

Министерство науки и высшего образования РФ  
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение  
высшего образования  
«СИБИРСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

**СОГЛАСОВАНО**

**Заведующий кафедрой**

**Кафедра физической и  
неорганической химии  
(ФиНХ\_ХМФ)**

наименование кафедры

подпись, инициалы, фамилия

«\_\_\_» \_\_\_\_\_ 20\_\_ г.

институт, реализующий ОП ВО

**УТВЕРЖДАЮ**

**Заведующий кафедрой**

**Кафедра физической и  
неорганической химии  
(ФиНХ\_ХМФ)**

наименование кафедры

**Л.Т.Денисова, доцент,  
канд.хим.наук**

подпись, инициалы, фамилия

«\_\_\_» \_\_\_\_\_ 20\_\_ г.

институт, реализующий дисциплину

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ  
ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ  
НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ  
СИСТЕМ**

Дисциплина ФТД.01 Физическая химия наноструктурированных систем

Направление подготовки / 04.04.01 Химия, 04.04.01.07 Физическая  
специальность химия

Направленность  
(профиль)

Форма обучения очная

Год набора 2020

Красноярск 2021

## РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

составлена в соответствии с Федеральным государственным образовательным стандартом высшего образования с учетом профессиональных стандартов по укрупненной группе

040000 «ХИМИЯ»

---

Направление подготовки /специальность (профиль/специализация)

Направление 04.04.01 Химия, 04.04.01.07 Физическая химия

---

Программу  
составили

канд.хим.наук, доцент, Шубин А.А.

---

## 1 Цели и задачи изучения дисциплины

### 1.1 Цель преподавания дисциплины

Основной целью дисциплины "Физическая химия наноструктурированных систем" является ознакомление учащихся с новейшими достижениями и направлениями развития в современной междисциплинарной области практических знаний - нанотехнологиях. В результате освоения данной дисциплины должны быть сформированы представления о современных концепциях нанохимии и нанотехнологии. Кроме того, при освоении дисциплины учащиеся получают знания о физико-химических процессах формирования нанообъектов, а также их свойствах.

### 1.2 Задачи изучения дисциплины

Задачи изучения дисциплины - формирование у обучающихся следующих общекультурных и профессиональных компетенций:

умение принимать нестандартные решения;

владение современными компьютерными технологиями, применяемыми при обработке результатов научных экспериментов и сборе, обработке, хранении и передаче информации при проведении самостоятельных научных исследований;

понимание принципов работы и умение работать на современной научной аппаратуре при проведении научных исследований;

наличие представлений о наиболее актуальных направлениях исследований в современной теоретической и экспериментальной химии (синтез и применение веществ в наноструктурных технологиях, исследования в экстремальных условиях, химия жизненных процессов, химия и экология и др.)

знание основных этапов и закономерностей развития химической науки, понимание объективной необходимости возникновения новых направлений, наличие представлений о системе фундаментальных химических понятий и методологических аспектов химии, форм и методов научного познания, их роли в общеобразовательной профессиональной подготовке химиков;

умение анализировать научную литературу с целью выбора направления исследования по предлагаемой научным руководителем теме и самостоятельное составление плана исследований.

1.3 Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы

<b>ПК-2:Способен проводить патентно-информационные исследования в выбранной области химии и / или смежных наук</b>	
Уровень 1	знать основы проведения патентного поиска, его особенности
Уровень 1	уметь проводить патентный поиск по выбранной тематике, составлять обзор по полученной информации
Уровень 1	владеть навыками проведения патентного поиска по выбранной тематике, составления обзора по полученной информации
<b>ПК-4:Способен выбирать обоснованные подходы к синтезу и анализу свойств полифункциональных материалов с заданными физико-химическими свойствами</b>	
Уровень 1	знать существующие подходы к синтезу и анализу свойств полифункциональных материалов
Уровень 1	уметь обосновать выбор того или иного метода синтеза новых материалов, исходя из ожидаемых свойств
Уровень 1	владеть способностью обосновать выбор того или иного метода синтеза новых материалов, исходя из ожидаемых свойств
<b>ПК-5:Способен к поиску и анализу научной информации по актуальным проблемам химии, анализу и обобщению отечественного и зарубежного опыта по тематике исследования</b>	
Уровень 1	знать содержание, методы, приемы организации контроля и оценки информации, в том числе с использованием ИКТ, в соответствии с установленными требованиями к образовательным результатам обучающихся
Уровень 1	Анализировать полученную информацию по актуальным проблемам химии
Уровень 1	Способностью к поиску специализированной информации в информационных базах данных

1.4 Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы

Дисциплина "Физическая химия наноструктурированных систем" является теоретико-практической дисциплиной, базу для которой составляют математика, квантовая механика, физика конденсированного состояния, физическая химия

Современные химические технологии

Прикладная термодинамика и термодинамика гетерогенных систем

Курс "Физическая химия наноструктурированных систем" преподается как дисциплина вариативного блока для магистров, обучающихся по направлению 04.04.01.07 - физическая химия.

Изучение дисциплины необходимо для успешного освоения дисциплин профессионального цикла и практик.

Курс "Физическая химия наноструктурированных систем" является базой для подготовки к:

Спец практикум по физической химии  
Подготовка и сдача государственного экзамена

1.5 Особенности реализации дисциплины

Язык реализации дисциплины Русский.

Дисциплина (модуль) реализуется без применения ЭО и ДОТ.

## 2. Объем дисциплины (модуля)

Вид учебной работы	Всего, зачетных единиц (акад.час)	Семестр
		2
<b>Общая трудоемкость дисциплины</b>	<b>2 (72)</b>	<b>2 (72)</b>
<b>Контактная работа с преподавателем:</b>	<b>1,5 (54)</b>	<b>1,5 (54)</b>
занятия лекционного типа	0,5 (18)	0,5 (18)
занятия семинарского типа		
в том числе: семинары		
практические занятия	1 (36)	1 (36)
практикумы		
лабораторные работы		
другие виды контактной работы		
в том числе: групповые консультации		
индивидуальные консультации		
иная внеаудиторная контактная работа:		
групповые занятия		
индивидуальные занятия		
<b>Самостоятельная работа обучающихся:</b>	<b>0,5 (18)</b>	<b>0,5 (18)</b>
изучение теоретического курса (ТО)		
расчетно-графические задания, задачи (РГЗ)		
реферат, эссе (Р)		
курсовое проектирование (КП)	Нет	Нет
курсовая работа (КР)	Нет	Нет
<b>Промежуточная аттестация (Зачёт)</b>		

### 3 Содержание дисциплины (модуля)

#### 3.1 Разделы дисциплины и виды занятий (тематический план занятий)

№ п/п	Модули, темы (разделы) дисциплины	Занятия лекционного типа (акад. час)	Занятия семинарского типа		Самостоятельная работа, (акад. час)	Формируемые компетенции
			Семинары и/или Практические занятия (акад. час)	Лабораторные работы и/или Практикумы (акад. час)		
1	2	3	4	5	6	7
1	Общие физико-химические характеристики наноструктур	11	12	0	12	
2	Квантово-химическое описание наноструктур	7	24	0	6	
Всего		18	36	0	18	

#### 3.2 Занятия лекционного типа

№ п/п	№ раздела дисциплины	Наименование занятий	Объем в акад. часах		
			Всего	в том числе, в инновационной форме	в том числе, в электронной форме

1	1	<p>Базовые термины и понятия. Основные классы наноразмерных систем. Место наноразмерных объектов в окружающем нас мире. Нанообъекты. Критерии определения наноматериалов: критический размер и функциональные свойства. Квантовые наноструктуры различной размерности: 0D-, 1D-, 2D-структуры. Квантовые точки. Основные типы наноразмерных систем. Углеродные наноструктуры (фуллерены и нанотрубки). Неуглеродные наноструктуры. Нанокompозиты и наножидкости. Степень интеграции и перспективы нанотехнологий.</p>	2	0	0
---	---	---	---	---	---

2	1	<p>Физическая химия наносистем - основные понятия и представления. Параметры для описания физико-химии наносистем. Базовые модели нанобъектов. Энергетическое состояние поверхности. Термодинамика поверхности. Термодинамические функции поверхности. Поверхностная энергия и поверхностное натяжение. Процессы на поверхности и приповерхностных слоях; адсорбция и десорбция; реконструкция и релаксация поверхностей.</p>	2	0	0
3	1	<p>Методы получения наноструктурированных материалов: физические методы, химические методы. Понятие об образовании зародышей. Механизмы гомогенного и гетерогенного зародышеобразования.</p>	2	0	0
4	1	<p>Формирование кластеров и наночастиц. Формирование сложных наноструктур. Понятие о самоорганизации. Самоорганизация наноразмерных упорядоченных структур. Роль температурного фактора. Типы упорядоченных структур и их параметры.</p>	2	0	0

5	1	<p>Основы физической химии наносистем; уравнения и характеристики условий термодинамической стабильности межфазных границ в наносистемах; особенности поверхностных процессов в наноструктурах: размерные эффекты и фазовые переходы. Устойчивость нанообъектов.</p>	3	0	0
6	2	<p>Физико-математические модели нанообъектов. Виды химической связи, действующей в наносистемах: ионная связь, ковалентная связь, металлическая связь, водородная связь, Ван-дер-ваальсовы взаимодействия. Валентность. Кристаллическая решетка, диполь-дипольное взаимодействие. Магнитные характеристики наночастиц, ферритин.</p>	3	0	0

7	2	<p>Нанофотоника.  Определение термина "нанофотоника". Три раздела нанофотоники.  Локализация света в пространстве.  Классификация типов локализации света на нанометровом масштабе. Затухающие волны. Поверхностные плазмоны.  Поверхностный плазмонный резонанс.  Ближнее поле.  Сканирующий оптический микроскоп ближнего поля.  Классификация оптических наноматериалов.  Квантовая локализация электронов. Оптические свойства нанометровых квантовых структур.  Металлические наночастицы.  Плазмоника. Понятие фотонного кристалла, примеры природных фотонных кристаллов.  Классификация фотонных кристаллов.</p>	4	0	0
Всего			18	0	0

### 3.3 Занятия семинарского типа

№ п/п	№ раздела дисциплины	Наименование занятий	Объем в акад. часах		
			Всего	в том числе, в инновационной форме	в том числе, в электронной форме
1	1	<p>Общая дискуссия по впечатлениям от научных статей, предложенных для самостоятельного чтения.  По теме строение, свойства, классификация наноструктур.</p>	6	0	0

2	1	Слушание и обсуждение докладов учащихся, по заранее предложенным темам, в рамках тематики "методы получения наноразмерных частиц".	6	0	0
3	2	Ознакомление с работой пакетов программ, позволяющими на основе квантово-химических расчетов моделировать физико-химические, а также спектральные свойства наночастиц.	6	0	0
4	2	Защита расчетно-графических задач	12	0	0
5	2	Защита эссе	6	0	0
Всего			36	0	0

### 3.4 Лабораторные занятия

№ п/п	№ раздела дисциплины	Наименование занятий	Объем в акад. часах		
			Всего	в том числе, в инновационной форме	в том числе, в электронной форме
Всего					

## 5 Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации

Оценочные средства находятся в приложении к рабочим программам дисциплин.

## 6 Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)

6.1. Основная литература			
	Авторы, составители	Заглавие	Издательство, год
Л1.1	Сергеев Г. Б.	Нанохимия: учебное пособие для студентов, обучающихся по направлению 020100 (510500) - Химия и по специальности 020101 (011000) - Химия	Москва: Книжный дом "Университет", 2007
Л1.2	Суздалев И. П.	Нанотехнология. Физико-химия нанокластеров, наноструктур и наноматериалов: научное издание	Москва: URSS, 2009

Л1.3	Андреевский Р. А.	Основы наноструктурного материаловедения. Возможности и проблемы: монография	Москва: БИНОМ, Лаборатория знаний, 2012
Л1.4	Фахльман Б. Д., Третьяков Ю. Д., Гудилин Е. А.	Химия новых материалов и нанотехнологий: перевод с английского	Долгопрудный: Интеллект, 2011
6.2. Дополнительная литература			
	Авторы, составители	Заглавие	Издательство, год
Л2.1	Ормонт Б. Ф., Глазов В. М.	Введение в физическую химию и кристаллохимию полупроводников: учебное пособие для высших технических учебных заведений	Москва: Высшая школа, 1982
Л2.2	Сойфер В. А.	Дифракционная оптика и нанофотоника	Москва: ФИЗМАТЛИТ, 2014
Л2.3	Брандон Д., Каплан У.	Микроструктура материалов. Методы исследования и контроля: учебное пособие.; рекомендовано Институтом химической физики РАН	М.: Техносфера, 2006

## 7 Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины (модуля)

Э1	Федоров А.С., Квантовая механика и квантовая химия. Ч. 2. Проведение квантово - химических расчётов с использованием программного комплекса VASP 5.2: учебно-методическое пособие [Электронный ресурс] /А.С. Федоров, А.А. Кузубов, Н.С. Елисеева, З.И. Попов, М.А. Высотин. – Электрон.дан. – Красноярск: Сиб. федер. ун-т, 2013. [Электронный ресурс].	<a href="http://lib3.sfu-kras.ru/ft/lib2/elib/b24/i586277.pdf?Z21ID=24116398305A76890D11E33A10127049&amp;P21DBN=BOOK1&amp;Z21MFN=%D0%91%D0%91%D0%9A%2024.5%2F%D0%9A321-586277">http://lib3.sfu-kras.ru/ft/lib2/elib/b24/i586277.pdf?Z21ID=24116398305A76890D11E33A10127049&amp;P21DBN=BOOK1&amp;Z21MFN=%D0%91%D0%91%D0%9A%2024.5%2F%D0%9A321-586277</a>
Э2	Сайт научно-образовательного центра по нанотехнологиям МГУ. [Электронный ресурс]	<a href="http://nano.msu.ru/education/courses/materials">http://nano.msu.ru/education/courses/materials</a>
Э3	База данных кристаллических структур. [Электронный ресурс].	<a href="http://www.crystallography.net/result.php">http://www.crystallography.net/result.php</a>
Э4	База данных структуры и свойств химических соединений	<a href="http://www.webelements.com">http://www.webelements.com</a>

## 8 Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)

Промежуточной формой контроля является выполнение и защита практических заданий, написание эссе по одной, самостоятельно

выбранной статье в зарубежном научном журнале, подготовка доклада.

При самостоятельном изучении теоретического материала, при подготовке к занятиям, промежуточному контролю, учащиеся используют литературу, рекомендованную преподавателем.

Практические задания выдаются преподавателями, ведущими практические занятия. Их выполнение предполагается на основе примеров, разобранных на практических занятиях, с измененными начальными условиями. Каждый учащийся получает одно практическое задание.

При подготовке к защите практических заданий учащиеся помимо основной и дополнительной литературы проводят литературный поиск используя библиотеки и Интернет-ресурсы.

Результаты практических заданий оформляются в соответствии с требованиями, перечисленными в учебном пособии по практикуму. Основные требования следующие.

Практическое задание должно содержать цель работы, краткое теоретическое введение с формулами, на которые далее будут ссылки при расчетах; результаты опытов и их обработку (все предусмотренные в работе графики, таблицы и расчеты); выводы.

Каждый рисунок или таблица должны иметь подпись, содержащую всю информацию, необходимую для его восприятия и анализа полученных данных.

Отчет, по возможности, должен содержать результат сравнения рассчитанных параметров с экспериментальными значениями.

Защита расчетно-графических заданий проводится во время аудиторного занятия.

Среди методов компьютерного моделирования центральное место занимают квантово-химические методы расчета электронной структуры молекул. Как правило, высокоточные методы расчета молекулярных систем с большим числом атомов требуют значительных компьютерных ресурсов. Однако расчет структуры и свойств молекул содержащих около 10 атомов не представляет сложности и может быть выполнен учащимися на персональном компьютере в достаточно короткие сроки.

В ходе освоения предмета предполагается выполнение практических заданий для самостоятельного выполнения и последующей защиты в ходе практических занятий.

Порядок выполнения практических заданий:

1. Изучение теоретического материала по теме практического занятия.

2. Ознакомление с примером выполнения подобного задания, приведенном в пособии.

3. Приобретение навыка работы с программой визуализации и построение начальной геометрии заданной молекулярной структуры.

4. Подготовка входного файла с необходимыми параметрами и геометрией молекулы.

5. Запуск расчетной программы (при необходимости устранение ошибок).

6. Обработка результатов вычислений, выполнение окончательного расчета параметров, указанных в задании.

7. Оформление полученных данных по приведенному в примере образцу.

8. Поиск ответов на контрольные вопросы по теме практической работы.

9. Защита выполненных практических работ.

При написании эссе по теме научной статьи, учащийся должен отразить основную проблему публикации и предложенные в документе способы её решения. Кроме того, необходимо выполнить критический анализ работы в свете аналогичных решений, предлагаемых другими авторами. Минимальный размер эссе - 3 страницы, оформление работы должно соответствовать требованиям ГОСТа.

Формой контроля усвоения теоретических вопросов дисциплины является коллоквиум.

## **9 Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю) (при необходимости)**

### **9.1 Перечень необходимого программного обеспечения**

9.1.1	1. Пакет квантово-химических программ Gamess.
9.1.2	2. Пакет квантово-химических программ Abinit.
9.1.3	3. Пакет квантово-химических программ Nwchem.
9.1.4	4. Пакет программ визуализации и конструирования молекулярных структур (Chemcraft, Vesta, Avogadro, Facio).

### **9.2 Перечень необходимых информационных справочных систем**

9.2.1	1. База данных кристаллических структур [Электронный ресурс]. - Режим доступа: <a href="http://www.crystallography.net/result.php">http://www.crystallography.net/result.php</a>
9.2.2	2. База данных структуры и свойств химических соединений [Электронный ресурс]. - Режим доступа: <a href="http://www.webelements.com">http://www.webelements.com</a>

## **10 Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)**

Компьютерный класс с доступом машин в сеть Интернет.

Лекционная аудитория с возможностью проецирования на мультимедийный экран презентации лекции и примеров работы с интерактивными базами данных.