

Міністерство освіти і науки України  
Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна

Введено в дію наказом від „\_\_\_” 2016 р.  
№ \_\_\_\_\_

Ректор \_\_\_\_\_ В. С. Бакіров

«\_\_\_\_\_» 20\_\_ р.



освітньо-наукова програма

**СУЧАСНІ НАПРЯМКИ РОЗВИТКУ ФУНДАМЕНТАЛЬНОЇ ХІМІЇ  
ТА ЇХ ПРИКЛАДНА ПЕРСПЕКТИВА**

Спеціальність 102 – Хімія

третій (освітньо-науковий) рівень вищої освіти

Затверджено вченою радою університету 27 травня 2016 року, протокол № 7.

## **Мета програми**

Відповідно до «Порядку підготовки здобувачів вищої освіти ступеня доктора філософії та доктора наук у вищих навчальних закладах (наукових установах)» затвердженого постановою Кабінету Міністрів України від 23 березня 2016 р. № 261 освітньо-наукова програма аспірантури (ад'юнктури) складається з освітньої та наукової складових.

Метою освітньої складової освітньо-наукової програми «Сучасні напрямки розвитку фундаментальної хімії та їх прикладна перспектива» є формування у майбутніх докторів філософії чітких уявлень щодо актуальних проблем фундаментальної хімії, новітніх теоретичних та експериментальних методів дослідження хімічних речовин та процесів, сучасних функціональних матеріалів та набуття компетентностей, необхідних для самостійної постановки та розв'язання науково-дослідних проблем в галузі хімії та функціональних матеріалів майбутнього. Важливою складовою є розвиток комунікативних компетентностей: вміння ініціювати та виконувати наукові проекти, письмово та усно презентувати результати, захищати інтелектуальну власність, передавати (навчати) хімічні знання та навички різноманітним категоріям слухачів, організовувати наукові семінари та конференції, вміти знайти та спілкуватись з потенційним роботодавцем. Сьогодні це, безумовно, неможливо без достатньо високого рівня володіння англійською мовою у професійному та загальнонауковому дискурсах. Суттєвим підґрунтям є опанування філософськими засадами та методологією наукових досліджень, призваними розвинути креативність, самокритичність, абстрактне мислення, здатність спілкуватися з представниками інших професійних груп різного рівня.

Таким чином, освітньо-наукова програма має всі чотири складові, передбачені п. 26 «Порядку».

Наукова складова освітньо-наукової програми передбачає проведення власного наукового дослідження під керівництвом одного або двох наукових керівників та оформлення його результатів у вигляді дисертації.

**Обсяг освітньої складової:** 40 кредитів ЄКТС

**Нормативний термін навчання:** 4 роки

**Нормативний термін виконання освітньої складової:** 2 роки

**Вимоги до рівня освіти осіб, які можуть розпочати навчання за програмою, і вимоги до професійного відбору вступників.**

Згідно з «Правилами прийому на навчання до аспірантури Харківського національного університету імені В.Н.Каразіна у 2016 році» на навчання для здобуття ступеня доктора філософії приймаються на конкурсній основі особи, які здобули ступінь магістра (освітньо-кваліфікаційний рівень спеціаліста).

Вступні випробування включають до себе чотири іспити: іспит із спеціальності, іспит з іноземної мови, презентація дослідницьких пропозицій за тематикою передбачуваного керівника; презентація дослідницьких досягнень. Вступний іспит із спеціальності проводиться в обсязі стандарту вищої освіти магістра зі спеціальності «Хімія»; програма фахових випробувань оприлюднюються на веб-сайті університету та в приймальній комісії не пізніше ніж за три місяці до початку прийому документів. У презентації

дослідницьких досягнень особлива увага приділяється публікаціям вступника, перш за все у авторитетних міжнародних виданнях, які індексуються наукометричними базами Scopus та/або Web of Science. Також враховується середній бал додатку до диплому магістра (спеціаліста).

**Результати навчання (компетентності), якими повинен оволодіти здобувач вищої освіти.**

Освітня частина освітньо-наукової програми розпочинається з викладання дисципліни циклу загальної підготовки «Філософські засади та методологія наукових досліджень», яка має забезпечити підґрунтя професійної діяльності та загальний гуманітарний розвиток майбутніх докторів філософії. Паралельно з цим розпочинається викладання ще однієї дисципліни загальної підготовки «Іноземна мова для аспірантів», яка призвана забезпечити достатньо високий рівень мовленнєвих компетенцій аспірантів. Ці дві дисципліни є нормативними і формально не пов'язані між собою. Однак слід відмітити, що вичерпне виконання програми курсу «Філософські засади та методологія наукових досліджень» передбачає знайомство з аутентичними англійськими текстами філософської спрямованості. Професійна підготовка розпочинається в другому семестрі викладанням дисципліни «Підготовка наукових публікацій та презентація результатів досліджень», яка спрямована на набуття аспірантами універсальних навичок дослідника, таких як усна та письмова презентація результатів власного наукового дослідження, організації та проведення навчальних занять, управління науковими проектами, написання пропозицій на фінансування наукових досліджень тощо.

Основна професійна підготовка здійснюється в 3 та 4 семестрах. Аспірант має обрати одну з двох дисциплін за вибором: «Фізико-органічна хімія і функціональні матеріали» або «Фізична хімія конденсованих систем». Обидві вони сплановані таким чином, що формують подібні базові компетентності та надають подібні базові знання, які відповідають сформульованій вище загальній меті навчання. В той же час цей спільний для обох програм матеріал викладається в різних контекстах, і кожна з програм має свої відмінності та особливості. Дисципліну «Фізико-органічна хімія і функціональні матеріали» зорієнтовано на аспірантів, які на попередніх етапах навчання виявили особливий інтерес до органічної хімії і вже мають певні успіхи і результати в цій галузі. Цей курс охоплює коло сучасних проблем, пов'язаних із стереохімічними особливостями органічних реакцій, асиметричним синтезом та каталізмом. Дисципліну «Фізична хімія конденсованих систем» адресовано аспірантам, основні професійні інтереси і успіхи яких пов'язані з дослідженнями конденсованих систем (молекулярні і іонні рідини, розчини різного складу та природи, аморфні та кристалічні тіла). Відмінні особливості цієї програми визначаються, перш за все, своєрідністю (нано)дисперсних систем та величезною різноманітністю процесів на поверхнях розділу фаз. Нормативною дисципліною професійної підготовки другого року навчання є «Сучасні комунікативні технології в освіті та наукових дослідженнях в хімії».

Також, відповідно до п. 26 «Порядку» аспіранти мають право вибирати навчальні дисципліни, що пропонуються для інших рівнів вищої освіти і які пов'язані з тематикою дисертаційного дослідження, за погодженням із своїм науковим керівником та керівником відповідного факультету чи підрозділу

Нижче наведені компетентності, що мають бути сформовані, та очікувані результати навчання для кожної з дисциплін.

Усі аспіранти незалежно від форми навчання зобов'язані відвідувати аудиторні заняття і проходити всі форми поточного та підсумкового контролю, передбачені індивідуальним навчальним планом аспіранта та цією освітньо-науковою програмою.

## **Філософські засади та методологія наукових досліджень.**

Нормативна дисципліна, 5 кредитів, 1-й семестр, цикл загальної підготовки.

Види занять: лекції, практичні заняття, семінари, індивідуальні завдання, самостійна робота.

Підсумковий контроль: залік.

### **Мета навчальної дисципліни**

Філософія становить підґрунтя для будь-якої наукової діяльності. Метою курсу є цілеспрямоване поглиблення знань аспірантів з філософії та методології наукових досліджень, актуальних філософських та методологічних проблем теорії природничо-математичного пізнання та шляхів їх розв'язання для формування широкого наукового кругозору і вміння орієнтуватися в складних проблемах розвитку науки, розширення цехових дисциплінарних меж та формування міждисциплінарних підходів, проблематизації теоретико-методологічних засад своєї дисципліни та розширення предметного поля досліджень. Сучасний науковець має бути людиною гуманітарно розвинутою, що можливо завдяки зверненню до взірців інтелектуальної діяльності людини, які представляють розвиток світової філософської думки. Тому для майбутніх докторів філософії важливо мати базові уявлення щодо засад буття, міжлюдських відносин, питань про сенс існування, шляхи розвитку історії людства, методологічні проблеми науки.

### **Компетентності, що мають бути сформовані**

Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу; вміння виявляти, ставити та вирішувати проблеми; здатність генерувати нові ідеї (креативність), бути критичним і самокритичним. Більш докладно:

- здатність спілкуватися з представниками інших професійних груп різного рівня (з експертами з інших галузей знань);
- здатність аналізувати, синтезувати та обговорювати сучасні теоретико-методологічні підходи, в межах та поза областю дослідження, ставити загальні теоретичні проблеми та планувати шляхи їх вирішення;
- здатність використовувати критичні знання, що закріплено написанням рецензії на статтю чи книгу або реферату за тематикою філософських та методологічних проблем науки;
- здатність використовувати загальні методи наукового пізнання, користуватися науковим знанням, яке слугує засобом високої комунікативної активності;
- здатність використовувати професійно-профільні знання й практичні навички для вирішення практичних завдань в галузі сучасної філософії і науки;
- здатність аналізувати та посилатися на відповідні основні найбільш передові філософські підходи, концептуальні та теоретико-методологічні засади щодо наукових досліджень в письмовій формі, через усні виступи та презентації, в дисертації, знання актуальних теоретичних дискусій та трендів щодо природничо-математичних наук;
- здатність проведення досліджень на відповідному рівні.

### **При формуванні цих компетентностей основний акцент робиться на наступних програмних результатах навчання**

- поглиблене вивчення слухачами найбільш гострих і актуальних проблем та головних досягнень сучасної філософської думки, теоретичних підходів до наукових досліджень;
- поглиблений розгляд методологічних засад наукових досліджень;
- аналіз зв'язку філософських концепцій з проблемами сучасної науки;

- знання основних сучасних концепцій філософії науки, основних філософських проблем в підвалинах сучасної науки, фактичних даних, що свідчать про нерозривність філософського і наукового знання;
- знання основних можливостей наукової співпраці для природничо-математичних наук, перспектив міждисциплінарних досліджень, визначаючи позитивні/негативні аспекти своєї власної області дослідження;
- знання характеру та історичної динаміки основних теоретичних філософських проблем, критичного осмислення їх зв'язку з сучасністю та впливу на інтелектуальний розвиток суспільства і трансформацію науки.

## **Іноземна мова для аспірантів**

Нормативна дисципліна, 10 кредитів, 1-й та 2-й семестри, цикл загальної підготовки.

Види занять: практичні заняття, самостійна робота.

Підсумковий контроль: комбінований іспит.

### **Мета навчальної дисципліни**

Метою викладання навчальної дисципліни “Англійська мова спеціального вжитку” є забезпечити досить високий рівень мовленнєвих умінь аспірантів із залученням головних стратегій опрацювання аутентичного англомовного матеріалу в галузях академічного читання, письма, мовлення та спілкування з метою ефективного використання англійської мови у професійних та загальнонаукових цілях.

### **Компетентності, що мають бути сформовані**

Розуміти аутентичні англомовні тексти загальнонаукового та професійного змісту; презентувати детальну професійну інформацію, вживаючи відповідну термінологію; залучатися до дискусій, висловлювати свою думку стосовно змісту та форми матеріалу, що обговорюється; продукувати тексти академічного та професійного спрямування. Більш докладно:

- здатність спілкування іноземною мовою в конкретній професійній/фаховій сфері з урахуванням особливостей використання професійної/фахової лексики;
- уміння описати результати дослідження, викласти думку, повідомити про основні положення наукового дослідження;
- володіння навичками академічного спілкування іноземною мовою, в тому числі викладу результатів наукового дослідження;
- здатність сприймати та обробляти новітню фахову інформацію із наукових джерел іноземною мовою;
- виконувати письмовий переклад та письмовий анотаційний переклад текстів з відповідної галузі науки;
- диференціювати різні типи наукових текстів та структурувати їх відповідно до чинних міжнародних стандартів;
- усно та письмово представляти наукові результати іноземною мовою відповідно до вимог міжнародних стандартів;
- оптимізувати набір лексики та граматичних конструкцій при складанні наукових текстів різних типів (статей, анотацій, резюме, монографій, тез, доповідей на конференціях і т.ін.)
- лінгвістична, соціолінгвістична, соціокультурна, прагматична та риторична компетентності для забезпечення ефективного професійного спілкування іноземною мовою у науковому та академічному середовищі.

**При формуванні цих компетентностей основний акцент робиться на наступних програмних результатах навчання**

- лексичні, граматичні, стилістичні та структурні особливості англomовної наукової літератури;
- термінологія галузі наукового дослідження;
- граматичні структури, що є необхідними для адекватного вираження відповідних ідей та понять, а також для розуміння і продукування широкого спектру текстів у науковій сфері (усно та письмово).
- граматичні звороти, які є специфічними для наукової комунікації англійською мовою;
- типові для наукової комунікації лексико-синтаксичні моделі

**Підготовка наукових публікацій та презентація результатів досліджень**

Нормативна дисципліна, 4 кредити, 2-й семестр, цикл професійної підготовки.

Види занять: лекції, семінари, самостійна робота.

Підсумковий контроль: залік.

**Мета навчальної дисципліни**

Метою викладання навчальної дисципліни є формування у здобувачів ступеня доктора філософії комплексу навичок, необхідних для започаткування та виконання наукових проектів, презентації отриманих результатів, захисту інтелектуальної власності

**Компетентності, що мають бути сформовані**

Усно та письмово презентувати результати наукових досліджень на відповідному рівні, готувати пропозиції на фінансування наукових досліджень, управляти науковими проектами, захищати права інтелектуальної власності, забезпечувати академічну доброчесність. Більш докладно:

- обирати журнал для публікації результатів своїх досліджень;
- готувати рукопис статті у виді, прийнятному для відправлення до журналу;
- результативно взаємодіяти з редактором та рецензентами
- створювати презентацію доповіді;
- рецензувати рукописи наукових статей;
- готувати наукові запити та звіти;
- керувати виконанням наукових проектів;
- реєструвати права інтелектуальної власності;
- розуміти неприємність академічного шахрайства, включаючи плагіат та самоплагіат.

**При формуванні цих компетентностей основний акцент робиться на наступних програмних результатах навчання**

- наукометричні індекси: H-index та IF;
- прийнята структура наукових публікацій (статей, коротких повідомлень, оглядів);
- рекомендації щодо представлення мотивації, мети, викладу експерименту та розрахункових процедур, обговорення результатів, формулювання висновків, відбору цитованих джерел;
- види академічного шахрайства: підробка даних, фальсифікація, плагіат, самоплагіат, подвійна публікація, подвійне подання рукопису, неповний склад колективу авторів, відсутність посилань на роботи попередників тощо;

- технологія опрацювання рукописів у наукових виданнях – від вибору рецензентів до ухвалення рішення про прийняття статті, роль редактора, рецензентів, технічного редактора;
- вимоги до мови наукових англійських публікацій;
- принципи захисту інтелектуальної власності;
- принципи підготовки та управління науковими проектами;
- етичний кодекс автора та рецензента наукових публікацій;
- джерела фінансування наукових досліджень та підготовки запитів на фінансування наукових проектів

## **Сучасні комунікативні технології в освіті та наукових дослідженнях в хімії**

Нормативна дисципліна, 3 кредити, 4-й семестр, цикл професійної підготовки.

Види занять: лекції, практичні заняття, семінари, самостійна робота.

Підсумковий контроль: залік.

### **Мета навчальної дисципліни**

Мета викладання навчальної дисципліни – надати здобувачам ступеня доктора філософії можливість сформувати наступні навички: викладання циклу хімічних дисциплін у ВНЗ для студентів (аспірантів) різних науково-освітніх ступенів, організації та проведення наукових семінарів та конференцій, навички в галузі комунікативних технологій, необхідні для розвитку педагогічної та наукової кар'єри.

### **Компетентності, що мають бути сформовані**

- складати програму навчальної дисципліни;
- готувати лекцію, практичне, семінарське та лабораторне заняття та проводити відповідні заняття з хімічних дисциплін для бакалаврів, магістрів, аспірантів;
- планувати, організовувати та проводити науковий семінар, конференцію, з'їзд тощо локального, національного та міжнародного масштабу;
- шукати з застосуванням сучасних комунікативно-інформаційних технологій місце для працевлаштування в якості педагога (викладача) або науковця;
- складати резюме та мотиваційний лист;
- готуватися для співбесіди з потенційним роботодавцем.

### **При формуванні цих компетентностей основний акцент робиться на наступних програмних результатах навчання**

- нормативні документи національного рівня, що регламентують науково-педагогічну діяльність ВНЗ України;
- організація навчального процесу класичного університету;
- організація навчального процесу на хімічному факультеті класичного університету України;
- зміст навчальних планів бакалавра, магістра та аспіранта за спеціальністю 102 «Хімія»;
- нормативні документи національного та університетського рівня, що регламентують проведення наукових семінарів, конференцій, з'їздів тощо;
- історія, традиції та тематика наукових семінарів, конференцій, з'їздів тощо, які проводяться в галузі хімічної науки в Україні та світі;
- потенційні місця працевлаштування докторів філософії з хімії в Україні та світі.

## **Фізико-органічна хімія і функціональні матеріали**

Дисципліна за вибором, 18 кредитів, 3-й та 4-й семестри, цикл професійної підготовки.

Види занять: лекції, лабораторні заняття, практичні заняття, семінари, самостійна робота.

Підсумковий контроль: залік, екзамен.

### **Мета навчальної дисципліни**

Метою викладання навчальної дисципліни є сформувати у майбутніх докторів філософії чіткі уявлення щодо фундаментальних експериментальних та теоретичних принципів фізико-органічної хімії, їх тонких взаємозв'язків, навчити виявляти відповідність між структурою речовини та її фізико-хімічними властивостями, висвітлити значущість цих принципів для хімічного матеріалознавства, а саме створення, дослідження та втілення в практику різноманітних функціональних матеріалів, сформувати навички постановки та вирішення досить масштабних фундаментальних та прикладних задач в цій вагомій галузі сучасної хімії.

### **Компетентності, що мають бути сформовані**

Вільно орієнтуватися в сучасній науковій літературі, знаходити необхідні джерела та професійно користуватися ними для постановки і вирішення фундаментальних та прикладних завдань.

Грамотно обирати, виходячи з поставленої задачі, методи дослідження складу, структури та властивостей досліджуваних об'єктів; коректно проводити первинну обробку даних, оцінювати метрологічні характеристики результатів вимірювань. Надавати адекватну хімічну інтерпретацію отриманих результатів. Виявляти відповідність між структурою речовини та її фізико-хімічними властивостями. Більш докладно:

- використовувати комплекс сучасних магнітно-резонансних методів дослідження для визначення особливостей стереохімічної будови органічних молекул;
- досліджувати внутрішньомолекулярні взаємодії в молекулах органічних речовин;
- проводити первинну обробку спектральних даних, що отримані на серійних спектрометрах;
- проводити ідентифікацію та встановлення особливостей просторової будови органічних сполук на основі спектрів їх ЯМР;
- використовувати комплекс сучасних фізико-хімічних методів для дослідження внутрішньо- та міжмолекулярні взаємодії і встановлювати їх вплив на властивості органічних речовин та функціональних матеріалів на їх основі;
- кількісно оцінювати результат взаємодії органічних сполук та функціональних матеріалів на їх основі з електромагнітним випромінюванням ультрафіолетового та видимого діапазонів;

Грамотно обирати, виходячи з поставленої задачі, та використовувати наявні програми та програмні комплекси для розрахунку необхідних характеристик речовин і матеріалів. Надавати адекватну хімічну інтерпретацію отриманих результатів. Доводити достовірність проведених розрахунків. Більш докладно:

- використовувати існуючі програмні комплексами, які дозволяють розрахувати шукані молекулярні характеристики;
- проводити розрахунки електронного розподілу у основному стані молекул та комплексів;
- проводити розрахунки топологічних характеристик електронного розподілу та вміти класифікувати особливі точки на трьохвимірній поверхні електронної густини;
- провести розрахунки електронно-збуджених станів молекул;
- провести інтерпретацію розрахунку та класифікувати збуджені стани молекул;



- з використанням програмного пакету GROMACS, виконувати молекулярно-динамічне моделювання наночастинок золота і срібла у водному розчині у присутності органічного ліганду;
- вміти використовувати отриманні знання та прогнозувати фізико-хімічні властивості систем наночастинка-ліганд;
- проводити молекулярно-динамічне (МД) моделювання Car-Parrinello багатоатомних систем в конденсованому стані;
- проводити аналіз структурних та електричних властивостей молекул (іонів) за результатами Car-Parrinello МД моделювання;

**При формуванні цих компетентностей основний акцент робиться на наступних програмних результатах навчання**

- загальні основи стереохімії органічних сполук,
- ідентифікація та встановлення будови органічних речовин за допомогою сучасних магнітно-резонансних методів дослідження
- фізичні основи та принципи формування тонкої структури спектрів ЯМР, двовимірних гомо- та гетероядерних спектрів, їх можливості для визначення стереохімічної будови органічних молекул;
- фізичні основи та принципи двохчастотної ЯМР-спектроскопії;
- застосування ефекту Оверхаузера для встановлення геометрії органічних сполук у трьохвимірному просторі;
- фізичні основи та принципи дії електронної мікроскопії, особливості окремих різновидів електронної мікроскопії, основи їх використання у хімії та хімічному матеріалознавстві;
- фізичні основи та принципи використання у хімічному матеріалознавстві методів електронного парамагнітного резонансу та інфрачервоної спектроскопії;
- закономірності взаємодії світла з функціональними матеріалами на основі органічних сполук;
- принципи та можливості сучасних методів дослідження складу речовини, основи роботи з апаратурою для атомної та електронної спектроскопії; принципи застосування метрологічного апарату в хімії;
- застосування міжнародних стандартів та процедур підтвердження простежуваності та розрахунку невизначеності результатів вимірювань;
- основні положення супрамолекулярної хімії, класифікація супрамолекулярних систем, теоретичні основи їх створення та основні галузі застосування;
- основні типи функціональних матеріалів, найбільш поширені методи синтезу їх компонентів та технології створення;
- основні типи наноструктурованих матеріалів, особливості їх фізичних та хімічних властивостей, основні напрямки практичного застосування у сучасній науці та промисловості;
- основи сучасних методів створення об'ємних неорганічних матеріалів (скло, кераміка, кристали), і підходи, які дають можливість застосовувати наявну вихідну інформацію для розробки нових матеріалів;
- основні методи контролю функціональних властивостей неорганічних об'ємних матеріалів;
- фізичні основи квантової механіки та основні поняття що характеризують будову хвильової функції;
- існуючі підходи до опису електронного розподілу у молекулах;
- основи концепції теорії функціоналу густини;

- теоретичні засади розрахунку електронно-збуджених станів молекул в рамках теорії функціоналу густини (часово-залежна теорія функціоналу густини, TD-DFT);
- підходи до інтерпретації будови електронно-збуджених станів молекул в рамках теорії TD-DFT;
- основні напрямки, які використовуються для теоретичного дослідження та моделювання будови наночастинок благородних металів та їх фізико-хімічних властивостей;
- основні уявлення про будову наночастинок золота та срібла, та використання відповідної хімічної та фізичної термінології;
- основи *ab initio* молекулярно-динамічне (МД) моделювання;
- методологія використання теорії функціоналу (електронної) густини (DFT) у неемпіричному МД моделюванні;
- основи методу молекулярної динаміки Car-Parrinello.

### **Фізична хімія конденсованих систем**

Дисципліна за вибором, 18 кредитів, 3-й та 4-й семестри, цикл професійної підготовки.

Види занять: лекції, лабораторні заняття, практичні заняття, семінари, самостійна робота.

Підсумковий контроль: залік, екзамен.

#### **Мета навчальної дисципліни**

Метою викладання навчальної дисципліни є сформувати у майбутніх докторів філософії чіткі уявлення щодо фундаментальних принципів фізичної хімії конденсованих систем, їх суттєвих взаємозв'язків, висвітлити значущість цих принципів для створення, дослідження та втілення в практику широкого кола функціональних матеріалів, сформувати навички постановки та вирішення досить масштабних фундаментальних та прикладних задач в цій важливій царині сучасної хімії.

#### **Компетентності, що мають бути сформовані**

Вільно орієнтуватися в сучасній науковій літературі, знаходити необхідні джерела та професійно користуватися ними для постановки і вирішення фундаментальних та прикладних завдань.

Грамотно планувати експериментальні умови синтезу нових речовин та створення нових матеріалів. Зокрема:

- планувати раціональне виготовлення нанодисперсних систем різного типу;
- прогнозувати термодинамічну стійкість нанодисперсних систем;
- виготовлювати ліофобні та ліофільні нанодисперсні системи із заданими властивостями (розподіл частинок за розмірами, електричні властивості).

Грамотно обирати, виходячи з поставленої задачі, методи дослідження складу, структури та властивостей досліджуваних об'єктів; коректно проводити первинну обробку даних, оцінювати метрологічні характеристики результатів вимірювань. Надавати адекватну хімічну інтерпретацію отриманих результатів. Виявляти відповідність між структурою речовини та її фізико-хімічними властивостями. Зокрема:

- визначати константи кислотно-основних рівноваг у міцелярних розчинах поверхнево-активних речовин та споріднених системах;
- вивчати кінетику хімічних процесів у цих системах;
- проводити кількісну обробку ізотерм поверхневого натягу (двовірного тиску) у разі створення моношарів на поверхні води;
- проводити докладне дослідження органо-мінеральних наноматеріалів;

- використовувати комплекс сучасних магнітно-резонансних методів дослідження для визначення особливостей стереохімічної будови органічних молекул;
- проводити первинну обробку спектральних даних, що отримані на серійних спектрометрах;
- проводити ідентифікацію та встановлення особливостей просторової будови органічних сполук на основі спектрів їх ЯМР;
- кількісно оцінювати результат взаємодії органічних сполук та функціональних матеріалів на їх основі з електромагнітним випромінюванням ультрафіолетового та видимого діапазонів;

Грамотно обирати, виходячи з поставленої задачі, та використовувати наявні програми та програмні комплекси для розрахунку необхідних характеристик речовин і матеріалів. Надавати адекватну хімічну інтерпретацію отриманих результатів. Доводити достовірність проведених розрахунків. Зокрема:

- використовувати існуючі програмні комплексами, які дозволяють розрахувати шукані молекулярні характеристики;
- проводити розрахунки електронного розподілу у основному стані молекул та комплексів;
- проводити розрахунки топологічних характеристик електронного розподілу та вміти класифікувати особливі точки на трьохвимірній поверхні електронної густини;
- провести розрахунки електронно-збуджених станів молекул;
- провести інтерпретацію розрахунку та класифікувати збуджені стани молекул;
- з використанням програмного пакету GROMACS, виконувати молекулярно-динамічне моделювання наночастинок золота і срібла у водному розчині у присутності органічного ліганду;
- вміти використовувати отримані знання та прогнозувати фізико-хімічні властивості систем наночастинок-ліганд;
- проводити молекулярно-динамічне (МД) моделювання Car-Parrinello багатоатомних систем в конденсованому стані;
- проводити аналіз структурних та електричних властивостей молекул (іонів) за результатами Car-Parrinello МД моделювання;
- використовувати методи молекулярної динаміки для характеристики ліофільних нанодисперсних систем.

**При формуванні цих компетентностей основний акцент робиться на наступних програмних результатах навчання**

- методи класифікації, основні підходи до виготовлення (синтезу) нанодисперсних систем;
- сучасні уявлення щодо агрегативної стійкості ліофобних нанодисперсних систем, зокрема положення теорії Дерягіна – Ландау – Фервея – Овербека, її розвиток та сучасний стан;
- типи та різновиди ліофільних нанодисперсних систем; моделювання міцел поверхнево-активних речовин та інших агрегатів подібного типу методами молекулярної динаміки;
- методи вимірювання електрокінетичного потенціалу нанодисперсних об'єктів;
- підходи до опису іонних рівноваг, зокрема кислотно-основних, у водних міцелярних розчинах поверхнево-активних речовин, за допомогою електростатичної моделі (рівняння Хартлі – Макерджи – Фунасакі – Фромгерца) та моделі псевдофазного іонного обміну;
- аналогічні підходи до рівноваг у прямих та обернених мікроемульсіях, суспензіях ліпосом фосфоліпідів, тощо;

- методи опису кінетики хімічних реакцій у міцелах поверхнево-активних речовин та споріднених системах, зокрема теорія Березіна – Бантона;
- основні теорії молекулярної адсорбції на твердих адсорбентах, класифікація адсорбентів та типи рівнянь ізотерм;
- особливості молекулярної адсорбції з розчинів та з газової фази;
- кількісний опис іонного обміну, властивості іонітів;
- властивості розчинних поліелектролітів;
- основні теорії адсорбції молекул на межі поділу вода–повітря та вода–неполярний розчинник;
- основні сучасні уявлення щодо адсорбції електролітів на межі поділу вода–повітря та вода–неполярний розчинник;
- рівняння двомірного стану речовини;
- основні положення кількісного фізико-хімічного аналізу;
- особливості інтерпретації результатів досліджень модельних та реальних поверхонь;
- ідентифікація та встановлення будови органічних речовин за допомогою сучасних магнітно-резонансних методів дослідження
- фізичні основи та принципи двохчастотної ЯМР-спектроскопії;
- фізичні основи та принципи дії електронної мікроскопії, особливості окремих різновидів електронної мікроскопії, основи їх використання у хімії та хімічному матеріалознавстві;
- фізичні основи та принципи використання у хімічному матеріалознавстві методів електронного парамагнітного резонансу та інфрачервоної спектроскопії;
- закономірності взаємодії світла з функціональними матеріалами на основі органічних сполук;
- принципи та можливості сучасних методів дослідження складу речовини, основи роботи з апаратурою для атомної та електронної спектроскопії; принципи застосування метрологічного апарату в хімії;
- застосування міжнародних стандартів та процедур підтвердження простежуваності та розрахунку невизначеності результатів вимірювань;
- фізичні основи квантової механіки та основні поняття що характеризують будову хвильової функції;
- існуючі підходи до опису електронного розподілу у молекулах;
- основи концепції теорії функціоналу густини;
- теоретичні засади розрахунку електронно-збуджених станів молекул в рамках теорії функціоналу густини (часово-залежна теорія функціоналу густини, TD-DFT);
- підходи до інтерпретації будови електронно-збуджених станів молекул в рамках теорії TD-DFT;
- основні напрямки, які використовуються для теоретичного дослідження та моделювання будови наночастинок благородних металів та їх фізико-хімічних властивостей;
- основні уявлення про будову наночастинок золота та срібла, та використання відповідної хімічної та фізичної термінології;
- основи *ab initio* молекулярно-динамічне (МД) моделювання;
- методологія використання теорії функціоналу (електронної) густини (DFT) у неемпіричному МД моделюванні;
- основні положення супрамолекулярної хімії, класифікація супрамолекулярних систем, теоретичні основи їх створення та основні галузі застосування;
- основні типи функціональних матеріалів, найбільш поширені методи синтезу їх компонентів та технології створення;

- основні типи наноструктурованих матеріалів, особливості їх фізичних та хімічних властивостей, основні напрямки практичного застосування у сучасній науці та промисловості;
- основи сучасних методів створення об'ємних неорганічних матеріалів (скло, кераміка, кристали), і підходи, які дають можливість застосовувати наявну вихідну інформацію для розробки нових матеріалів;
- основні методи контролю функціональних властивостей неорганічних об'ємних матеріалів;

## Наукова складова науково-освітньої програми

Згідно п. 29 «Порядку» наукова складова передбачає проведення власного наукового дослідження під керівництвом одного або двох наукових керівників та оформлення його результатів у вигляді дисертації.

Проведення наукового дослідження та підготовка дисертаційної роботи забезпечують формування *інтегральної компетентності*.

Наукова складова освітньо-наукової програми оформляється на весь термін навчання у вигляді індивідуального плану наукової роботи аспіранта відповідно до обраної теми наукового дослідження за спеціальністю.

Невід'ємною складовою освітньо-наукової програми є підготовка та публікація наукових статей, які репрезентують результати наукових досліджень. Наприкінці аспірантури результати оформляються у вигляді дисертації.

Потенційні тематики наукових досліджень аспірантів, які можуть бути підтримані науковими керівниками (що вказані у даних про кадрове забезпечення), можна орієнтовно окреслити наступним чином:

- Міцелярні розчини різних типів як середовища для дослідження хімічних рівноваг
- Нові органічні флуоресцентні сполуки - хемосенсиори для аналітичного застосування та маркери і зонди для медико-біологічних та екологічних потреб.
- Фотоактивні органічні сполуки: синтез, дослідження та квантово-хімічне моделювання фотофізичних властивостей і реакційної здатності в основному та електронно-збудженому станах.
- Багатокомпонентні реакції циклоконденсації як сучасний шлях до нових функціональних гетероциклічних систем, заснований на принципах "зеленої хімії".
- Природні сполуки як перспективні вихідні речовини для створення на їх основі потенційних лікарських засобів та функціональних матеріалів.
- Вивчення багатокомпонентних та лінійних реакцій гетероциклізації з керованою хемо-селективністю
- Використання методів віртуального скринінгу та молекулярного докінгу для пошуку нових біологічно активних сполук та лікарських засобів
- Теоретичні методи дослідження сильно корельованих багатоелектронних систем
- Синтез і дослідження низькорозмірних молекулярних кристалів та синтетичних металів
- Розробка методів синтезу нових гетероциклічних систем на основі енантімерно чистих природних хіральных сполук.

- Електрична провідність, сольватація та міжчастинкові взаємодії в розчинах літєвих солей в гама-бутиролактоні, пропіленкарбонаті та його сумішах з 1,2-диметоксиетаном
- Особливості фізико-хімічних властивостей висококонцентрованих розчинів R<sub>4</sub>NX (R=Bu, Et, X=BF<sub>4</sub>, Br) в ацетонітрилі
- Фізико-хімічні властивості та мікроструктура бінарних сумішей на основі імідазолєвих та піридинєвих іонних рідин з ацетонітрилом та метанолом
- Електрична провідність, асоціація та комплексо-утворення в ацетонітрильних розчинах перхлоратів двозарядних металів за участю 3-гідроксифлавону
- Особливості мікроструктури та динаміки неводних розчинників та електролітних розчинів у вуглецевих нанотрубках
- Мікроструктура та динаміка електролітних розчинів на основі ацетонітрилу та метанолу: молекулярно-динамічне моделювання
- В'язкість та динаміка міжчастинкових взаємодій у розчинах 1-1 і 2-1 електролітів в апротонних розчинниках
- Комп'ютерне моделювання диметилсульфоксиду та його електролітних розчинів методом молекулярної динаміки
- Міжчасткові взаємодії та динаміка молекул в електролітних розчинах n-гексанолу та ацетонітрилу за даними коливальної спектроскопії
- Рівноваги сорбції та комплексоутворення на поверхнях органо-мінеральних (нано)матеріалів
- Оптичні та нелінійно оптичні властивості π-спряжених олігомерів в локальній теорії зв'язаних кластерів
- Особливості протолітичних рівноваг на поверхні катіонних наночастинок у гідрофільних та гідрофобних дисперсіях
- L1-регуляризація в квантовій хімії
- Темодинамічні рівноваги у ліофільних нанодисперсних системах
- Хімічна кінетика у ліофільних нанодисперсних системах
- Агрегативна стійкість та руйнування ліофобних нанодисперсних систем

При виборі теми та керівника пошукувачі можуть знайти більш докладну інформацію на веб-сайті хімічного факультету, який репрезентує основні напрямки та динаміку наукових досліджень.

## **Система атестації здобувачів вищої освіти.**

Передбачені наступні методи контролю успішності навчання аспірантів.

Поточний контроль протягом семестру (60 балів за 100-бальною шкалою): опитування, допуск до лабораторної роботи, звіт за результатами лабораторної роботи, звіт за результатами самостійної роботи, оцінювання ступеню активності аспірантів та якості їх виступів з доповідями та коментарів при проведенні дискусій на семінарських заняттях, оцінювання творчих індивідуальних завдань (реферат).

Підсумковий контроль (40 балів за 100 бальною шкалою): залік, екзамен.

Умови нарахування балів протягом семестру вказуються в робочій програмі кожної дисципліни. Зразки екзаменаційних завдань з разбаловкою входять до складу науково-методичних комплексів дисциплін. За необхідності в робочій програмі можуть бути указані умови допуску до підсумкового контролю.

### **Заліки і екзамени, передбачені науково-освітньою програмою**

	Залік	Екзамен
Філософські засади та методологія наукових досліджень	1-й семестр	—
Іноземна мова для аспірантів	1-й семестр	2-й семестр
Підготовка наукових публікацій та презентація результатів досліджень	2-й семестр	—
Сучасні комунікативні технології в освіті та наукових дослідженнях в хімії	4-й семестр	—
Фізико-органічна хімія і функціональні матеріали	4-й семестр	3-й семестр
Фізична хімія конденсованих систем	4-й семестр	3-й семестр

### **Шкала оцінювання**

Сума балів за всі види навчальної діяльності протягом семестру	Оцінка за національною шкалою	
	для екзамену	для заліку
90-100	Відмінно	зараховано
70-89	Добре	
50-69	Задовільно	
1-49	Незадовільно	не зараховано

Загальним підсумком освітньо-наукової програми є публічний захист дисертації на здобуття ступеня доктора філософії у спеціалізованій вченій раді. Обов'язковою умовою допуску до захисту є успішне виконання аспірантом його індивідуального навчального плану.