

**ДЕРЖАВНИЙ ВИЩИЙ НАВЧАЛЬНИЙ ЗАКЛАД
«УЖГОРОДСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ»
ХІМІЧНИЙ ФАКУЛЬТЕТ
Кафедра неорганічної хімії**

«ЗАТВЕРДЖУЮ»
Проректор з наукової роботи ДВНЗ УжНУ



Студеняк І.П.
» 20 19 року

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

СУЧАСНІ ТЕНДЕНЦІЇ РОЗВИТКУ ХІМІЇ

Рівень вищої освіти	третій (освітньо-науковий)
Галузь знань	10 Природничі науки
Спеціальність	102 Хімія
Освітня програма	Освітньо-наукова програма для здобувачів третього рівня вищої освіти «доктор філософії»
Статус дисципліни	обов'язкова
Мова навчання	українська

Ужгород 2019

Робоча програма навчальної дисципліни «Сучасні тенденції розвитку хімії» для здобувачів третього рівня вищої освіти «доктор філософії»

Розробники: Барчій І.Є., проф., д.х.н., завідувач кафедри неорганічної хімії
Кепич М.В., проф., д.х.н., професор кафедри неорганічної хімії

Робочу програму розглянуто та затверджено на засіданні кафедри неорганічної хімії

протокол № 1 від «30» серпня 2019 р.
Завідувач кафедри _____ Барчій І.Є.

Схвалено науково-методичною комісією хімічного факультету
протокол № 1 від «4» вересня 2019 р.
Голова науково-методичної комісії _____ Кепич М.В.

1. ОПИС НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Найменування показників	Розподіл годин за навчальним планом	
	Денна форма навчання	Заочна форма навчання
Кількість кредитів ЄКТС – 4	Рік підготовки:	
Загальна кількість годин – 120	1-й	1-й
Кількість модулів – 2	Семестр:	
Тижневих годин для денної форми навчання: аудиторних – 5 самостійної роботи аспіранта – 8	1-й	1-й
	Лекції:	
	28	10
	Практичні (семінарські):	
	20	-
Вид підсумкового контролю: залік	Лабораторні:	
	-	-
Форма підсумкового контролю: усна	Самостійна робота:	
	72	80

2. МЕТА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Мета вивчення навчальної дисципліни «Сучасні тенденції розвитку хімії» полягає у формуванні у майбутніх докторів філософії знань про актуальні завдання хімії, основні тенденції цілеспрямованого пошуку нових сполук з необхідними прогнозованими властивостями як перспективних функціональних матеріалів; набуття теоретичних і практичних навичок синтезу різних класів хімічних неорганічних та органічних сполук; встановленні взаємозв'язків між складом, структурою, типом зв'язку у хімічних сполуках та їх властивостями; оптимізації наукових досліджень хімічних і фізичних властивостей шляхом використання сучасних методів аналізу..

Цілі: сприяння розвитку у здобувачів хімічного мислення і діалектичного світогляду; ознайомлення з основними напрямками розвитку сучасного матеріалознавства для одержання нових функціональних матеріалів для робочих елементів електронної техніки з перспективними термоелектричними, оптичними, сегнето- та феромагнітними властивостями для потреб «зеленої» енергетики, каталітичних систем нафто- та газопереробної промисловості, біологічноактивних органічних речовин для фармацевтичного виробництва; набуття практичних навичок проведення експериментальних досліджень із залученням сучасних методів аналізу; вироблення у здобувачі навичок самостійної роботи в лабораторії, інтерпретації та узагальнення одержаних результатів.

Відповідно до освітньо-наукової програми, вивчення дисципліни «Сучасні тенденції розвитку хімії» сприяє формуванню у здобувачів вищої освіти таких компетентностей:

загальні компетенції: здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу (ЗК-1); навички використання новітніх інформаційних і комунікаційних технологій (ЗК-2); здатність проведення самостійних досліджень на сучасному рівні (ЗК-3); здатність до пошуку, обробки на аналізу інформації з різних джерел (ЗК-4); здатність генерувати нові ідеї (креативність) (ЗК-5); здатність працювати в міжнародному науковому просторі (ЗК-6) здатність комунікації на фахову тематику з нефаківцями (ЗК-10).

фахові компетенції: здатність застосовувати хімічні знання для систематизації різноманітних пов'язаних фактів і явищ (ФК-1); здатність визначати завдання хімічного дослідження (ФК-2); здатність вирізняти із накопичених спостережень відтворювані експериментальні факти (ФК-3); здатність створювати та порівнювати між собою хімічні та математичні моделі хімічних об'єктів, процесів та явищ (ФК-4); здатність оцінювати моделі з точки зору їх відповідності хімічним об'єктам процесам та явищам, для пояснення яких застосовуються дані моделі (ФК-5); вміння здійснювати комп'ютерне моделювання хімічних процесів, у тому числі із застосуванням існуючого програмного забезпечення (ФК-6); знайомство з інформаційними технологіями та електронікою (ФК-8); володіння теоретичними методами, що застосовуються для дослідження хімічних систем та матеріалів (ФК-10).

3. ОЧІКУВАНІ РЕЗУЛЬТАТИ НАВЧАННЯ

Відповідно до освітньо-наукової програми, вивчення навчальної дисципліни повинно забезпечити досягнення здобувачами вищої освіти таких програмних результатів навчання (ПРН):

Програмні результати навчання	Шифр ПРН
Сучасні передові концептуальні та методологічні знання в галузі хімії та суміжних галузей знань.	ПРН1.1
Праці провідних зарубіжних вчених, наукових шкіл та фундаментальних праць у галузі дослідження.	ПРН 1.2
Проводити комплексні дослідження в галузі науково-дослідницької та інноваційної діяльності, які приводять до отримання нових знань.	ПРН 2.3
Формулювати наукову проблему з огляду на стан її наукової розробки та	ПРН 2.5

сучасні наукові тенденції.	
Аналізувати наукові праці в галузі хімії, виявляючи дискусійні та мало досліджені питання.	ПРН 2.7
Здійснювати моніторинг наукових джерел інформації відносно досліджуваної проблеми.	ПРН 2.8
Визначати інформаційну цінність джерел шляхом порівняльного аналізу з іншими джерелами.	ПРН 2.10
Вести спілкування в діалоговому режимі з широкою науковою спільнотою та громадськістю в галузі хімії.	ПРН 3.1
Кваліфіковано відображати результати наукових досліджень у наукових статтях у фахових виданнях, вести конструктивний діалог з рецензентами та редакторами.	ПРН 3.2
Уміти використовувати сучасні інформаційні та комунікативні технології при спілкуванні, обміні інформацією, зборі, аналізі, обробці, інтерпретації джерел.	ПРН 3.5
Ініціювати наукові та інноваційні комплексні проекти в галузі хімії, лідерство та автономність під час їх реалізації.	ПРН 4.1
Діяти, дотримуючись принципів соціальної відповідальності, на основі етичних міркувань (мотивів).	ПРН 4.2
Приймати обґрунтовані рішення, мотивувати людей та рухатися до спільної мети.	ПРН 4.4

Очікувані результати навчання, які повинні бути досягнуті здобувачами освіти після опанування навчальної дисципліни «Сучасні тенденції розвитку хімії»:

Здобувач повинен:

Знати: основні засади організації наукових досліджень в галузі хімії, застосування наукового підходу до вивчення складних хімічних систем, методи синтезу неорганічних, органічних та гібридних органо-неорганічних речовин, сучасні методи фізико-хімічного аналізу, кристалографії, квантово-хімічних розрахунків для вивчення властивостей нових матеріалів.

Вміти: самостійно працювати з науковою спеціалізованою хімічною літературою та професійно користуватися нею для постановки і вирішення фундаментальних та прикладних завдань, використовувати засвоєний матеріал у практичній діяльності для вирішення конкретних задач щодо синтезу та очистки хімічних речовин, вивченню взаємодії у хімічних системах, встановлювати взаємозв'язок між складом речовин, їх кристалічної структурою, електрофізичними властивостями та прогнозувати можливі напрямки їх практичного використання, надавати адекватну хімічну інтерпретацію отриманих результатів.

Шифр ОРН	Очікувані результати навчання з дисципліни	Шифр ПРН
ОРН 1	Сучасні передові концептуальні та методологічні знання в галузі хімії та суміжних галузей знань.	ПРН1.1
ОРН 2	Праці провідних зарубіжних вчених, наукових шкіл та фундаментальних праць у галузі дослідження.	ПРН 1.2
ОРН 3	Проводити комплексні дослідження в галузі науково-дослідницької та інноваційної діяльності, які приводять до отримання нових знань.	ПРН 2.3
ОРН 4	Формулювати наукову проблему з огляду на стан її наукової розробки та сучасні наукові тенденції.	ПРН 2.5
ОРН 5	Аналізувати наукові праці в галузі хімії, виявляючи дискусійні та мало досліджені питання.	ПРН 2.7
ОРН 6	Здійснювати моніторинг наукових джерел інформації відносно	ПРН 2.8

	досліджуваної проблеми.	
ОРН 7	Визначати інформаційну цінність джерел шляхом порівняльного аналізу з іншими джерелами.	ПРН 2.10
ОРН 8	Вести спілкування в діалоговому режимі з широкою науковою спільнотою та громадськістю в галузі хімії.	ПРН 3.1
ОРН 9	Кваліфіковано відображати результати наукових досліджень у наукових статтях у фахових виданнях, вести конструктивний діалог з рецензентами та редакторами.	ПРН 3.2
ОРН 10	Уміти використовувати сучасні інформаційні та комунікативні технології при спілкуванні, обміні інформацією, зборі, аналізі, обробці, інтерпретації джерел.	ПРН 3.5
ОРН 11	Ініціювати наукові та інноваційні комплексні проекти в галузі хімії, лідерство та автономність під час їх реалізації.	ПРН 4.1
ОРН 12	Діяти, дотримуючись принципів соціальної відповідальності, на основі етичних міркувань (мотивів).	ПРН 4.2
ОРН 13	Приймати обґрунтовані рішення, мотивувати людей та рухатися до спільної мети.	ПРН 4.4

Вивчення курсу «Сучасні тенденції розвитку хімії» потребує використання знань здобувачів з курсів неорганічної, органічної, аналітичної, фізичної хімії, кристалохімії, будови речовин, фізико-хімічних методів аналізу, квантової хімії, які були набуті за програмами освітньо-кваліфікаційних рівнів *бакалавр* та *магістр*.

4. ЗАСОБИ ДІАГНОСТИКИ ТА КРИТЕРІЇ ОЦІНЮВАННЯ РЕЗУЛЬТАТІВ НАВЧАННЯ

Засоби оцінювання та методи демонстрування результатів навчання

Засобами оцінювання та методами демонстрування результатів навчання з навчальної дисципліни є:

- поточний контроль успішності,
 - модульний контроль,
 - підсумковий контроль.
- ОРН 1 – усна відповідь, виконання практичних навичок,
ОРН 2 – усна відповідь, виконання практичних навичок,
ОРН 3 – усна відповідь, виконання практичних навичок,
ОРН 4 – усна відповідь, виконання практичних навичок,
ОРН 6 – усна відповідь, виконання практичних навичок,
ОРН 7 – усна відповідь, виконання практичних навичок.
ОРН 8 – усна відповідь, виконання практичних навичок,
ОРН 9 – усна відповідь, виконання практичних навичок,
ОРН 10 – усна відповідь, виконання практичних навичок,
ОРН 11 – усна відповідь, виконання практичних навичок,
ОРН 12 – усна відповідь, виконання практичних навичок,
ОРН 13 – усна відповідь, виконання практичних навичок.

...

Форми контролю та критерії оцінювання результатів навчання

Форми поточного контролю:

- вибіркове усне опитування перед початком занять;
- фронтальне стандартизоване усне та/або письмове опитування за основними питаннями теми заняття;

- експрес-опитування;
- реферативні повідомлення та їх обговорення;
- перевірка якості виконання завдань для самостійної роботи, зокрема за конспектами матеріалів;
- оцінювання якості та повноти виконання завдань модульної контрольної роботи.

Форма модульного контролю: виконання модульної контрольної роботи, результати якої оцінюються за 60-бальною шкалою (100%) за кожний модуль.

Форма підсумкового семестрового контролю: залік. До заліку допускаються аспіранти, які відпрацювали пропущені заняття і виконали модульні контрольні роботи.

Розподіл балів, які отримують здобувачі третього рівня вищої освіти (модуль I)

Поточне оцінювання та самостійна робота			Модульна контрольна робота	Практичні роботи	Сума
T1–T8	П1	П2	60	60	120
–	30	30			

T1, T2, T3, T4, T5, T6, T7, T8 – теми лекцій, П1, П2 – практичні роботи

Розподіл балів, які отримують здобувачі третього рівня вищої освіти (модуль II)

Поточне оцінювання та самостійна робота			Модульна контрольна робота	Практичні роботи	Сума
T9–T14	П3	П4	60	60	120
–	30	30			

T8, T9, T10, T11, T12, T13, T14 – теми лекцій, П3, П4 – практичні роботи

Оцінювання окремих видів навчальної роботи з дисципліни

Вид діяльності здобувача вищої освіти	Модуль 1		Модуль 2	
	Кількість	Максимальна кількість балів (сумарна)	Кількість	Максимальна кількість балів (сумарна)
Практичні (семінарські) заняття	2	60	2	60
Лабораторні заняття (допуск, виконання та захист)		-		
Комп'ютерне тестування при тематичному оцінюванні		-		
Письмове тестування при тематичному оцінюванні				
Презентація		-		
Реферат		-		
Есе		-		
...		-		
Модульна контрольна робота	1	60	1	60
Разом	3	120	3	120

Критерії оцінювання модульної контрольної роботи

Модульна контрольна робота здійснюється у письмовій формі шляхом відповідей на питання тестових завдань. Кожна правильна відповідь оцінюється певною кількістю балів. Максимальна кількість балів за кожну модульну контрольну роботу становить 60 (100%) балів. Мінімальна кількість балів, за якої робота вважається виконаною, 36 (60%) балів.

Критерії оцінювання підсумкового семестрового контролю

Підсумковий семестровий контроль з дисципліни «Сучасні тенденції розвитку хімії» здійснюється у виді заліку. Залік проводиться в усній формі шляхом співбесіди.

Кількість балів, яку набрав здобувач з дисципліни «Сучасні тенденції розвитку хімії», визначається як середнє арифметичне кількості балів з відповідних модулів дисципліни. Загальна кількість балів складає 240 рейтингових балів (100%). Переведення кількості набраних балів в оцінку здійснюється згідно схеми:

Оцінка за шкалою балів	Залік	ECTS	
		Оцінка	Характеристика
90 та вище	зараховано	A	відмінно
82-89 74-81	зараховано	B	добре
	зараховано	C	добре
64-73 60-63	зараховано	D	задовільно
	зараховано	E	задовільно
35-59	незараховано	FX	незадовільно з можливістю перескладання
0-34	незараховано	F	незадовільно з обов'язковим повторним навчанням

За результатами контролю знань здобувачів, дозволяється виставлення семестрової оцінки (без здачі) – «відмінно», «добре», та «задовільно» (D). Здобувач має право підвищити оцінку, складаючи залік.

Залік виставляється (без складання) у випадку набору кількості балів, що відповідає мінімальній оцінці «задовільно» (D).

Оцінки FX, F («2») виставляються здобувачам, яким не зараховано хоча б один модуль з дисципліни після завершення її вивчення.

Здобувачу з оцінкою FX дозволяється скласти підсумковий модульний контроль. У випадку повторного одержання ним незадовільної оцінки, здобувач має право на повторне складання підсумкового модульного контролю (заліку) не більше 2-х разів, згідно затвердженого графіка.

Здобувачі, які одержали оцінку F по завершенню вивчення дисципліни (не виконали навчальну програму хоча б з одного модуля, або не набрали за поточну навчальну діяльність з модуля мінімальну кількість балів), повинні пройти повторне навчання за індивідуальним навчальним планом. Аспірант, який отримав за результатами підсумкового контролю оцінку «незараховано» (0-34 балів, F), зобов'язаний пройти повторний курс вивчення дисципліни (під час додаткового семестру) і скласти залік.

Результати підсумкового контролю знань заносяться до залікової відомості.

5. ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

5.1. Зміст навчальної дисципліни

Модуль I. Методи синтезу нових матеріалів

Конкретні цілі:

Здобувачі повинні на основі виявлених напрямів сучасної хімії здійснювати аналіз та прогнозування перспективних досліджень (із залученням матеріалі власних дисертаційних проєктів), досягти розуміння важливої соціальної та екологічної ролі хімічної науки та її впливу на подальше життя людства та розвиток природи, визначати тенденції розвитку сучасної хімії у міждисциплінарному контексті.

Тема 1. Складні сполуки та композитні матеріали. (2 години).

Характеристика хімічних сполук (простих та складних), твердих розчинів на основі компонентів взаємодії (індивідуальних сполук), механічних сумішей (евтектичних, перитектичних та ін.). Визначальні характеристиками композитних матеріалів. Вимоги до композитних матеріалів. Класифікація конструкційних матеріалів за природою матеріалів, технологічними особливостями переробки, умовами роботи. Критерії вибору композитних матеріалів за технологічними властивостями матеріалів та показниками економічної ефективності.

Тема 2. Дослідження основних фізико-хімічних параметрів багатокомпонентних неорганічних систем як теоретичної основи цілеспрямованого синтезу нових матеріалів з прогнозованими властивостями. (2 години).

Система: фізико-хімічна, гомогенна, гетерогенна. Твердофазний стан речовини. Електронна, кристалічна структура та їх вплив на хімічні властивості твердих тіл та матеріалів. Термодинаміка твердого стану речовини. Кінетика хімічних реакцій у твердих тілах, процеси кристалізації, дифузії, топохімічні реакції (реакції на поверхні розділу фаз). Фізико-хімічні основи вирощування моно- та полікристалічних матеріалів. Твердофазний синтез (спікання), кристалізація з розчинів, хімічне осадження з газової фази. Процеси утворення кристалів з рідини, газової фази; кінетика та механізм росту кристалів. Реактивна дифузія. Фази змінного складу. Дефекти в будові твердих тіл (точкові дефекти, дислокації) та їх вплив на хімічні процеси. Дво- та трикомпонентні системи з утворенням проміжних сполук та твердих розчинів на їх основі. Вибір компонентів взаємодії для одержання сполук з прогнозованими властивостями.

Тема 3. Комплексні неорганічні та метал-органічні сполуки. Методи синтезу координаційних сполук. (2 години).

Хімія комплексних сполук як складова сучасної хімії. Типи комплексних сполук. Геометрія комплексних сполук. Комплексні сполуки перехідних металів та їх роль у біологічних процесах. Методи одержання комплексних сполук. Метал-органічні комплекси. Стабільність метал-органічних комплексів (емпіричне правило 18 електронів). Особливості препаративного синтезу металоорганічних комплексних сполук (чутливість органічного ліганду до процесів гідролізу та окиснення. Багатоядерні комплексні сполуки.

Тема 4. Спрямований пошук та синтез складних халькоген-галогенідні сполук як матеріалів елементної бази для фотовольтики (елементів сонячних батарей), термоелектрики для генерації та виробництва екологічно-чистої енергії. (2 годин).

Теоретичне обґрунтування одержання нових речовин з передбачуваними характеристиками на основі вивчення характеру фізико-хімічної взаємодії в багатокомпонентних халькоген-галогенідних системах. Переваги електронних пристроїв на основі складних сполук за своїми характеристиками над елементарними напівпровідниками. Бінарні галогені дні та халькогенідні алмазоподібні напівпровідники в системах $A^{III}-B^V$, $A^{II}-B^{VI}$, A^I-B^{VII} . Функціональні термоелектричні матеріали на основі $PbTe$, $Sn_{1-x}Pb_xTe$, Sb_2Te_3 ,

$\text{Bi}_2\text{Se}_3(\text{Te}_3)$, електрооптичні, нелінійно-оптичні та анізотропні напівпровідники на основі $\text{Cd}(\text{Zn})\text{S}(\text{Se}, \text{Te})$, $\text{GaP}(\text{As}, \text{Sb})$, $\text{InP}(\text{As}, \text{Sb})$, фотоелементи, люмінофори, генератори та перетворювачі випромінювання на основі $\text{Ag}_2\text{S}(\text{Se})$, GaAs , Al_2O_3 . Перовскітні неорганічні та органо-неорганічні матеріали для фотовольтики.

Тема 5. *Тенденції розвитку полімерної хімії. Синтез високомолекулярних сполук, їх застосування. (2 години).*

Методи синтезу, властивості і застосування мономерів і полімерів на їх основі. Застосування сучасних фізико-хімічних методів дослідження мономерів та полімерів. Впливу функціональних груп на властивості полімерів. Використання полімерних матеріалів в органічній, аналітичній, неорганічній та фізичній хімії.

Тема 6. *Розробка новітніх методів одержання халькогенвмісних гетероциклічних органічних сполук як біоактивних речовин. (2 години).*

Синтез халькогенвмісних гетероциклічних органічних сполук електрофільною циклізацією ненасичених халькогеноетерів гетероциклів. Використання галогенідів халькогенів в синтезі гетероциклічних сполук. Тетрагалогеніди селену і телуру, арилтелур(селен)галогеніди в синтезі гетероциклічних сполук з фунгіцидною, бактерицидною, протигрибковою та протималярійною активностями. Особливості синтезу халькогенорганічних гетероциклів та доказу структури фізико-хімічними методами.

Тема 7. *Каталітичні системи. (2 години).*

Створення нових хімічних процесів з високоефективними каталітичними системами. Сучасні теорії каталізу: фізичні теорії каталізу (адсорбційні теорії), хімічні теорії каталізу (теорії проміжних сполук), узагальнені теорії каталізу (теорія активованої адсорбції, мультиплетна теорія, ланцюгова теорія, теорія активних центрів та ін.). Механізм процесів каталізу на поверхні твердого каталізатору. Промислові процеси між газоподібними реагентами за участі твердих каталізаторів. Застосовування каталітичних систем для вирішення енергетичних і екологічних проблем.

Тема 8. *Молекулярні сита. Механізми вилучення важких металів природними цеолітами. Методи модифікації природних форм. (2 години).*

Використання природного та штучного цеоліту в якості молекулярних сит. Особливості кристалічної структури цеолітів. Методи модифікації природних форм цеолітів. Практика промислового використання цеолітів у нафтогазовому комплексі. Використання цеолітів для глибокого зневозужування газу при виробництві скрапленого газу. Адсорбція важких металів природними та штучними цеолітами. Йono-обмінні реакції між катіонами цеолітного каркасу та іонами важких металів. Роль цеолітів у процесах ремедіації ґрунтів та очистки стічних.

Модуль II. Сучасні методи дослідження матеріалів

Конкретні цілі:

Здобувачі повинні оволодіти інформацією про сучасні методи дослідження та аналізу неорганічних та органічних речовин, полімерних та інших функціональних матеріалів, які використовуються в найрізноманітніших сферах діяльності людей та вміти проводити такі дослідження.

Тема 9. *Сучасний стан розвитку аналітичних методів ідентифікації та визначення окремих форм елементів. (2 години).*

Потреби та проблеми визначення різних форм елементів у природних та технічних об'єктах. Неорганічні, органічні та інші хімічні форми знаходження елементів у довкіллі. Застосування класичних інструментальних методів для визначення різних форм р- і d-елементів. Комбіновані методи аналізу при вирішенні проблем ідентифікації та кількісного речовинного аналізу.

Тема 10. *Використання рентгеноструктурного аналізу для визначення особливостей будови кристалічної ґратки та типу хімічного зв'язку у сполуках. (2 години).*

Метод рентгенівського структурного аналізу (X-ray) для визначення кристалічної будови хімічних сполук, встановлення дефектності структур. Встановлення характеристик елементарної кристалічної комірки твердих тіл, встановлення розмірів і просторової орієнтації кристалітів, розмірів і форми елементарної кристалічної комірки координат атомів багатоатомних неорганічних та органічних сполук. Сучасні програмовані комплекси.

Тема 11. Якісний та кількісний рентгенівський фазовий аналіз сумішей. (2 години).

Рентгенівський фазовий аналіз (X-ray) у процесі визначення фазового складу механічних сумішей, композитних матеріалів на основі евтектичних сумішей, встановленні меж розчинності компонентів у твердому стані Встановлення механізмів утворення твердих розчинів.

Тема 12. Спектральні методи встановлення елементного складу речовин. (2 години).

Метод скануючої електронної спектроскопії (SEM, XRD), рентгенівська флуоресцентна (XFS) та рентгенівська фотоелектронна (XPS) спектроскопії для встановлення складу хімічних сполук. Методи ядерної магнітно-резонансної (NMR) та протонної магнітно-резонансної (PMR) спектроскопій для аналізу будови органічних речовин.

Тема 13. Сучасні квантово-хімічні методи розрахунку властивостей неорганічних та органічних сполук. (2 години).

Напівемпіричні і неемпіричні методи розрахунку структури і властивостей молекул та речовин. Розрахунки між'ядерних відстаней і валентних кутів, енергії хімічних зв'язків, бар'єрів внутрішнього обертання і бар'єрів переходу між різними конформаціями молекул, енергії активації найпростіших хімічних реакцій. Інтерпретація спектральних характеристик молекул. Сучасні квантово-хімічними програмами. Використання масивів даних рентгенівських досліджень для проведення квантово-хімічних розрахунків.

Тема 14. Встановлення закономірностей склад-структура-властивості з метою направленої синтезу нових речовин. (2 години).

Вплив на властивості сполук числа та хімічної природи, геометрії, розмірних факторів атомів, які розташовані у першій координаційній сфері, величини міжатомних відстаней у кристалах. Кореляція між складом, хімічною будовою, типу хімічних зв'язків у сполуках та їх властивостями. Прогнозування зміни характеру хімічних зв'язків у сполуках для цілеспрямованого синтезу матеріалів з необхідними властивостями.

5.2. Структура навчальної дисципліни

Назви змістових модулів і тем	Кількість годин					
	Форма навчання: денна					
	у тому числі					
	Усього 120	Лекції 28	практичні (семінарські) 20	лабораторні	індивідуальна робота	самостійна робота 72
1-й семестр						
Модуль 1						
Тема 1. Складні сполуки та композитні матеріали.	6	2				4
Тема 2. Дослідження основних фізико-хімічних параметрів багатокомпонентних неорганічних систем як теоретичної основи цілеспрямованого синтезу нових матеріалів з прогнозованими властивостями.	9	2	2			5
Тема 3. Комплексні неорганічні та метал-органічні сполуки. Методи синтезу координаційних сполук.	6	2				4

Тема 4. Спрямований пошук та синтез складних халькоген-галогенідні сполук як матеріалів елементної бази для фотовольтики (елементів сонячних батарей), термоелектрики для генерації та виробництва екологічно-чистої енергії.	9	2	2			5
Тема 5. Тенденції розвитку полімерної хімії. Синтез високомолекулярних сполук, їх застосування.	8	2	2			4
Тема 6. Розробка новітніх методів одержання халькогенвмісних гетероциклічних органічних сполук як біоактивних речовин.	8	2	2			4
Тема 7. Каталітичні системи. (2 години).	6	2				4
Тема 8. Молекулярні сита. Механізми вилучення важких металів природними цеолітами. Методи модифікації природних форм.	8	2	2			4
Модульна контрольна робота						
Разом за модуль	60	16	10			34
Модуль 2						
Тема 9. Сучасний стан розвитку аналітичних методів ідентифікації та визначення окремих форм елементів.	10	2				8
Тема 10. Використання рентгеноструктурного аналізу для визначення особливостей будови кристалічної ґратки та типу хімічного зв'язку у сполуках.	10	2	2			6
Тема 11. Якісний та кількісний рентгенівський фазовий аналізи сумішей.	10	2	2			6
Тема 12. Спектральні методи встановлення елементного складу речовин.	10	2	2			6
Тема 13. Сучасні квантово-хімічні методи розрахунку властивостей неорганічних та органічних сполук.	10	2	2			6
Тема 14. Встановлення закономірностей склад-структура-властивості з метою направленої синтезу нових речовин.	10	2	2			6
Модульна контрольна робота	2					
Разом за модуль	60	12	10			38
Разом за семестр	120	28	20			72

Назви змістових модулів і тем	Кількість годин					
	Форма навчання: заочна					
	у тому числі					
	Усього 90	Лекції 10	практичні (семінарські)	лабораторні	індивідуальна робота	самостійна робота 80
1-й семестр						
Модуль 1						
Тема 1. Складні сполуки та композитні матеріали.	5,5	0,5				5

Тема 2. Дослідження основних фізико-хімічних параметрів багатокомпонентних неорганічних систем як теоретичної основи цілеспрямованого синтезу нових матеріалів з прогнозованими властивостями.	5,5	0,5				5
Тема 3. Комплексні неорганічні та метал-органічні сполуки. Методи синтезу координаційних сполук.	5,5	0,5				5
Тема 4. Спрямований пошук та синтез складних халькоген-галогенідні сполук як матеріалів елементної бази для фотовольтики (елементів сонячних батарей), термоелектрики для генерації та виробництва екологічно-чистої енергії.	6	1				5
Тема 5. Тенденції розвитку полімерної хімії. Синтез високомолекулярних сполук, їх застосування.	5,5	0,5				5
Тема 6. Розробка новітніх методів одержання халькогенвмісних гетероциклічних органічних сполук як біоактивних речовин.	6	1				5
Тема 7. Каталітичні системи. (2 години).	5,5	0,5				5
Тема 8. Молекулярні сита. Механізми вилучення важких металів природними цеолітами. Методи модифікації природних форм.	5,5	0,5				5
Модульна контрольна робота						
Разом за модуль	45	5				40
Модуль 2						
Тема 9. Сучасний стан розвитку аналітичних методів ідентифікації та визначення окремих форм елементів.	6,5	0,5				6
Тема 10. Використання рентгеноструктурного аналізу для визначення особливостей будови кристалічної ґратки та типу хімічного зв'язку у сполуках.	7,5	1				7
Тема 11. Якісний та кількісний рентгенівський фазовий аналізи сумішей.	7,5	0,5				7
Тема 12. Спектральні методи встановлення елементного складу речовин.	7,5	1				7
Тема 13. Сучасні квантово-хімічні методи розрахунку властивостей неорганічних та органічних сполук.	7,5	1				7
Тема 14. Встановлення закономірностей склад-структура-властивості з метою направленої синтезу нових речовин.	6,5	1				6
Модульна контрольна робота						
Разом за модуль	45	5				40
Разом за семестр	90	10				80

5.3. Теми практичних занять (денна форма навчання)

Вид заняття	Тема і назва роботи	Кількість годин
	Модуль I. Методи синтезу нових матеріалів	
Практична робота №1	Однотемпературний метод синтезу складних халькогенідних сполук. Двохтемпературний метод синтезу складних галогенідних сполук. Ідентифікація складних галоген-халькогенідних сполук термічним та рентгенівськими методами. Вивчення кристалічної структури та встановлення типу хімічного зв'язку у сполуках. Дослідження електричних та оптичних властивостей.	5
Практична робота №2	Тетрагалогеніди селену і телуру, арилтелур(селен)галогеніди в синтезі гетероциклічних сполук. Особливості синтезу халькогенорганічних гетероциклів. Вивчення структури органічних сполук методами рентгенівського аналізу, ЯМР та ПМР спектроскопії. Вивчення фунгіцидної, бактерицидної, протигрибкової активності халькогенорганічних гетероциклічних сполук.	5
	Модуль II. Сучасні методи дослідження матеріалів	
Практична робота №3	Модифікація природних форм цеолітів. Встановлення складу (SEM, XRD, XFS, RS) та структури X-ray, XPS). Дослідження механізмів вилучення іонів важких металів (Cu^{2+} , Cr^{3+} , Fe^{2+} , Fe^{3+}) модифікованими формами цеолітів.	5
Практична робота №4	Квантово-хімічні розрахунки електронної структури та властивостей молекул неорганічних, комплексних та органічних сполук. Напівемпіричні і неемпіричні методи розрахунку Встановлення міжатомних відстаней, валентних кутів, енергетичних характеристик, густини розподілу заряду та щільності перекриття електронних хмар. Геометрична оптимізація будови молекул за мінімумом енергії. Аналіз вібраційних спектрів. Розрахунок енергії активації хімічних реакцій.	5
	Разом:	20

5.4. Самостійна робота

№ модуля	Зміст	Кількість годин денна/заочна
Модуль I. Методи синтезу нових матеріалів	Огляд фазових рівноваг у дво- та трикомпонентних неорганічних системах, одержання та властивості комплексних неорганічних металоорганічних сполук, особливості синтезу халькогенвмісних гетероциклічних органічних сполук, використання молекулярних сит на основі природних та модифікованих форм цеолітів, які опубліковані у наступних виданнях: 1. V.Tomashik, P.Feychuk, L.Shcherbak. Ternary alloys based on II-VI semiconductor compounds. –Chernivtsi: Books-XXI, -2010. –440p. 2. Федорчук А., Федина М., Кітик І. Найближче координаційне оточення атомів у структурах неорганічних сполук. Чернівці: видавничий дім Родовід. –2013. –198с. 3. Лазарев В.Б., Киш З.З., Переш Е.Ю., Серад Е.Е. Сложные	34/40

	халькогениди в системах $A^I-B^{IV}-C^{VI}$. –М.: Металлургия. –1993. – 239с. 4. Барчій І.Є., Переш Є.Ю., Сабов М.Ю., Габорець Н.Й. Фазові рівноваги в системах $Tl_2S-Tl_5Se_2Br(I)$ // УХЖ. – 2001. – Т.67, №12. – С.76-79. 5. Габорець Н.Й., Барчій І.Є., Цигика В.В. Фізико-хімічна взаємодія у квазібінарних системах $TlCl(Br) - Tl_2S$. // Науковий вісник УжНУ. Серія Хімія. –2002. –В.8. –С.47-51. 6. Зубака О.В., Сідей В.І., Кун С.В., Переш Є.Ю., Барчій І.Є., Сабов М.Ю. Кристалічна структура та деякі властивості сполук Tl_2TeBr_6 і Tl_2TeI_6. // Науковий вісник УжДУ. Серія Хімія. –2000. –Вип.5. – С.3-5. 7. Зубака О.В., Кун С.В., Галаговец И.В., Переш Е.Ю., Барчий И.Е., Сабов М.Ю. Области гомогенности и свойства Tl_2TeBr_6, Cs_2TeBr_6 и Rb_2TeBr_6. // Неорг. материалы. – 2001. – Т.37, №8. – С.1000-1004. 8. Зубака О.В., Сидей В.И., Переш Е.Ю., Барчий М.Е., Кун С.В., Кун А.В. Области гомогенности, получение и свойства монокристаллов соединений Me_2TeI_6 ($Me-Rb,Cs,Tl$). // Неорг. материалы. – 2002. – Т.38, №8. – С.1020-1024. 9. Kozma A.A., Sabov M.Yu., Peresh E.Yu., Barchiy I.E., and Tsygyka V.V. Thermoelectric Properties of a Eutectic $SnSe_2-Bi_2Se_3$ Alloy // Inorg. Mater. – 2015. – Vol.51, №2. – P. 93–97. 10. Barchii I.E., Tats'kar A.R., Kozma A.A., Peresh E.Yu. Interaction of components in the $Tl_2Se-Tl_4SnSe_4-Tl_9SbSe_6$ quasi-ternary system // Russ. J. Inorg. Chem. – 2015. – Vol.60, №9. – P. 1148–1151. 11. Stercho I.P., Barchii I.E., Malakhovskaya T.A., Pogodin A.I., Sidei V.I., Solomon A.M., Peresh E.Yu. Physicochemical interaction in the $Cs_3Sb_2Br_9-Cs_2TeBr_6$ system: the phase diagram and the nature of the interaction of components // J. Inorg. Chem. – 2015. – V.60, No.2. – P.225-229. 12. Сабов В.І., Поторій М.В., Товт В.В., Товт В.О., Сабов М.Ю., Барчій І.Є. Фізико-хімічна взаємодія в системі $TlInP_2Se_6-TlSbP_2Se_6$ // Наук. вісник Ужгородського ун-ту. Серія "Хімія". – 2015. – Вип. 2 (34). – С. 13. Barchiy I., Tatzkar A., Sabov M., Rozycka-Sokolowska E., Marciniak B., Pavlyuk V. Crystal and electronic structure of the ternary monoclinic selenide $Tl_{2.59}Sb_{8.41}Se_{14}$ ($TlSb_3Se_5$) // Chem. Met. Alloys. – 2016. –V.9 (1/2). –P.11-20. 14. Piasecki M., Brik M.G., Barchiy I.E., Ozga K., Kityk I.V., Al-Naggar A.M., Albassam A.A., Malakhovskaya T.A., Lakshminarayana G. Band structure, electronic and optical features of Tl_4SnX_3 ($X=S, Te$) ternary compounds for optoelectronic applications. // J. Alloys and Compounds. –2017. –V.710. –P.600-607. 15. Стерчо І.П., Зубака О.В., Барчій І.Є., Переш Є.Ю., Кохан О.П., Погодін А.І. Аналіз зміни типу хімічного зв'язку та прогнозування взаємодії в системах на основі перовскітних сполук $Cs_3Sb_2Br_9(I_9)$ та $Cs_2TeBr_6(I_6)$. // Наук. вісник Ужгородського ун-ту. Серія "Хімія". – 2017. – Вип. 1 (37). –С.48-54. 16. Valeria Tovt, Igor Barchiy, Michal Piasecki, Iwan Kityk, and Anatolii Fedorchuk. Investigations of $TlInP_2Se_6-In_4(P_2Se_6)_3$ system and optical properties of complex compounds. // Hungarian Journal of Industry and Chemistry. –2017. –V.3. –P.146-152. 17. Малаховська Т.О., Філеп М.Й., Погодін А.І., Сабов М.Ю., Стасюк Ю.М., Барчій І.Є., Переш Є.Ю. Особливості вирощування монокристалів тетраталію(І) тритіостанату(ІІ) // Наук. вісник Ужгородського ун-ту. Серія "Хімія". – 2018. – Вип. 2 (40). – С.20-23. 18. Гомонай В.І., Мільович С.С., Голуб Н.П., Секереш К.Ю. Сорбція іонів Zn^{2+} на сокирницькому клиноптилоліті. <i>Наук. Вісник Ужгород. ун-ту (Сер. Хімія)</i>. 2003. № 10. С. 64–66. 19. Мільович С.С., Гомонай В.І., Фізер М.М., Сідей В.І. Іонообмінна сорбція іонів деяких металів на клиноптилоліті з водних розчинів та ґрунтів. Теоретичні розрахунки та експериментальні дослідження. <i>Наук. Вісник Ужгород. ун-ту (Сер. Хімія)</i>. 2019. №1,	
--	--	--

Вип. 41. С. 94–99.

20. Мільович С.С., Гомонай В.І. Макаренко К.М. Сорбція іонів феруму на сокириницькому клиноптилоліті. *Наук. Вісник Ужгород. ун-ту (Сер. Хімія)*. 2007. №17. С. 99–104.
21. Мільович С.С., Гомонай В.І. Кондрич О.І. Вплив клиноптилоліту на вміст Cd^{2+} у ґрунтах та якість сільськогосподарської продукції. *Наук. Вісник Ужгород. ун-ту (Сер. Хімія)*. 2013. №1, Вип. 29. С. 67–70.
22. Ward J. W. The nature of active sites on zeolites: XI. The effects of the silica-to-alumina ratio on the acidity and catalytic activity of synthetic faujasite-type zeolites / Ward J. W. // *J. Catal.*– 1970.– Vol.17, №3.– P.355-358.
24. Doula M.K., Ioannou A. The effect of electrolyte anion on Cu adsorption-desorption by clinoptilolite. *Microporous and Mesoporous Materials*. 2003. Vol. 58, №2. P. 115–130.
25. Copper(II)-loaded HEU-type zeolite crystals: characterization and evidence of surface complexation with N,N-diethyldithiocarbamate anions / A. Godelitsas et al. *Microporous and Mesoporous Materials*. 1999. Vol. 33, №1-3. P. 77–87.
26. C. Colella, F.A. Mumpton. Natural Zeolites for the third Millennium. Napoli: De Frede, 2000. 481 p.
27. Козак О.М., Сливка Мар.В., Коваль Г.М., Сливка М.В., Онисько М.Ю., Лендел В.Г. Синтез і біологічна активність нових Те-вмісних похідних 3-аліл-2-алкілтіо-4-оксотієно[2,3-*d*]піримідину. *Науковий вісник Ужгородського університету. Серія «Хімія»*. 2013, 1(29), 55–60.
28. Borecka B., Cameron S., Malik A., Smith B. Stereospecific reactions of aryltellurium(IV) trichlorides with 3-cyclohexene-1-methanol and 3-cyclohexene-1,1-dimethanol: the X-ray crystal structure of 2',4'-dimethoxyphenyl(trans-6-moxabicyclo[3.2.1]oct-4-yl)tellurium(IV)dichloride. *Canadian Journal of Chemistry*. 1995, 73, 255–263.
29. Princival C., Dos Santos A., Comasseto J. Solventless and Mild Procedure to Prepare Organotellurium(IV) Compounds under Microwave Irradiation. *J. Braz. Chem. Soc.* 2015, 26, 832–836.
30. Kut M., Onysko M., Lendel V. Heterocyclization of 5,6-Disubstituted 3-alkenyl-2-thioxothieno[2,3-*d*]pyrimidin-4-one with *p*-Alkoxyphenyltellurium trichloride. *Heterocycl. Commun.* 2016, 22(6), 347–350.
31. Гевці Т.О., Кут М.М., Онисько М.Ю., Лендел В.Г. Гетероциклізація 5-аліл-6-тіоксо-1-метилпіразоло[3,4-*d*]піримідин-4-ону *p*-метоксифеніл-телуртрихлоридом. *Науковий вісник Ужгородського університету. Серія «Хімія»*. 2015, 2(34), 67–70.
32. Verma K.K., Reena. Complexes of 4-Hydroxyphenyltellurium Trihalides with Piperidine, Dimethylformamide and Thiourea. *Synth. React. Inorg. Met. - Org. Chem.* 1999, 29, 499.
33. Verma K.K., Dahiya R., Soni D. Synthesis and Characterization of Complexes of Some Hydroxyaryl tellurium Trichlorides with N-Donor Ugands. *Synth. React. Inorg. Met. - Org. Chem.* 1999, 29, 1033.
35. Verma K.K., Seema, Shashi Chhabra. Studies on 1,10-Phenanthroline Complexes of Some Hydroxyaryl tellurium Trihalides. *Phosphorus, Sulfur, and Silicon and the Related Elements*. 2008, 183, 3037–3045.
36. Cancès E., Maday Y., Stamm B. Domain decomposition for implicit solvation models. *J. Chem. Phys.* 2013, 139,
37. Slivka M., Korol N., Pantyo V., Baumer V., Lendel V. Regio- and stereoselective synthesis of [1,3]thiazolo[3,2-*b*][1,2,4]triazol-7-ium salts via electrophilic heterocyclization of 3-Spropargylthio-4*H*-1,2,4-triazoles and their antimicrobial activity. *Heterocycl. Commun.* 2017, 23, 109–114.
38. Slivka M., Khripak S., Britsun V., Staninets V. Stereoselective synthesis of (E)-halomethylidene[1,3]thiazolo[3,2-*a*]thieno[3,2-*e*]pyrimidin-ium and analogous [1,3]oxazolo[3,2-*a*]thieno[3,2-

	e]pyrimidinium halides starting from 3-N-substituted 2-propargylthio(oxy)thieno [2,3-d]pyrimidin-4-ones. <i>Russ. J. Org. Chem.</i> 2000, 36, 1033–1038. 39. Onysko M., Filak I., Lendel V. Halogenoheterocyclization of 2-(allylthio)-quinolin-3-carbaldehyde and 2-(propargylthio)-quinolin-3-carbaldehyde. <i>Heterocycl. Commun.</i> 2016, 22, 295–299. 40. Ernst S., Jelonek S., Sieler J., Schulze K. 4-Methallyl substituted 1,2,4-triazoline-3-thiones as a source of N-bridgehead heterocycles. <i>Tetrahedron.</i> 1996, 52, 791–798. 41. Fizer M., Slivka M., Rusanov E., Turov A., Lendel V. [1,3]Thiazolo[2',3':3,4][1,2,4]triazolo[1,5-a]pyrimidines – a new heterocyclic system accessed via bromocyclization. <i>J. Heterocyc. Chem.</i> 2015, 52, 949–952. 42. Khripak S., Slivka M., Vilkov R., Usenko R., Lendel V. Regioselectivity of the monohalogenation of 4-allyl-3-allylamino-1,2,4-triazole-5-thione. <i>Chem. Heterocycl. Comp.</i> 2007, 43, 781–785. 43. Waleed M. Hussein, Peter Vella, Nazar Ul Islam, David L. Ollis, Gerhard Schenk, Ross P. McGeary. Bioorganic. 3-Mercapto-1,2,4-triazoles and Nacylated thiosemicarbazides as metallo-β-lactamase inhibitors Faridoon. <i>Medicinal Chemistry Letters.</i> 2012, 22, 380–386. 44. Boris M. Sharga, Andrij O. Krivovjaz, Mikhailo V. Slivka, Larisa M. Lambruch, Antonina V. Cheypesh, Vasil G. Lendel, Vitaly I. Nikolaychuk, Vladimir P. Markovich Synthesis and antimicrobial activity of phenylselenenyl tribromide and its fused thienopyrimidine derivatives. <i>Farmacia.</i> 2016, 64(4), 512–520. 45. Xiangdong Li, Zhenguo Shen, Onyx W.H Wai, Yok-Sheung Li. Chemical Forms of Pb, Zn and Cu in the Sediment Profiles of the Pearl River Estuary. <i>Marine Pollution Bulletin.</i> 2001, 42(3), 215–223. 46. Sitta E., Varela H. Beta Oscillations in the Electro-oxidation of Ethylene Glycol on Platinum. <i>Electrocatalysis.</i> 2010, 1, 19. 47. Martins A.L., Batista B.C., Sitta E., Varela H. Oscillatory instabilities during the electrocatalytic oxidation of methanol on platinum. <i>J. Braz. Chem. Soc.</i> 2008, 19, 679/ Створення діаграм із використанням редактору для наукової графіки Origin, встановлення можливостей утворення твердих розчинів із використанням кристалографічних програм PowderCell, WinCD, ICSD.	
Модуль II. Сучасні методи дослідження матеріалів	Огляд використання сучасних методів скануючої електронної спектроскопії (SEM, XRD), рентгенівської флуоресцентної (XFS) та рентгенівської фотоелектронної (XPS) спектроскопії, ядерної магнітно-резонансної (NMR) та протонної магнітно-резонансної (PMR) спектроскопії для встановлення складу та структури неорганічних, органічних, комплексних сполук, які опубліковані у наступних виданнях: 1. Perdew J., Burke K., Ernzerhof M. Generalized gradient approximation made simple. <i>Phys. Rev. Lett.</i> 1996. Vol. 77. P. 3865–3868. 2. Laikov D., Ustynyuk A. PRIRODA-04: a quantum-chemical program suite. New possibilities in the study of molecular systems with the application of parallel computing. <i>Russ. Chem. Bull.</i> 2005. Vol. 54. P. 820–826. 3. Florian J., Warshel A. Calculations of hydration entropies of hydrophobic, polar, and ionic solutes in the framework of the Langevin dipoles solvation model. <i>Phys J. Chem.</i> 1999. Vol. 103. P. 10282–10288. 4. Mulliken R.S. Electronic population analysis on LCAOMO molecular wave functions. <i>Chem I. J. Phys.</i> 1955. Vol. 23. P. 1833–1840. 5. Meier W.M. Molecular Sieves. <i>Society of Chemical Industry.</i> London. 1968. 10-27. 6. Mozgawa W. The relation between structure and vibration spectra of nature zeolite. <i>J. Molecular Structure.</i> 2001. 596. 129-137. 7. Holland T.J.B., Redfern S.A.T. Unit cell refinement from powder	38/40

	diffraction data: the use of regression diagnostics. <i>Mineralogical Magazine</i>. –1997.–V.61.–P. 65–77. 8. Mozgawa W., Bajda T. Application of vibrational spectra in the studies of cation sorption on zeolites. <i>J. Molecular Structure</i>. 2006. 792-793. 170–175. 9. Cooper M.J. The Analysis of Powder Diffraction Data. <i>Acta Crystallographica B</i>. 1982, 38, 264-269. 10. Kirfel A.;Will G. Ending the "P21/a coesite" discussion. <i>Z. Kristallogr.</i> 1983, 164, 67–77. 11. C.D. Wagner, W.M. Riggs, L.E. Davis, J.F. Moulder, G.E. Muilenberg (Eds.), Handbook of X-ray Photoelectron Spectroscopy (Perkin-Elmer Corp., Phys. Elect. Div., Minesota, 1979). 12. Practical Surface Analysis (2nd Ed.): Vol. 1: Auger and X-Ray Photoelectron Spectroscopy (D. Briggs, P.M. Seach, Eds) (John Wiley & Sons Ltd., Chichester, 1990) 13. Grimme S., Antony J., Ehrlich S., Krieg H. A consistent and accurate ab initio parametrization of density functional dispersion correction (DFT-D) for the 94 elements H-Pu. <i>J. Chem. Phys.</i> 2010, 132. 14. Grimme S., Ehrlich S., Goerigk L. Effect of the damping function in dispersion corrected density functional theory. <i>J. Comput. Chem.</i> 2011, 32, 1456–1465. 15. Laikov D.N., Ustynyuk A.Yu. PRIRODA-04: a quantum-chemical program suite. New possibilities in the study of molecular systems with the application of parallel computing. <i>Russ. Chem. Bull.</i> 2005, 54, 820–826. 16. Adamo C., Barone V. Toward reliable density functional methods without adjustable parameters: The PBE0 model. <i>J. Chem. Phys.</i> 1999, 110, 6158–6170. 17. Hitesh Dahyabhai Patel, Saavani Malove Divatiaa, Erik de Clercq. Synthesis of some novel thiosemicarbazone derivatives having anti-cancer, anti-HIV as well as antibacterial activity. <i>Indian Journal of Chemistry</i>. 2013, 52B, 535–545. 18. Dolbier W.R.Jr, Battiste M.A. Structure, Synthesis, and Chemical Reactions of Fluorinated Cyclopropanes and Cyclopropenes. <i>Chem. Rev.</i> 2003, 103, 1071. 19. Wang J., Sanchez-Rosello M., Acen J.L., del Pozo C., Soroichinsky A.E., Fustero S., Soloshonok V.A., Liu H. Fluorine in pharmaceutical industry: fluorine-containing drugs introduced to the market in the last decade (2001-2011). <i>Chem. Rev.</i> 2014, 114, 2432. 20. Jian J.W., Xiao Q.X. Phytomedicine Effective Component Book. <i>People's Hygiene Press</i>, Beijing, 1986. 21. 38. Merken H.M., Beecher G.R. Measurement of food flavonoids by high-performance liquid chromatography: A review. <i>J. Agric. Food. Chem.</i> 2000, 48, 577. 22. Lisichenko R. Getting to Know ArcGIS Desktop (Review.) <i>Journal of Stem Teacher Education</i>. 2011, 48(3), 93–99. 23. Childs C. Interpolating Surface in ArcGIS Spatial Analyst. <i>ArcUser</i>. 2004, 3, 32–35. 24. Tkach V.V., Nechyporuk V.V., Yagodynets' P.I., Meslyuk Yu.V. Mathematical model of the work of the mediated conducting polymer sensors with the use of the polymers of heterocyclic compounds. <i>Rev. Soc. Quím. Perú</i>. 2011, 77, 259–266. 25. Tkach V., Nechyporuk V., Yagodynets' P. A descrição matemática do processo da detecção de duas substâncias com um grupo funcional comum pelos sensores e biossensores eletroquímicos, baseados em polímeros condutores. <i>Rev. Colomb. Cien. Quím. Farm.</i> 2013, 42, 215.	
--	--	--

5.5. ПЕРЕЛІК ПИТАНЬ ДЛЯ ПІДГОТОВКИ ДО ЗАЛІКУ

1. Характеристика хімічних сполук, твердих розчинів на основі компонентів взаємодії, механічних сумішей (евтектичних, перитектичних та ін.). Вимоги до композитних матеріалів.
2. Класифікація конструкційних матеріалів за природою матеріалів, технологічними особливостями переробки, умовами роботи. Критерії вибору композитних матеріалів за технологічними властивостями матеріалів та показниками економічної ефективності.
3. Фізико-хімічний аналіз як основа наукових досліджень багатокомпонентних систем та одержання нових матеріалів.
4. Експериментальні методи дослідження фазових діаграм стану неорганічних систем.
5. Діаграми стану систем із утворенням необмежених рядів твердих розчинів, гранична розчинність компонентів. Нонваріантні евтектичний та перитектичний процеси.
6. Діаграма стану багатокомпонентних системи із із проміжними сполуками. Конгруентний та інконгруентний тип плавлення.
7. Типи комплексних сполук. Геометричні характеристики комплексних сполук.
8. Методи одержання комплексних сполук.
9. Методи синтезу, властивості і застосування мономерів і полімерів на їх основі.
10. Вплив функціональних груп на властивості полімерів.
11. Використання полімерних матеріалів в органічній, аналітичній, неорганічній та фізичній хімії.
12. Використання галогенідів халькогенів в синтезі гетероциклічних сполук.
13. Особливості синтезу халькогенорганічних гетероциклів та доказу структури фізико-хімічними методами.
14. Сучасні теорії каталізу. Механізм процесів каталізу на поверхні твердого каталізатору.
15. Застосовування каталітичних систем для вирішення енергетичних і екологічних проблем.
16. Використання природного та штучного цеоліту в якості молекулярних сит. Особливості кристалічної структури цеолітів. Методи модифікації природних форм цеолітів.
17. Сорбція важких металів природними та штучними цеолітами. Йono-обмінні реакції між катіонами цеолітного каркасу та іонами важких металів.
18. Основні принципи спектроскопічних методів аналізу. Класифікація методів спектроскопії.
19. Практичне використання спектрофотометричних методів.
20. Використання ІЧ-спектроскопії для ідентифікації речовин та кількісного аналізу.
21. Спектрометрія Рамана у кількісному аналізі.
22. Рентгенфлуоресцентний аналіз. Природа спектрів, способи їх збудження та реєстрації.
23. Атомно-абсорбційна спектроскопія (ААС) - принцип методу та області застосування.
24. Атомно-емісійна спектроскопія – основні принципи методу та історія.
25. Основні різновиди мас-спектрометричних аналізаторів.
26. Основні принципи хромато-мас-спектрометрії.
27. Метод рентгенівського структурного аналізу (X-гау) для визначення кристалічної будови хімічних сполук.
28. Використання рентгенівського фазового аналізу у процесі визначення фазового складу механічних сумішей, композитних матеріалів на основі евтектичних сумішей.
29. Застосування методів скануючої електронної спектроскопії (SEM, XRD), рентгенівської флуоресцентної (XFS) та рентгенівської фотоелектронної (XPS) спектроскопії для встановлення складу хімічних сполук.
30. Методи ядерної магнітно-резонансної (NMR) та протонної магнітно-резонансної (PMR) спектроскопій при встановленні будови органічних речовин.
31. Квантово-хімічні напівемпіричні і неемпіричні методи розрахунку структури і властивостей молекул та речовин.

6. ІНСТРУМЕНТИ, ОБЛАДНАННЯ ТА ПРОГРАМНЕ ЗАБЕЗПЕЧЕННЯ, ВИКОРИСТАННЯ ЯКИХ ПЕРЕДБАЧАЄ НАВЧАЛЬНА ДИСЦИПЛІНА

Технічні засоби: Мультимедійний проектор.

Обладнання: персональні комп'ютери, ноутбуки.

Програмне забезпечення Windows 10, Microsoft PowerPoint.

7. РЕКОМЕНДОВАНІ ДЖЕРЕЛА ІНФОРМАЦІЇ

1. В.Л.Аносов, М.И.Озерова, Ю.Я. Фиалков. Основы физико-химического анализа. М.:Наука, 1976, - 503с.
2. А.В.Новоселова. Методы исследования гетерогенных равновесий. М.:Высшая школа, 1980, -165с.
5. В.И.Михеева. Метод физико-химического анализа в неорганическом синтезе. М.:Наука, 1975, -272с.
6. Б.Ф.Ормонт. Введение в физическую химию и кристаллохимию полупроводников. М.:Высшая школа. 1982, -528с.
7. Я.А.Угай. Введение в химию полупроводников. М.:Высшая школа, 1975, -302с.
1. Барчій І.Є., Переш Є.Ю., Різак В.М., Худолій В.О. Гетерогенні системи. –Ужгород: Закарпаття. – 2003. –212с.
2. Переш Є.Ю., Різак В.М., Семрад О.О. Хімія твердого тіла: Навчальний посібник. У двох частинах. – Ужгород: в-во УжДУ. –2000. –Ч.1. –210с.
3. Переш Є.Ю., Різак В.М., Семрад О.О. Хімія твердого тіла: Навчальний посібник. У двох частинах. – Ужгород: ВАТ “Видавництво ”Закарпаття”. –2002. –Ч.2. –244с.
4. Барчій І.Є., Малаховська Т.О., Переш Є.Ю., Сабов М.Ю., Філеп М.Й. Системи Tl_2X-BX_2 , Tl_2X-BX (B – Si, Ge, Sn, Pb; X – S, Se, Te): фазові рівноваги та кристалічна структура проміжних сполук. Ужгород: Вид-во УжНУ «Говерла», 2019. 100 с.
5. Чундак С.Ю., Барчій І.Є. Основи хімії комплексних сполук. Ужгород: Вид-во УжНУ «Говерла», 2019. 134 с/
6. C.D. Wagner, W.M. Riggs, L.E. Davis, J.F. Moulder, G.E. Muilenberg (Eds.), Handbook of X-ray Photoelectron Spectroscopy (Perkin-Elmer Corp., Phys. Elect. Div., Minesota, 1979).
7. Practical Surface Analysis (2nd Ed.): Vol. 1: Auger and X-Ray Photoelectron Spectroscopy (D. Briggs, P.M. Seach, Eds) (John Wiley & Sons Ltd., Chichester, 1990)
8. Основы аналитической химии. Практическое руководство / В.И.Фадеева, Т.Н. Шеховцова, В.М.Иванов и др./под ред Ю.А.Золотова 2-е изд.-М.Высшая школа.-.-2003.-463 с.
9. Skoog D.A., West M.D., Holler F.J. Analytical Chemistry. An Introduction. 6th ed. Philadelphia etc: Saunders College Publishing, 1994.- 612 p.
10. Skoog D. A., Holler F. J., Crouch S. R. Principles of Instrumental Analysis/sixth ed. .-Thomson Brooks/Cole, 2007.-1042 p.
11. Rouessac F., Rouessac A. Chemical analysis : modern instrumentation methods and techniques /translated by Steve Brooks and Francis and Annick Rouessac. - 2nd ed. -2007 by John Wiley & Sons Ltd,-586 p.
12. Отто М. Современные методы аналитической химии (в 2-х томах) Том I. Москва: Техносфера, 2003. - 416с. Том II. 2004. - 288с.
13. Harvey D. Modern analytical chemistry.- McGraw-Hill, 2000.- 814 p.
14. Harris D.C. Quantitative chemical analysis. 7-ed.-Freeman&company.New-York. .-2007.-807p.
15. Fifield F.W., Kealey D.. Principles and Practice of Analytical Chemistry /Fifth Edition Blackwell Science Ltd.-2000.-564 p

Наукові журнали:

- *Український хімічний журнал.*
- *Journal of Inorganic Chemistry.*
- *Inorganic Materials.*
- *Науковий вісник УжНУ. Серія Хімія.*
- *Фізика и техника полупроводников.*
- *J.Alloys and Compounds.*
- *J.Non-Crystall Solids.*
- *J.Acta Crystallography.*

- *J.Less-Common Metals.*
- *Z.Naturforschung.*
- *Chem. Met. Alloys.*
- *J. Mater. Sci.: Mater. Electron.*
- *Mineralogical Magazine.*
- *J. Chem. Phys*
- *J. Comput. Chem*
- *J. Molecular Structure*
- *Electrocatalysis.*
- *Farmacia.*
- *Medicinal Chemistry Letters*
- *Chem. Heterocycl. Comp*
- *J. Heterocycl.Chem.*
- *Heterocycl. Commun.*
- *Tetrahedron.*

Додаткова література

1. V.Tomashik, P.Feychuk, L.Shcherbak. Ternary alloys based on II-VI semiconductor compounds. –Chernivtsi: Books-XXI, -2010. –440p.
2. Федорчук А., Федина М., Кітик І. Найближче координаційне оточення атомів у структурах неорганічних сполук. Чернівці: видавничий дім Родовід. –2013. –198с.
3. Лазарев В.Б., Киш З.З., Переш Е.Ю., Серад Е.Е. Сложные халькогениды в системах $A^I-B^{IV}-C^{VI}$. –М.: Металлургия. –1993. –239с.
4. Барчій І.Є., Переш Є.Ю., Сабов М.Ю., Габорець Н.Й. Фазові рівноваги в системах $Tl_2S-Tl_5Se_2Br(I)$ // УХЖ. – 2001. – Т.67, №12. – С.76-79.
5. Габорець Н.Й., Барчій І.Є., Цигика В.В. Фізико-хімічна взаємодія у квазібінарних системах $TlCl(Br) - Tl_2S$. // Науковий вісник УжНУ. Серія Хімія. –2002. –В.8. –С.47-51.
6. Зубака О.В., Сідей В.І., Кун С.В., Переш Є.Ю., Барчій І.Є., Сабов М.Ю. Кристалічна структура та деякі властивості сполук Tl_2TeBr_6 і Tl_2TeI_6 . // Науковий вісник УжДУ. Серія Хімія. –2000. –Вип.5. –С.3-5.
7. Зубака О.В., Кун С.В., Галаговец І.В., Переш Е.Ю., Барчий І.Е., Сабов М.Ю. Области гомогенности и свойства Tl_2TeBr_6 , Cs_2TeBr_6 и Rb_2TeBr_6 . // Неорг. материалы. – 2001. – Т.37, №8. – С.1000-1004.
8. Зубака О.В., Сидей В.И., Переш Е.Ю., Барчий М.Е., Кун С.В., Кун А.В. Области гомогенности, получение и свойства монокристаллов соединений Me_2TeI_6 ($Me-Rb, Cs, Tl$). // Неорг. материалы. – 2002. – Т.38, №8. – С.1020-1024.
9. Kozma A.A., Sabov M.Yu., Peresh E.Yu., Barchiy I.E., and Tsygyka V.V. Thermoelectric Properties of a Eutectic $SnSe_2-Bi_2Se_3$ Alloy // Inorg. Mater. – 2015. – Vol.51, №2. – P. 93–97.
10. Barchii I.E., Tats'kar A.R., Kozma A.A., Peresh E.Yu. Interaction of components in the $Tl_2Se-Tl_4SnSe_4-Tl_9SbSe_6$ quasi-ternary system // Russ. J. Inorg. Chem. – 2015. – Vol.60, №9. – P. 1148–1151.
11. Stercho I.P., Barchii I.E., Malakhovskaya T.A., Pogodin A.I., Sidei V.I., Solomon A.M., Peresh E.Yu. Physicochemical interaction in the $Cs_3Sb_2Br_9-Cs_2TeBr_6$ system: the phase diagram and the nature of the interaction of components // J. Inorg. Chem. – 2015. – V.60, No.2. – P.225-229.
12. Сабов В.І., Поторій М.В., Товт В.В., Товт В.О., Сабов М.Ю., Барчій І.Є. Фізико-хімічна взаємодія в системі $TlInP_2Se_6-TlSbP_2Se_6$ // Наук. вісник Ужгородського ун-ту. Серія "Хімія". – 2015. – Вип. 2 (34). – С.
13. Barchiy I., Tatzkar A., Sabov M., Rozycka-Sokolowska E., Marciniak B., Pavlyuk V. Crystal and electronic structure of the ternary monoclinic selenide $Tl_{2.59}Sb_{8.41}Se_{14}$ ($TlSb_3Se_5$) // Chem. Met. Alloys. –2016. –V.9 (1/2). –P.11-20.
14. Piasecki M., Brik M.G., Barchiy I.E., Ozga K., Kityk I.V., Al-Naggar A.M., Albassam A.A., Malakhovskaya T.A., Lakshminarayana G. Band structure, electronic and optical features of Tl_4SnX_3 ($X=S, Te$) ternary compounds for optoelectronic applications. // J. Alloys and Compounds. –2017. –V.710. –P.600-607.
15. Стерчо І.П., Зубака О.В., Барчій І.Є., Переш Є.Ю., Кохан О.П., Погодін А.І. Аналіз зміни типу хімічного зв'язку та прогнозування взаємодії в системах на основі перовскітних сполук $Cs_3Sb_2Br_9(I_9)$ та $Cs_2TeBr_6(I_6)$. // Наук. вісник Ужгородського ун-ту. Серія "Хімія". – 2017. – Вип. 1 (37). –С.48-54.
16. Valeria Tovt, Igor Barchiy, Michal Piasecki, Iwan Kityk, and Anatolii Fedorchuk. Investigations of $TlInP_2Se_6-In_4(P_2Se_6)_3$ system and optical properties of complex compounds. // Hungarian Journal of Industry and Chemistry. – 2017. –V.3. –P.146-152.
17. Малаховська Т.О., Філеп М.Й., Погодін А.І., Сабов М.Ю., Стасюк Ю.М., Барчій І.Є., Переш Є.Ю. Особливості вирощування монокристалів тетраталію(І) тритіостанату(ІІ) // Наук. вісник Ужгородського ун-ту. Серія "Хімія". – 2018. – Вип. 2 (40). – С.20-23.
18. Гомонай В.І., Мільович С.С., Голуб Н.П., Секереш К.Ю. Сорбція іонів Zn^{2+} на сокириницькому клиноптилоліті. *Наук. Вісник Ужгород. ун-ту (Сер. Хімія)*. 2003. № 10. С. 64–66.

19. Мільович С.С., Гомонай В.І., Фізер М.М., Сідей В.І. Іонообмінна сорбція іонів деяких металів на клиноптилоліті з водних розчинів та ґрунтів. Теоретичні розрахунки та експериментальні дослідження. *Наук. Вісник Ужгород. ун-ту (Сер. Хімія)*. 2019. №1, Вип. 41. С. 94–99.
20. Мільович С.С., Гомонай В.І. Макаренко К.М. Сорбція іонів феруму на сокирницькому клиноптилоліті. *Наук. Вісник Ужгород. ун-ту (Сер. Хімія)*. 2007. №17. С. 99–104.
21. Мільович С.С., Гомонай В.І. Кондрич О.І. Вплив клиноптилоліту на вміст Cd^{2+} у ґрунтах та якість сільськогосподарської продукції. *Наук. Вісник Ужгород. ун-ту (Сер. Хімія)*. 2013. №1, Вип. 29. С. 67–70.
22. Ward J. W. The nature of active sites on zeolites: XI. The effects of the silica-to-alumina ratio on the acidity and catalytic activity of synthetic faujasite-type zeolites / Ward J. W. // *J. Catal.*— 1970.— Vol.17, №3.— P.355-358.
23. Doula M.K., Ioannou A. The effect of electrolyte anion on Cu adsorption-desorption by clinoptilolite. *Microporous and Mesoporous Materials*. 2003. Vol. 58, №2. P. 115–130.
24. Copper(II)-loaded HEU-type zeolite crystals: characterization and evidence of surface complexation with N,N-diethyldithiocarbamate anions / A. Godelitsas et al. *Microporous and Mesoporous Materials*. 1999. Vol. 33, №1-3. P. 77–87.
25. C. Colella, F.A. Mumpton. Natural Zeolites for the third Millennium. Napoli: De Frede, 2000. 481 p.
26. Козак О.М., Сливка Мар.В., Коваль Г.М., Сливка М.В., Онисько М.Ю., Лендел В.Г. Синтез і біологічна активність нових Те-вмісних похідних 3-аліл-2-алкілтіо-4-оксотієно[2,3-d]піримідину. *Науковий вісник Ужгородського університету. Серія «Хімія»*. 2013, 1(29), 55–60.
27. Borecka B., Cameron S., Malik A., Smith B. Stereospecific reactions of aryltellurium(IV) trichlorides with 3-cyclohexene-1-methanol and 3-cyclohexene-1,1-dimethanol: the X-ray crystal structure of 2',4'-dimethoxyphenyl(trans-6-methoxabicyclo[3.2.1]oct-4-yl)tellurium(IV)dichloride. *Canadian Journal of Chemistry*. 1995, 73, 255–263.
28. Princival C., Dos Santos A., Comassetto J. Solventless and Mild Procedure to Prepare Organotellurium(IV) Compounds under Microwave Irradiation. *J. Braz. Chem. Soc.* 2015, 26, 832–836.
29. Kut M., Onysko M., Lendel V. Heterocyclization of 5,6-Disubstituted 3-alkenyl-2-thioxothieno[2,3-d]pyrimidin-4-one with p-Alkoxyphenyltellurium trichloride. *Heterocycl. Commun.* 2016, 22(6), 347–350.
30. Гевці Т.О., Кут М.М., Онисько М.Ю., Лендел В.Г. Гетероциклізація 5-аліл-6-тіоксо-1-метил-піразоло[3,4-d]піримідин-4-ону п-метоксифеніл-телуртрихлоридом. *Науковий вісник Ужгородського університету. Серія «Хімія»*. 2015, 2(34), 67–70.
31. Verma K.K., Reena. Complexes of 4-Hydroxyphenyltellurium Trihalides with Piperidine, Dimethylformamide and Thiourea. *Synth. React. Inorg. Met. - Org. Chem.* 1999, 29, 499.
32. Verma K.K., Dahiya R., Soni D. Synthesis and Characterization of Complexes of Some Hydroxyaryl tellurium Trichlorides with N-Donor Ugands. *Synth. React. Inorg. Met. - Org. Chem.* 1999, 29, 1033.
33. Verma K.K., Seema, Shashi Chhabra. Studies on 1,10-Phenanthroline Complexes of Some Hydroxyaryl tellurium Trihalides. *Phosphorus, Sulfur, and Silicon and the Related Elements*. 2008, 183, 3037–3045.
34. Cancès E., Maday Y., Stamm B. Domain decomposition for implicit solvation models. *J. Chem. Phys.* 2013, 139,
35. Slivka M., Korol N., Pantyo V., Baumer V., Lendel V. Regio- and stereoselective synthesis of [1,3]thiazolo[3,2-b][1,2,4]triazol-7-ium salts via electrophilic heterocyclization of 3-Spropargylthio-4H-1,2,4-triazoles and their antimicrobial activity. *Heterocycl. Commun.* 2017, 23, 109–114.
36. Slivka M., Khripak S., Britsun V., Staninets V. Stereoselective synthesis of (E)-halomethylidene[1,3]thiazolo[3,2-a]thieno[3,2-e]pyrimidin-ium and analogous [1,3]oxazolo[3,2-a]thieno[3,2-e]pyrimidin-ium halides starting from 3-N-substituted 2-propargylthio(oxy)thieno[2,3-d]pyrimidin-4-ones. *Russ. J. Org. Chem.* 2000, 36, 1033–1038.
37. Onysko M., Filak I., Lendel V. Halogenoheterocyclization of 2-(allylthio)-quinolin-3-carbaldehyde and 2-(propargylthio)-quinolin-3-carbaldehyde. *Heterocycl. Commun.* 2016, 22, 295–299.
38. Ernst S., Jelonek S., Sieler J., Schulze K. 4-Methallyl substituted 1,2,4-triazoline-3-thiones as a source of N-bridgehead heterocycles. *Tetrahedron*. 1996, 52, 791–798.
39. Fizer M., Slivka M., Rusanov E., Turov A., Lendel V. [1,3]Thiazolo[2',3':3,4][1,2,4]triazolo[1,5-a]pyrimidines – a new heterocyclic system accessed via bromocyclization. *J. Heterocycl. Chem.* 2015, 52, 949–952.
40. Khripak S., Slivka M., Vilkov R., Usenko R., Lendel V. Regioselectivity of the monohalogenation of 4-allyl-3-allylamino-1,2,4-triazole-5-thione. *Chem. Heterocycl. Comp.* 2007, 43, 781–785.
41. Waleed M. Hussein, Peter Vella, Nazar Ul Islam, David L. Ollis, Gerhard Schenk, Ross P. McGeary. Bioorganic. 3-Mercapto-1,2,4-triazoles and N-acylated thiosemicarbazides as metallo-β-lactamase inhibitors Faridoon. *Medicinal Chemistry Letters*. 2012, 22, 380–386.
42. Boris M. Sharga, Andriy O. Krivovjazz, Mikhailo V. Slivka, Larisa M. Lambruch, Antonina V. Cheypesh, Vasil G. Lendel, Vitaly I. Nikolaychuk, Vladimir P. Markovich Synthesis and antimicrobial activity of phenylselenyl tribromide and its fused thienopyrimidine derivatives. *Farmacia*. 2016, 64(4), 512–520.
43. Xiangdong Li, Zhenguo Shen, Onyx W.H Wai, Yok-Sheung Li. Chemical Forms of Pb, Zn and Cu in the Sediment Profiles of the Pearl River Estuary. *Marine Pollution Bulletin*. 2001, 42(3), 215–223.
44. Sitta E., Varela H. Beta Oscillations in the Electro-oxidation of Ethylene Glycol on Platinum. *Electrocatalysis*. 2010, 1, 19.
45. Martins A.L., Batista B.C., Sitta E., Varela H. Oscillatory instabilities during the electrocatalytic oxidation of methanol on platinum. *J. Braz. Chem. Soc.* 2008, 19, 679.

48. Perdew J., Burke K., Ernzerhof M. Generalized gradient approximation made simple. *Phys. Rev. Lett.* 1996. Vol. 77. P. 3865–3868.
49. Laikov D., Ustynyuk A. PRIRODA-04: a quantum-chemical program suite. New possibilities in the study of molecular systems with the application of parallel computing. *Russ. Chem. Bull.* 2005. Vol. 54. P. 820–826.
50. Florian J., Warshel A. Calculations of hydration entropies of hydrophobic, polar, and ionic solutes in the framework of the Langevin dipoles solvation model. *Phys J. Chem.* 1999. Vol. 103. P. 10282–10288.
51. Mulliken R.S. Electronic population analysis on LCAOMO molecular wave functions. *Chem I. J. Phys.* 1955. Vol. 23. P. 1833–1840.
52. Meier W.M. Molecular Sieves. *Society of Chemical Industry*. London. 1968. 10-27.
53. Mozgawa W. The relation between structure and vibration spectra of nature zeolite. *J. Molecular Structure*. 2001. 596. 129-137.
54. Holland T.J.B., Redfern S.A.T. Unit cell refinement from powder diffraction data: the use of regression diagnostics. *Mineralogical Magazine*. –1997.–V.61.–P. 65–77.
55. Mozgawa W., Bajda T. Application of vibrational spectra in the studies of cation sorption on zeolites. *J. Molecular Structure*. 2006. 792-793. 170–175.
56. Cooper M.J. The Analysis of Powder Diffraction Data. *Acta Crystallographica B*. 1982, 38, 264-269.
57. Kirfel A.;Will G. Ending the "P21/a coesite" discussion. *Z. Kristallogr.* 1983, 164, 67–77.
58. C.D. Wagner, W.M. Riggs, L.E. Davis, J.F. Moulder, G.E. Muilenberg (Eds.), Handbook of X-ray Photoelectron Spectroscopy (Perkin-Elmer Corp., Phys. Elect. Div., Minesota, 1979).
59. Practical Surface Analysis (2nd Ed.): Vol. 1: Auger and X-Ray Photoelectron Spectroscopy (D. Briggs, P.M. Seach, Eds) (John Willey & Sons Ltd., Chichester, 1990)
60. Grimme S., Antony J., Ehrlich S., Krieg H. A consistent and accurate ab initio parametrization of density functional dispersion correction (DFT-D) for the 94 elements H-Pu. *J. Chem. Phys.* 2010, 132.
61. Grimme S., Ehrlich S., Goerigk L. Effect of the damping function in dispersion corrected density functional theory. *J. Comput. Chem.* 2011, 32, 1456–1465.
62. Laikov D.N., Ustynyuk A.Yu. PRIRODA-04: a quantum-chemical program suite. New possibilities in the study of molecular systems with the application of parallel computing. *Russ. Chem. Bull.* 2005, 54, 820–826.
63. Adamo C., Barone V. Toward reliable density functional methods without adjustable parameters: The PBE0 model. *J. Chem. Phys.* 1999, 110, 6158–6170.
64. Hitesh Dahyabhai Patel, Saavani Malove Divatiaa, Erik de Clercq. Synthesis of some novel thiosemicarbazone derivatives having anti-cancer, anti-HIV as well as antibacterial activity. *Indian Journal of Chemistry*. 2013, 52B, 535–545.
65. Dolbier W.R.Jr, Battiste M.A. Structure, Synthesis, and Chemical Reactions of Fluorinated Cyclopropanes and Cyclopropenes. *Chem. Rev.* 2003, 103, 1071.
66. Wang J., Sanchez-Rosello M., Acen J.L., del Pozo C., Soroichinsky A.E., Fustero S., Soloshonok V.A., Liu H. Fluorine in pharmaceutical industry: fluorine-containing drugs introduced to the market in the last decade (2001-2011). *Chem. Rev.* 2014, 114, 2432.
67. Jian J.W., Xiao Q.X. Phytomedicine Effective Component Book. *People's Hygiene Press*, Beijing, 1986.
68. 38. Merken H.M., Beecher G.R. Measurement of food flavonoids by high-performance liquid chromatography: A review. *J. Agric. Food. Chem.* 2000, 48, 577.
69. Lisichenko R. Getting to Know ArcGIS Desktop (Review.) *Journal of Stem Teacher Education*. 2011, 48(3), 93–99.
70. Childs C. Interpolating Surface in ArcGIS Spatial Analyst. *ArcUser*. 2004, 3, 32–35.
71. Tkach V.V., Nechyporuk V.V., Yagodynets' P.I., Meslyuk Yu.V. Mathematical model of the work of the mediated conducting polymer sensors with the use of the polymers of heterocyclic compounds. *Rev. Soc. Quím. Perú.* 2011, 77, 259–266.
72. Tkach V., Nechyporuk V., Yagodynets' P. A descrição matemática do processo da detecção de duas substâncias com um grupo funcional comum pelos sensores e biossensores eletroquímicos, baseados em polímeros condutores. *Rev. Colomb. Cien. Quím. Farm.* 2013, 42, 215.