

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Казанский национальный исследовательский технологический университет»
(ФГБОУ ВО «КНИТУ»)

УТВЕРЖДАЮ
Проректор по УР
Бурмистров А.В.

« 2 » 04 2019 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА

По дисциплине «Нанохимия»

Направление подготовки (специальности): 28.03.02 «Наноинженерия»

Профиль(специализация) подготовки: «Органические и неорганические наноматериалы»

Квалификация выпускника: Бакалавр

Форма обучения: Очная

Институт, факультет (*осуществляющий подготовку ООП*):

Институт нефти, химии и нанотехнологий,

факультет наноматериалов и нанотехнологий;

Кафедра-разработчик рабочей программы: кафедра неорганической химии

Курс, семестр: 3, 6

	Часы	Зачетные единицы
Лекции	18	0,5
Практические занятия	36	1,0
Лабораторные занятия		
Самостоятельная работа	63	1,75
Контроль самостоятельной работы		
Форма аттестации	Экзамен	0,75
Всего	144	4

Казань, 2019 г.

Рабочая программа составлена с учетом требований Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования (№ 923 от 19.09.17) по направлению 28.03.02 «Наноинженерия» (профиль «Органические и неорганические наноматериалы») на основании учебного плана набора обучающихся 2019 г. *Данная программа является авторским курсом.*

Разработчики программы:

доцент _____



Гусева Е.В.

профессор _____



Назмутдинов Р.Р.

Рабочая программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры неорганической химии протокол от 24.06. 2019 г. № 7

Зав. кафедрой _____



Кузнецов А.М.

СОГЛАСОВАНО

Протокол заседания кафедры плазмохимических и нанотехнологий высокомолекулярных материалов (ПНТВМ), реализующей подготовку основной образовательной программы от 2.07 2019 г. № 15

Зав. кафедрой, профессор _____


(подпись)

Вознесенский Э.Ф.
(Ф.И.О)

УТВЕРЖДЕНО

Начальник УМЦ, доцент _____


(подпись)

Китаева Л.А.
(Ф.И.О.)

1. Цели освоения дисциплины

Целями освоения дисциплины «Нанохимия» являются:

- а) формирование знаний об основных видах и свойствах нанобъектов.
- б) обучение способам описания наноразмерных систем.
- в) обучение способам получения, изучения и применения наноразмерных систем.
- г) раскрытие сущности процессов, происходящих в наноразмерных системах.

2. Место дисциплины в структуре ООП

Дисциплина «Нанохимия» относится к обязательной дисциплине *вариативной* части *математического и естественнонаучного* цикла ООП и формирует у бакалавров по направлению подготовки 28.03.02 «Наноинженерия» (профиль подготовки «Органические и неорганические наноматериалы») набор знаний, умений, навыков и компетенций.

Для успешного освоения дисциплины «Нанохимия» бакалавр по направлению подготовки «Наноинженерия» должен освоить материал предшествующих дисциплин:

- а) Химия (общая и неорганическая химия, органическая химия)
- б) Математика
- в) Физика
- г) Квантово-химическое моделирование наноструктур;
- д) Аналитическая химия и физико-химические методы анализа
- е) Дополнительные главы физической химии.

Знания, полученные при изучении дисциплины «Нанохимия» могут быть использованы при прохождении практик (*учебной, производственной, преддипломной*), выполнении выпускных квалификационных работ по направлению подготовки 28.03.02 «Наноинженерия».

3. Компетенции и индикаторы достижения компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины

ПК-8 Способен использовать методики комплексного анализа структуры и свойств наноструктурированных материалов для испытаний инновационной продукции наноиндустрии.

ПК-8.1 Знает принципы работы с инструментами и лабораторным оборудованием для исследования образцов инновационной продукции наноиндустрии; требования, предъявляемые к качеству опытных образцов наноструктурированных материалов; методические и нормативные материалы в области производства инновационной продукции наноиндустрии.

ПК-8.2 Умеет применять различные методы оценки структуры и свойств наноструктурированных материалов; обрабатывать, анализировать и систематизировать результаты лабораторных испытаний.

ПК-8.3 владеет навыками подготовки образцов наноструктурированных материалов и инструментов к проведению лабораторных исследований; исследования качества инновационной продукции наноиндустрии; составления отчетов по результатам исследований на соответствие установленным требованиям в техническом задании.

В результате освоения дисциплины обучающийся должен:

1) Знать:

- а) понятие нанобъекта, его свойств, особенности поведения, применение;
- б) наноразмерные эффекты на поверхности твёрдых тел и особенности этих процессов
- в) физико-химические методы исследования поверхностей наноструктур
- г) особенности фемтохимического подхода управления химическим процессом;
- д) основные методы компьютерного моделирования наноразмерных систем;
- е) особенности электронной структуры наноразмерных систем;
- ж) основные химические подходы к методам получения и стабилизации неорганических, супрамолекулярных органических и металлорганических наносистем;
- з) основные химические подходы к модификации свойств наночастиц, нанотрубок и нанопроволок.

2) Уметь:

- а) классифицировать нанобъекты, их свойства и области применения;
- б) использовать понятия и закономерности нанохимии для описания различных видов наноразмерных систем;
- в) прогнозировать наноразмерные эффекты на поверхности твёрдых тел;
<ли>г) интерпретировать изображения (контрасты), полученные методом STM;- д) использовать основные методы компьютерного моделирования наноразмерных систем;
- е) экспериментально получать наноразмерные объекты
- ж) анализировать свойства наноразмерных систем

3) Владеть:

- а) терминологией и физико-химическими основами, определяющими свойства и поведение наноразмерных

систем;

г) навыками поиска научной литературы по изучаемой проблеме в сети Интернет.

4. Структура и содержание дисциплины «Нанохимия»

Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 зачетных единицы или 144 часа

№ п/п	Раздел дисциплины	Семестр	Виды учебной работы (в часах)				Оценочные средства для проведения промежуточной аттестации по разделам
			Лекция	Практические работы	КСР	СРС	
1	Введение. Группа углерода и размерные эффекты на поверхности твёрдых тел.	6	3	9		6	Собеседование в ходе выполнения практ. работ,
2	Методы исследования поверхностей наноструктур	6	2			6	Собеседование в ходе выполнения практ. работ
3	Наночастицы и нанопроволоки	6	2			6	Собеседование в ходе выполнения практ. работ
4	Фемтохимический подход к описанию элементарного акта химической реакции.	6	2			6	Собеседование в ходе выполнения практ. работ
5	Основы компьютерного моделирования наноразмерных систем методами квантовой химии, молекулярной динамики и Монте-Карло.	6		9		7	Собеседование в ходе выполнения практ. работ,
6	Неорганические наноразмерные системы	6	5	9		16	Собеседование в ходе выполнения практ. работ,
7	Супрамолекулярные системы	6	4	9		16	Собеседование в ходе выполнения практ. работ,
ИТОГО			18	36		63	
Форма аттестации			Экзамен (27 ч)				

Содержание лекционных занятий соответствует содержанию разделов № 1-4, 6, 7, содержание практических занятий - разделам № 1,5-7. Для всех тем предусмотрена самостоятельная работа студентов.

5. Содержание лекционных занятий по темам с указанием формируемых компетенций

№ п/п	Раздел дисциплины	Ча-сы -	Тема лекционного занятия	Краткое содержание	Индикаторы достижения компетенции
1	Группа углерода и размерные эффекты на поверхности твёрдых тел.	1,5	Тема 1. Введение. Углеродные наноструктуры.	Краткое содержание курса и его авторский характер. Электронная структура молекул $C_2, C_6H_6, V_3N_3H_3$; карбин и его зонная структура. Реальный графен (окисленный и восстановленный), получение и химическая активность. Графан, станен и силицен. Электронная структура углеродных нанотрубок и их свойства; индексы хиральности. Фуллерены, граничные орбитали C_{60} ; ян-теллеровская нестабильность C_{60}^- и C_{60}^+ , химическая активность фуллеренов. Эндофуллерены. Слои молекул фуллеренов на поверхности золота; наноалмазы.	ПК-8.1 ПК-8.2 ПК-8.3

2	Группа углерода и размерные эффекты на поверхности твёрдых тел.	1,5	Тема 2. Наноразмерные эффекты на поверхности твёрдых тел.	Различные типы поверхностей и межфазных границ: твердое тело/газ (вакуум), твердое тело/раствор, металлические электроды (заряд электрода, состав и pH раствора в качестве контролирующих параметров). Оксидные плёнки на поверхности, естественные наноструктуры, диффузия в нанопорах; высокая локальная вязкость. Реконструкция поверхности некоторых металлов. Дефекты на поверхности: вакансии, ступени, кинки. Метод Клавелье. Активность дефектов; «созревание» Оствальда. Самоорганизованные адсорбционные монослои на поверхности твёрдых тел. Тиолы. Роль наноструктур в каталитических процессах на поверхности твёрдых тел	ПК-8.1 ПК-8.2 ПК-8.3
3	Методы исследования поверхностей наноструктур.	2	Тема 3 Физико-химические методы исследования наноструктур Теоретические основы работы сканирующего туннельного микроскопа.	Методы исследования наноструктур на границах раздела фаз: метод температурного скачка; IR-spectroscopy, SHG, EXAFS, STM, AFM. Физические принципы работы STM; напряжение смещения. Уравнение туннельного тока. Физический смысл изображений (контрастов) STM — изоповерхностей постоянного тока. Уравнение для константы скорости редокс-процесса в конфигурации STM и его анализ. Теоретические подходы к описанию электронного строения поверхности твердых тел и адсорбционного взаимодействия. Моделирование наноструктур на поверхности; модели «желе», кластерный подход и периодические расчёты.	ПК-8.1 ПК-8.2 ПК-8.3
4	Наночастицы и нанопроволоки	2	Тема 4. Теоретические аспекты получения и существования наночастиц и нанопроволок	Размеры и форма наночастиц и нанопроволок. Температура плавления. Уровень Ферми, работа выхода электрона и её зависимость от размерананочастицы. Плазмоны и проблема нанолазера. Уравнение для баллистической проводимости нанопроволок. Описание электронной структуры металлических наночастиц; электрон в потенциальном ящике с бесконечной стенкой; свободный электронный газ. Уравнение Шредингера в сферических координатах для электрона с конечной потенциальной стенкой; s-орбитали; зависимость поведения электронов от радиуса сферы	ПК-8.1 ПК-8.2 ПК-8.3
5	Фемтохимический подход к описанию элементарного акта химической реакции.	2	Тема 5. Фемтохимический контроль элементарного акта химических реакций.	Элементарный акт химического процесса, путь реакции. Основная парадигма теории переходного состояния; седловая точка. Фемтохимия - один из методов тонкого управления элементарным актом реакции и важный инструмент нанохимических технологий будущего. Электронно-колебательные состояния, селективность химической реакции, горячие электроны, контроль за «перемещением» электронов; перспективы. Проблемы фемтохимии.	ПК-8.1 ПК-8.2 ПК-8.3
6	Неорганические наноразмерные системы	5	Тема 6. Методы получения и стабилизации наночастиц.	Сравнительный анализ химических и размерно-чувствительных свойств неорганических наночастиц, получаемых различными способами.	ПК-8.1 ПК-8.2 ПК-8.3
7	Супрамолекулярные системы	4	Тема 7. Прикладные аспекты супрамолекулярной химии	Сравнительный анализ химических и размерно-чувствительных свойств супрамолекулярных систем.	ПК-8.1 ПК-8.2 ПК-8.3

6. Содержание практических занятий

6. Содержание семинарских и практических занятий (лабораторного практикума)

Целью проведения практических работ является овладение практическими приемами теоретического описания и

моделирования наноразмерных структур; овладение приемами экспериментального описания свойств органических и неорганических наноразмерных систем.

№ п/п	Раздел дисциплины	Ча сы	Тема семинара/ практического занятия,	Краткое содержание	Индикаторы достижения компетенции
1	Группа углерода и размерные эффекты на поверхности твёрдых тел.	4,5	Тема 1. Углеродные наноструктуры.	1) моделирование и расчёт электронной структуры углеродных нанотрубок с различными индексами хиральности в приближении сильной связи; 2) визуализация зонной структуры графена; 3) квантово-химический прогноз теплового	ПК-8.1 ПК-8.2 ПК-8.3
2	Группа углерода и размерные эффекты на поверхности твёрдых тел.	4,5	Тема 2. Наноразмерные эффекты на поверхности твёрдых тел.	1. квантово-химическое моделирование СТМ - контрастов адсорбированных молекул и их анализ; 2. квантово-химическое моделирование адсорбции различных тиолов на поверхности Au(III) в рамках кластерной модели; расчёт энергии	ПК-8.1 ПК-8.2 ПК-8.3
3	Основы компьютерного моделирования наноразмерных систем методами квантовой химии, молекулярной динамики и Монте-Карло..	4,5	Тема 3. Методы квантовохимического моделирования и программные пакеты.. Ренессанс полуэмпирических методов; теория функционала плотности; методы Монте-Карло,	Компьютерное моделирование металлических наночастиц: 1) расчёт энергии и структуры биметаллических наночастиц Си- Ni методом Монте-Карло; 2) прогноз устойчивости и температуры испарения квантовых точек (кластеров Ag и Au) методами квантовой химии.	ПК-8.1 ПК-8.2 ПК-8.3
4	Основы компьютерного моделирования наноразмерных систем методами квантовой химии, молекулярной динамики и Монте-Карло.	4,5	Тема 4. Методы молекулярной динамики	Моделирование элементарного акта химической реакции методом броуновской молекулярной динамики. Расчёт коэффициента скорости реакции, анализ влияния температуры и вязкости среды.	ПК-8.1 ПК-8.2 ПК-8.3
5	Неорганические наноразмерные системы	9	Тема 5. Методы получения и стабилизация наночастиц порошков металлов и неметаллов, оксидов и гидроксидов металлов.	Получение наноразмерных частиц на примере порошков металлов и неметаллов, оксидов и гидроксидов металлов (по выбору преподавателя)	ПК-8.1 ПК-8.2 ПК-8.3
6	Супрамолекулярные системы	4	Тема 7. Определение дисперсности наноразмерных частиц	Определение дисперсности частиц наноразмерных материалов (по выбору преподавателя).	ПК-8.1 ПК-8.2 ПК-8.3
7	Супрамолекулярные системы	5	Тема 8. Прикладные аспекты супрамолекулярной химии	Исследование свойств супрамолекулярных систем: индикация ККМ, кислотно-основные свойства (по выбору преподавателя)	ПК-8.1 ПК-8.2 ПК-8.3

7. Содержание лабораторных занятий (не предусмотрены учебным планом)

8. Самостоятельная работа бакалавра

Цель самостоятельной работы - индивидуальная проработка учебного материала для углубления и упрочнения знаний текущего учебного материала в соответствии с программой курса, а также приобретение учебных, логических и трудовых умений, которые предусмотрены требованиями к результатам освоения дисциплины

Темы, выносимые на самостоятельную работу	Часы	Форма СРС*	Индикаторы достижения компетенции
Введение. Группа углерода и размерные эффекты на поверхности твёрдых тел.	5	подготовка к практическим занятиям, экзамену	ПК-8.1 ПК-8.2 ПК-8.3
Методы исследования поверхностей наноструктур	5	подготовка к практическим занятиям, экзамену	ПК-8.1 ПК-8.2 ПК-8.3
Наночастицы и нанопроволоки	5	подготовка к коллоквиуму, экзамену	ПК-8.1 ПК-8.2 ПК-8.3
Фемтохимический подход к описанию элементарного акта химической реакции.	5	подготовка к экзамену	ПК-8.1 ПК-8.2 ПК-8.3
Основы компьютерного моделирования наноразмерных систем методами квантовой химии, молекулярной динамики и Монте-Карло.	5	подготовка к практическим занятиям, экзамену	ПК-8.1 ПК-8.2 ПК-8.3
Неорганические наноразмерные системы	13	подготовка к практическим занятиям, экзамену	ПК-8.1 ПК-8.2 ПК-8.3
Супрамолекулярные системы	16	подготовка к практическим занятиям, экзамену	ПК-8.1 ПК-8.2 ПК-8.3

8.1 Контроль самостоятельной работы (часы не предусмотрены)

9. Использование рейтинговой системы оценки знаний

При оценке знаний, умений, навыков бакалавров в рамках дисциплины «Нанохимия» используется рейтинговая система. Преподавание дисциплины осуществляется при очной форме обучения в 6 семестре и заканчивается экзаменом. Итоговый рейтинг студента по дисциплине складывается по результатам, полученным за выполнение практических работ. *За экзамен студент может получить минимум 24 балла и максимум -40 баллов.*

Оценочные средства	Кол-во	Min, баллов	Max баллов
Практическая работа	7	36	60
Экзамен	1	24	40
Итого:		60	100

10. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины

Оценочные средства для проведения текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации обучающихся и итоговой (государственной итоговой) аттестации разрабатываются согласно положению о Фондах оценочных средств, рассматриваются как составная часть рабочей программы и оформляются отдельным документом.

11. Информационно-методическое обеспечение дисциплины

11.1 Основная литература. При изучении дисциплины «Нанохимия» в качестве основных источников информации рекомендуется использовать следующую литературу:

Основные источники информации	Кол-во экз.
Шабатина Т.И. Нанохимия и наноматериалы: учебное пособие/ Т.И. Шабатина, А.М. Голубев.- Москва: МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2014. - 63 с.	ЭБС «Лань» http://e.lanbook.com/book/58569 доступ из любой точки интернета после регистрации с IP-адресов КНИТУ

11.2 Дополнительная литература. В качестве дополнительных источников информации рекомендуется использовать следующую литературу

Дополнительные источники информации	Кол-во экз.
1. Стил Дж. В. Супрамолекулярная химия: в 2-х т; Т.1 / Дж. В. Стил, Дж. Л. Этвуд. — М: Академкнига, 2007. -480 с.	4 экз. в УНИЦ КНИТУ;
2. Стил Дж. В. Супрамолекулярная химия: в 2-х т; Т.2 / Дж. В. Стил, Дж. Л. Этвуд. — М: Академкнига, 2007. -416с.	4 экз. в УНИЦ КНИТУ;

11.3 Электронные источники информации

При изучении дисциплины «Нанохимия» рекомендуется использовать электронные источники информации:

- Электронный каталог УНИЦ КНИТУ – режим доступа: <http://ruslan.kstu.ru/>;
- ЭБС «Лань» – режим доступа: <http://e.lanbook.com/>

Согласовано:
Зав. сектором ОКУФ



11.4. Современные профессиональные базы данных и информационные справочные системы.

1. MOODLE КНИТУ (КХТИ)
2. НАУЧНАЯ ЭЛЕКТРОННАЯ БИБЛИОТЕКА - eLIBRARY.RU

12. Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля).

1. Лекционные занятия.

Для проведения лекционных занятий по дисциплине «Нанохимия» предусмотрено использование презентационной техники проектор, экран, ноутбук. Также возможно использование дополнительных средств визуализации информации - программы визуализации файлов «ChemCraft», «Molden», HyperChem, Microsoft Office PowerPoint, Microsoft Office Word.

2. Практические занятия.

Для выполнения практических работ бакалаврами используются лаборатории кафедры неорганической химии (Д-213, Д-218, Д-210, Д-207, Д-424, Д-224), оснащенные вытяжными шкафами. Возможно использование следующей лабораторной посуды: колбы, стаканы, пипетки, бюксы, делительные воронки, мерная посуда и прочее.

Дополнительно возможно использование приборов лаборатории Д-424, оснащенной вытяжным шкафом и лабораторными столами.

Дополнительно возможно использование приборов кафедры ПНТВМ,

Для выполнения практических работ бакалаврами используются компьютерные классы кафедры неорганической химии Д-217, Д-222а.

Для проведения практических занятий также может использоваться рабочее место преподавателей (Д-423, Д-424, Д-222а, Д-217), оснащенные компьютером с доступом в Интернет

Лицензированное программное обеспечение и свободно распространяемое программное обеспечение, используемое в учебном процессе при освоении дисциплины «Нанохимия»:

Категория ПО	Наименование	Лицензионный договор, соглашение
Офисные и деловые программы	<u>ABBYY FineReader 9.0 проф</u>	от 19.11.2008 № AF90-3S1V01-102
Офисные и деловые программы	<u>MS Office 2007 Russian</u>	от 16.10.2008 лицензия № 44684779
Офисные и деловые программы	<u>MS Office 2007 Professional Russian</u>	от 16.10.2008 лицензия № 44684779
Офисные и деловые программы	<u>MS Office 2010-2016 Standard</u>	от 08.11.2016 № 16/2189/Б
ПО для перевода	<u>ABBYY Lingvo x3 Английская версия</u>	от 19.11.2008 AL14 -1S1V05-102
ПО для перевода	<u>ABBYY Lingvo x3 Европейская версия</u>	от 19.11.2008 AL14-2S1V05-102
Программирование	<u>Adobe Dreamweaver CS4</u>	
Научное ПО	Gaussian G09W Full Version	от 22.12.2015 №15/2174/Б21.21э12.2015
Научное ПО	Gaussian G16W Full Version	18/2143/Б от 01.10.2018
Научное ПО	Gaussian G16l Full Version	18/2253/Б от 26.12.2018
Научное ПО	GaussView 6.0.16W	18/2252/Б от 26.12.2018

13. Образовательные технологии

В ходе изучения дисциплины «Нанохимии» используются разные образовательные технологии.

Традиционные технологии: индивидуальная работа - подготовка отчета по проделанной практической работе, составление конспекта лекций.

Интерактивные технологии: модульно - рейтинговая технология с укрупнением блоков теоретического материала; диалоговые технологии (устные опросы, опрос «вопрос-ответ», работа у доски, самостоятельная работа в команде); защита отчета по проделанной лабораторной работе, дискуссия, командная работа под руководством преподавателя, решение проблемных ситуаций.

Общее количество практических занятий, проводимых в интерактивной форме, составляет 18 часов или 20 % от аудиторной нагрузки.

Рабочая программа по дисциплине «Нанохимия»
(наименование дисциплины)

По направлению 28.03.02 «Наноинженерия»
(цифра) (название)

для профиля/специализации «Органические и неорганические наноматериалы»

для набора обучающихся 2019 г

пересмотрена на заседании кафедры неорганической химии
(наименование кафедры)

п/п	Дата переутверждения РП протокол заседания кафедры № от)	Наличие изменений	Наличие изменений в списке литературы	Подпись разработчика РП (Гусева ЕВ)	Подпись заведующего кафедрой (Кузнецов А.М.)	Подпись начальника УМЦ/ОМг/О АиД (Китаева Л.А.)
		нет	Нет/есть*			