ватаманюк О. З., Вовк М. І., Дрогомирецька Х. Т. Теорія ймовірностей і математична статистика. — Л. : Видавництво Національного ун-ту "Львівська політехніка", 2003. — 244с.
3. Іщенко О.В., Михальчук В.М., Біла Н.І., Гайдай С.В., Білий О.В. Статистичні методи в хімії.—Донецьк: ДонНУ. — 2012. — 505 с.
4. Бобик О. І., Берегова Г. І., Копитко Б. І. Теорія ймовірностей і математична статистика. — К. : ВД «Професіонал», 2007. — 560с.