

**Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт металлоорганической химии им. Г.А. Разуваева
Российской академии наук
(ИМХ РАН)**

УТВЕРЖДАЮ



Директор

Чл.-корр. РАН

И.Л. Федюшкин

«04» сентября 2015 г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
«ТЕРМОДИНАМИКА НАНОСИСТЕМ»**

Б1.В.ДВ.2 «Вариативная часть»; раздел «Обязательные дисциплины» основной профессиональной образовательной программы высшего образования - программы подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре по направлению подготовки кадров высшей квалификации **04.06.01 Химические науки**

Направленность (профиль) **02.00.04 «Физическая химия»**

Форма обучения **очная**

Нижний Новгород

2015

Рабочая программа составлена на основании федерального государственного образовательного стандарта высшего образования по направлению подготовки 04.06.01 Химические науки (уровень подготовки кадров высшей квалификации), утвержденного приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от 30.07.2014 г. № 869.

Разработчики:

Ведущий научный сотрудник лаборатории ХЭОС, д.х.н. М. П. Бубнов

Программа принята на заседании ученого совета ИМХ РАН

Протокол № 10 от « 24 » июня 2015 г.

Ученый секретарь, к.х.н.



К.Г. Шальнова

1. Цели и задачи освоения дисциплины

Цели дисциплины:

Формирование фундаментальных физико-химических знаний об особенностях наноразмерного состояния, химических способах получения наночастиц и наноструктурированных материалов,

Задачи дисциплины:

- Знакомство с современными способами применения законов химической термодинамики к наносистемам;
- Знакомство с основными методами исследования наносистем;
- Формирование навыков обработки экспериментальных данных для получения термодинамических характеристик равновесных процессов.

2. Место дисциплины в структуре ООП

Данная дисциплина относится к группе дисциплин по выбору в Вариативной части образовательной компоненты основной профессиональной образовательной программы высшего образования – программы подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре по направлению подготовки *04.06.01 «Химические науки»* по специальности *02.00.04 Физическая химия*.

Для успешного усвоения дисциплины аспирант должен знать основные теоретические положения следующих дисциплин:

- "Физическая химия" (теоретические представления физической химии, знания о строении атома и молекулы, владение методами описания состояния веществ, основные понятия о свойствах веществ в различных агрегатных состояниях);
- "Химия координационных соединений" (номенклатура, теоретические представления о природе химической связи и закономерностях структурного строения координационных соединений переходных и непереходных металлов, химические свойства координационных соединений).

3. Требования к результатам освоения дисциплины

В рамках данной дисциплины углубляются и развиваются следующие компетенции:

УК-1 - способность к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях;

1	Термодинамика наносистем	72	36	-	35	-	1	36	Зачет
---	--------------------------	----	----	---	----	---	---	----	-------

4.2. Содержание дисциплины

4.2.1. Разделы дисциплины и виды занятий

№ п/п	Раздел дисциплины	Виды учебной работы и трудоемкость (в часах)				Самостоят. работа
		Лек.	Лаб./ сем.	Пр.	КСР	
1	Химическое равновесие, основные понятия.	-	6	-	-	6
2	Нанотехнология как основное стратегическое направление развития человеческой деятельности в XXI веке.	-	6	-	-	6
3	Особые свойства вещества в высокодисперсном состоянии.	-	6	-	-	6
4	Методы исследования, применяемые в нанохимии.	-	6	-	-	6
5	Методы получения вещества в ультрадисперсном состоянии.	-	6	-	-	6
6	Основные принципы создания ансамблей наночастиц.	-	5	-	1	6

4.2.2 Содержание разделов дисциплины

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела (темы)	Форма проведения занятий (лекции, семинары и т.д.)
1	Химическое равновесие, основные понятия.	Химическое равновесие. Закон действующих масс. Различные виды констант равновесия и связь между ними. Изотерма Вант-Гоффа. Уравнения изобары и изохоры химической реакции. Расчеты констант равновесия химических реакций с использованием таблиц стандартных значений термодинамических функций. Приведенная энергия Гиббса и ее использование для расчетов химических равновесий. Равновесие в поле внешних сил.	Семинары, самостоятельная работа

		<p>Полные потенциалы. Расчет констант равновесия химических реакций в идеальных газах методом статистической термодинамики. Статистическая термодинамика реальных систем. Потенциалы межмолекулярного взаимодействия и конфигурационный интеграл для реального газа.</p>	
2	<p>Нанотехнология как основное стратегическое направление развития человеческой деятельности в XXI веке.</p>	<p>Особенности нанопроблематики, ее связь с другими областями науки. Перспективы применения достижений нанотехнологии в материаловедении и производстве материалов, электронике и вычислительной технике, биологии и медицине, авиации и космических исследованиях, энергетике и химической промышленности, охране окружающей среды и др. Возможные экологические и социальные последствия применения нанотехнологий. Проблемное поле нанохимии. Объекты изучения: кластеры, наночастицы, наноструктуры, структуры с квантоворазмерным эффектом (квантовые ямы, квантовые нити, квантовые точки).</p>	<p>семинары, самостоятельная работа</p>
3	<p>Особые свойства вещества в высокодисперсном состоянии.</p>	<p>Условия и причины возникновения размерных эффектов. Внутренний и внешний размерный эффект. Отличительные особенности электронной структуры наночастиц. Физические явления, связанные с проявлением размерных эффектов (понижение температуры плавления, электрические и магнитные свойства наночастиц, особенности оптических спектров наночастиц полупроводников и металлов). Размерные эффекты в химии. Термодинамические и кинетические особенности поведения наночастиц. Зависимость химической активности и реакционной способности вещества от размера и формы образующих его частиц. Влияние размера частиц, формирующихся на начальной стадии химической реакции, на характер ее протекания. Фазовый размерный эффект. Роль состояния поверхности и поверхностных реакций в нанохимии. Наноразмерный катализ. Зависимость каталитических свойств кластеров от их строения и размеров. Возможности молекулярного дизайна активных центров. Каталитические свойства наночастиц металлов и полупроводников.</p>	<p>Семинары, самостоятельная работа</p>
4	<p>Методы исследования, применяемые в нанохимии.</p>	<p>Электроннография. Задачи, решаемые методом электроннографии. Взаимодействие электронов с веществом. Дифракция электронов на кристаллической решетке твердофазных веществ. Закон Вульфа-Брегга в электроннографии.</p>	<p>Семинары, самостоятельная работа</p>

		<p>Достоинства и недостатки электронографии в сравнении с другими дифракционными методами исследования. Общие представления о принципе работы электронографа. Возможности локальной съемки. Получение электронограмм на «просвет» и на «отражение». Типы электронограмм. Важнейшие характеристики электронограмм: точность определения положения узлов в кристаллической решетке, разрешающая способность метода, сведения, извлекаемые из анализа интенсивности линий или рефлексов. Применение электронографии для исследования наноструктурных объектов (золи, нанодисперсные порошки, тонкие пленки). Подготовка нанодисперсных и массивных образцов для ЭГ исследований.</p> <p>Просвечивающая электронная микроскопия (ПЭМ). Диффузное рассеяние электронов веществом. Принцип формирования изображения в просвечивающем электронном микроскопе. Контраст изображения и определяющие его факторы. Общие сведения об устройстве прибора. Регулирование увеличения. Представления о разрешающей способности. Препарирование образцов для исследования. Подготовка нанодисперсных объектов к исследованию; прямое препарирование. Подготовка массивных объектов к исследованию методами ЭГ и ПЭМ. Использование метода реплик в просвечивающей электронной микроскопии. Сочетание прямых и косвенных методов препарирования для исследования гетерогенных систем. Выбор методики препарирования в зависимости от природы и микроструктуры исследуемых объектов. Влияние методики препарирования на контраст изображения, разрешающую способность реплик, характер получаемой информации. Обработка и интерпретация результатов ПЭМ исследования. Определение размеров частиц. Виды гистограмм и их выбор для обработки данных в зависимости от характера исследуемых объектов и цели исследования.</p> <p>Рентгенография. Взаимосвязь структура-свойство. Кристаллическое состояние: монокристалл, поликристалл. Дифракционные методы исследования структуры вещества (сравнительные характеристики, возможности и границы применения). Система атомов как дифракционная решетка. Условия Лауэ. Методы получения дифракционного эффекта: метод Лауэ, метод Дебая-Шерера, метод вращения. Области</p>	
--	--	---	--

		их применения. Фотографическая и дифрактометрическая аппаратура, пробоподготовка, особенности пробоподготовки наноматериалов. Факторы, влияющие на интенсивность дифракционного отражения. Влияние субструктуры образца на внешний вид рентгенограммы. Основы рентгеноструктурного анализа. Качественный рентгенофазовый анализ.	
5	Методы получения вещества в ультрадисперсном состоянии.	Общее представление о термодинамике и кинетике процессов зародышеобразования и роста зародышей твердой фазы. Возможности управления структурой твердых тел при выращивании монокристаллов, пленок, порошков путем регулирования пересыщения (переохлаждения) в системе. Общие принципы выращивания монокристаллов, поликристаллических и эпитаксиальных пленок. Классификация методов синтеза наночастиц. Принципы снизу-вверх и сверху-вниз. Физические методы (механические способы диспергирования, физические методы, основанные на испарении и конденсации, метод сушки вымораживанием и др.). Обзор наиболее распространенных химических методов синтеза твердофазных материалов. Возможности модификации этих методов для получения наночастиц. Криохимический синтез. Твердофазное восстановление, термическое разложение, химическое восстановление в жидкой фазе. Синтез в гетерофазных системах (в микроэмульсиях, обратных мицеллах, межфазный синтез). Синтез в полимерах и дендримерах. Радиационно-химические методы (радиолиз, импульсный радиолиз, фотолиз). Золь-гель-метод и его модификации. Принципы получения монодисперсных частиц. Возможности управление размерами и формой наночастиц при использовании различных методов синтеза.	семинары, самостоятельная работа
6	Основные принципы создания ансамблей наночастиц.	Особенности формирования наноструктур различной размерности (одно-, дву-, трехмерных). Понятие о самоорганизации. Молекулярная самоорганизация и самосборка материалов. Понятие об иерархических структурах. Простейшие способы создания ансамблей наночастиц (испарение капли и медленная дестабилизации коллоидных дисперсий). Коллоидные кристаллы. Молекулярное и ионное наслаивание. Самоорганизация в трехмерные структуры. Темплатный синтез. Использование биомолекул в синтезе наноструктур. Биомиметика. Литографические методы создания наноструктур.	Семинары, самостоятельная работа

	Мягкая литография.	
--	--------------------	--

5. Образовательные технологии

При реализации учебной работы используются активные образовательные технологии (лекции), технологии интерактивного обучения (презентации), информационно-коммуникативные технологии (компьютер, средства мультимедиа).

6. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы аспирантов.

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

Более углубленное изучение отдельных разделов дисциплины при подготовке к лекциям предполагает самостоятельную работу с литературой (в читальном зале библиотеки, с доступом к ресурсам Интернет). Самостоятельная работа подкрепляется учебно-методическим и информационным обеспечением, включающим учебники, учебно-методические пособия, конспекты лекций.

Текущий контроль успеваемости осуществляется в форме собеседования во время семинаров и контроля самостоятельной работы.

Итоговый контроль освоения дисциплины – зачет.

Вопросы для самоконтроля:

1. Просвечивающая электронная микроскопия (ПЭМ). Общие сведения об устройстве прибора. Представления о разрешающей способности.
2. Понятие о самоорганизации. Молекулярная самоорганизация и самосборка материалов.
3. Дифракционные методы исследования структуры вещества: теоретические основы, возможности и границы применения.
4. Перспективы нанотехнологий в материаловедении, вычислительной технике, биологии и медицине, энергетике и химической промышленности, охране окружающей среды и др.
5. Химическое равновесие. Основные понятия. Закон действующих масс. Изотерма Вант-Гоффа.

Критерии оценок выполнения задания:

Зачтено	Подготовка, уровень которой существенно выше среднего с некоторыми ошибками. Твердое знание всех разделов дисциплины. Допускаются неточности, нарушения в последовательности изложения материала.
---------	---

Незачтено	Необходима дополнительная подготовка для успешного прохождения испытания. Незнание значительной части основного содержания разделов дисциплины. Имеющихся знаний недостаточно для освоения дисциплин последующих курсов.
-----------	--

7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины.

Литература

Основная

1. Полтораки О. М. Термодинамика в физической химии. М.: Высш. шк., 1991.
2. Пригожин И., Кондепуди Д. Современная термодинамика. От тепловых двигателей до диссипативных структур. М.: Мир, 2002.
3. Смирнова Н. А. Методы статистической термодинамики в физической химии. М.: Высш. шк., 1982.
4. Адамсон А. Физическая химия поверхностей. М.: Мир, 1979.
5. Дамаскин Б. Б., Петрий О. А., Цирлина Г. А. Электрохимия. М.: Химия, 2001.
6. Даниэльс Ф., Олберти Р. Физическая химия. М.: Мир, 1978.
7. Дуров В. А., Агеев Е. П. Термодинамическая теория растворов неэлектролитов. М.: Изд-во МГУ, 1987.
8. Эткинс Н. Физическая химия. Т. 1, 2. М.: Мир, 1980.
9. Т.Н.Воробьева, А.И.Кулак. Химия твердого тела. Минск: Из-во БГУ. 2004.
10. И.П.Суздаев. Нанотехнология: Физико-химия нанокластеров, наноструктур, наноматериалов. М. URSS. 2005, 2009.
11. Ч.Пул, Ф.Оуэнс. Нанотехнологии. М.:Техносфера. 2005, 2009.
12. G.A. Ozin, A.C. Arsenault, L.Cademartiri. Nanochemistry. RCS Publishing. 2009.
13. Вест А. Химия твердого тела. Теория и приложения. Ч.1. М. Мир. 1988. 556 с.
14. Лукьянович В.М. Электронная микроскопия в физико-химических исследованиях. М. АН СССР. 1960.
15. Миркин Л.И. Рентгеноструктурный анализ: Справочное пособие. М. 1976.
16. Помогайло А.Д., Розенберг А.С., Уфлянд И.Е. Наночастицы металлов в полимерах. М.: Химия, 2000. 672 с.
17. Уманский Я.С., Скаков Ю.А., Иванов А.Н., Расторгуев Л.Н. Кристаллография, рентгенография и электронная микроскопия. Учебник для вузов. М. Металлургия. 1982. 632 с.
18. Шиммель Г. Методика электронной микроскопии. М. Мир. 1972.
19. Эндрюс К., Дайсон Д., Киоун С. Электронограммы и их интерпретация. М. Мир. 1971. 300 с.

Дополнительная

1. Вилков Л. В., Пентин Ю. А. Физические методы исследования в химии. М.: Изд-во МГУ. Ч. 1: 1987. Ч. 2: 1989.
2. Минкин В. И., Симкин Б. Я., Миняев Р. М. Теория строения молекул. Ростов-на-Дону: Феникс, 1997.
3. Бейдер Р. Атомы в молекулах. М.: Мир, 2001
4. Хаазе Р. Термодинамика необратимых процессов М.: Мир, 1967.
5. Ю.И. Петров. Кластеры и малые частицы. М.: Наука. 1986
6. С.Г.Губин. Химия кластеров. М.: Наука. 1987.
7. Нанотехнологии. Наноматериалы. Наносистемная техника. Мировые достижения – 2008. Сб. под ред. П.П.Мальцева. М.: Техносфера. 2008.
8. И.В. Мелихов. Физико-химическая эволюция твердого вещества. М.: Бином. Лаборатория знаний. 2008.
9. Д.И.Рожонков, В.В.Левшин, Э.Л.Дзидзигури. Наноматериалы. М.: Бином. Лаборатория знаний. 2008.
10. Мансури Г.Али. Принципы нанотехнологии: исследование конденсированных веществ малых систем на молекулярном уровне. М.: Научный мир. 2008.
11. Л.И. Гречихин. Наночастицы и нанотехнологии. Мн.: Право и экономика. 2008.
12. В.И. Балабанов. Нанотехнологии: наука будущего. М.: Эксмо. 2009.
13. Л.Фостер. Нанотехнологии. Наука, инновации и возможности. М.: Техносфера, 2008.
14. Наноструктурные материалы (под ред. Р.Ханника и А.Линн). М.: Техносфера, 2009.
15. Е.А. Кац. Фуллерены, углеродные нанотрубки и нанокластеры. М.: URSS: Либроком, 2009.

Программное обеспечение и Интернет-ресурсы:

<http://pubs.acs.org>

<http://www3.interscience.wiley.com/cgi-bin/home>

<http://www.thieme-connect.com/ejournals/home>

<http://search.tandf.co.uk/results.asp>

<http://www.rsc.org/Publishing/Journals/articlefinder.asp>

<http://springer.metapress.com>

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины.

Экспериментальные работы по получению координационных соединений и нанопродуктов выполняются в специализированных лабораториях, оснащенных

стандартным комплексом оборудования для проведения синтетической работы; кроме того, приборы для изучения их физико-химических свойств находятся в различных лабораториях Института. Для проведения ряда экспериментов по исследованию нанобъектов привлекается оборудование Научно-образовательного центра Нижнего Новгорода (ИФМ РАН, ИПФ РАН и др.)

Для самостоятельной подготовки используется библиотека с выходом в Интернет.