

Документ подписан простой электронной подписью

Информация о владельце:

ФИО: Лельчицкий Игорь Давыдович

Должность: и.о. проректора по образовательной деятельности

Дата подписания: 13.07.2026 14:52:26

Уникальный программный ключ:

aa5b5ee17d97a2e4d94e98e995320af94f043ce2

УП: 04.04.01 Химия

ФХ 2025.plx

**МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ**
ФГБОУ ВО «ТВЕРСКОЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»



Утверждаю:

Руководитель ООП:

 **П.М. Пахомов**

28 мая 2026 г.

Рабочая программа дисциплины

Нанохимия

Закреплена за кафедрой:	Неорганической и аналитической химии
Направление подготовки:	04.04.01 Химия
Направленность (профиль):	Физическая химия
Квалификация:	Магистр
Форма обучения:	очная
Семестр:	1

Программу составил(и):

д-р хим. наук, проф., Алексеев Владимир Георгиевич

1. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ

Цели освоения дисциплины (модуля):

Изучение студентами научных основ современных нанотехнологий.

Задачи :

Изучение методов получения наночастиц и наноразмерных покрытий. Изучение методов исследования наноструктур. Изучение областей применения наночастиц и наноструктурированных материалов.

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ООП

Цикл (раздел) ОП: Б1.О

Требования к предварительной подготовке обучающегося:

Электрохимические методы

Современные инструментальные методы анализа

Дисциплины (модули) и практики, для которых освоение данной дисциплины (модуля) необходимо как предшествующее:

Преддипломная практика

Физико-химические методы исследования

Научно-исследовательская работа

3. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ

Общая трудоемкость	4 ЗЕТ
Часов по учебному плану	144
в том числе:	
самостоятельная работа	114

4. ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ, СООТНЕСЕННЫЕ С ПЛАНИРУЕМЫМИ РЕЗУЛЬТАТАМИ ОСВОЕНИЯ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ

ОПК-3.2: Использует стандартные и оригинальные программные продукты, при необходимости адаптируя их для решения задач профессиональной деятельности

- | | |
|-----------|--|
| Уровень 1 | возможности имеющегося программного обеспечения и вычислительной техники для моделирования свойств наночастиц |
| Уровень 1 | составить аппаратно-программный комплекс, обеспечивающий решение поставленной задачи моделирования структуры и свойств наночастиц. |
| Уровень 1 | навыками работы с программами, обеспечивающими реализацию методов молекулярной механики, молекулярной динамики и квантовой химии |

ОПК-3.3: Использует современные вычислительные методы для обработки данных химического эксперимента, моделирования свойств веществ (материалов) и процессов с их участием

- | | |
|-----------|---|
| Уровень 1 | современные методы компьютерного химии моделирования структуры и свойств наночастиц |
| Уровень 1 | подобрать метод моделирования, соответствующий поставленной задаче |
| Уровень 1 | методиками составления компьютерных моделей наночастиц и наноструктурированных материалов |

5. ВИДЫ КОНТРОЛЯ

Виды контроля в семестрах:	
зачеты	1

6. ЯЗЫК ПРЕПОДАВАНИЯ

Язык преподавания: русский.

7. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

№	Наименование разделов и тем	Вид занятия	Сем.	Часов	Примечание
---	-----------------------------	-------------	------	-------	------------

Список образовательных технологий

1	Информационные (цифровые) технологии
2	Метод case-study

8. ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ТЕКУЩЕЙ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

8.1. Оценочные материалы для проведения текущей аттестации

Задание 1. С использованием программы Spartan создать компьютерную модель молекулы фуллерена C₆₀ и провести её геометрическую оптимизацию полуэмпирическим методом PM6.

Задание 2. С использованием программы Spartan создать компьютерную модель молекулы ПАМАМ второй генерации и провести её геометрическую оптимизацию методом молекулярной механики в силовом поле SYBYL

Тест 1: Укажите правильный ответ. Какая из программ пакета Schrodinger Materials Science Suite обеспечивает возможность проведения расчетов методом неэмпирической квантовой механики?

- А. Jaguar;
- Б. Macro Model;
- В. Desmond.

Тест 2. Укажите правильный ответ. Какой метод обеспечивает корректный расчёт парциальных зарядов атомов в молекуле?

- А. Молекулярной механики;
- Б. Полуэмпирической квантовой механики;
- В. Неэмпирической квантовой механики.

Тест 3. Для моделирования процессов самоорганизации в растворах дендримеров методом молекулярной динамики

- А. Достаточно вычислительной мощности обычного ноутбука.
- Б. С этой задачей справится настольный персональный компьютер;
- В. Необходим компьютерный кластер или суперкомпьютер.

Тест 4. Для оптимизации геометрии наночастиц методом полуэмпирической

квантовой механики

- А. Достаточно вычислительной мощности обычного ноутбука.
- Б. С этой задачей справится настольный персональный компьютер;
- В. Необходим компьютерный кластер или суперкомпьютер.

8.2. Оценочные материалы для проведения промежуточной аттестации

Задание 1. С использованием программы Mestro создать компьютерную кластера Au11, стабилизированного трифенилфосфином

Задание 2. С использованием программы Maestro создать компьютерную модель фуллерена C70

Тест 1. Укажите правильные ответы. Для теоретического расчёта инфракрасного спектра фуллерена C60 в программе Spartan можно использовать методы:

- А. Molecular Mechanics – SYBYL;
- Б. Semi-Empirical – PM6;
- В. Hartree-Fock – STO3G;
- Г. Density Functional – B3LYP – 6-31G**
- Д. Moller-Plesset – MP2 – cc-pVTZ

Тест 2. Укажите правильный ответ. Для моделирования структуры одностенной нанотрубки можно использовать методы:

- А. Молекулярной динамики;
- Б. Молекулярной механики;
- В. Полуэмпирической квантовой механики;
- Г. Неэмпирической квантовой механики

Тест 1. Укажите правильный ответ. На сегодняшний день наиболее часто применяемым для оптимизации геометрии наночастиц является метод:

- А. Hartree-Fock – 3-21G;
- Б. Density Functional – B3LYP – 6-31G
- В. Moller-Plesset – MP2 – cc-pVTZ

Тест 2. Укажите правильный ответ. При расчете энергии наночастицы методом DFT наибольшую точность обеспечит использование набора базисных функций

- А. cc-pVTZ;
- Б. STO3G;
- В. 6-31G.

8.3. Требования к рейтинг-контролю

9. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Рекомендуемая литература

Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет"

Э1	Teach-in - Лекции преподавателей МГУ им. М.В. Ломоносова Введение в нанотехнологию и наноматериалы https://teach-in.ru/lecture/05-18-Shevelkov-Gudilin : https://teach-in.ru/lecture/05-18-Shevelkov-Gudilin
----	--

Перечень программного обеспечения

1	Kaspersky Endpoint Security 10 для Windows
2	Adobe Acrobat Reader
3	Google Chrome
4	WinDjView
5	OpenOffice
6	VLC media player
7	ADE
8	Foxit Reader
9	Notepad++
10	STDU Viewer
11	ISIS Draw
12	Origin 8.1 Sr2
13	HyperChem
14	ОС Linux Ubuntu
15	Многофункциональный редактор ONLYOFFICE

Современные профессиональные базы данных и информационные справочные системы

1	Архивы журналов издательства Nature
2	Ресурсы издательства Springer Nature
3	Электронная коллекция книг Оксфордского Российского фонда
4	БД Web of Science
5	БД Scopus
6	Журналы издательства Taylor&Francis
7	Журналы American Chemical Society (ACS)
8	Репозиторий ТвГУ
9	Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU (подписка на журналы)
10	ЭБС ТвГУ
11	ЭБС BOOK.ru
12	ЭБС «Лань»
13	ЭБС IPRbooks
14	ЭБС «Университетская библиотека онлайн»
15	ЭБС «ЮРАИТ»
16	ЭБС «ZNANIUM.COM»

10. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Аудит-я	Оборудование
3-404	комплект учебной мебели, переносной ноутбук, проектор, аквадистиллятор, весы, ИК Фурье спектрометр, компьютер, фотоколориметр КФК-2, электропечи
3-406	комплект учебной мебели, весы, лабораторные ионометры, портативные рН-метры, потенциостат-гальваностат, сканер, шкафы, компьютеры, гиря

11. МЕТОДИЧЕСКИЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ОБУЧАЮЩИХСЯ ПО ОСВОЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ

Вопросы и задания к самостоятельной работе студентов:

1. Как можно классифицировать методы синтеза наночастиц?
2. Сформулируйте особенности химического восстановления при получении наночастиц металлов.
3. Приведите примеры получения наночастиц металлов химическим и радиационно-химическим восстановлением.
4. Каковы функции органических растворителей в синтезе наночастиц?
5. Объясните, почему мицеллы и дендримеры можно использовать для стабилизации наночастиц.
6. Приведите примеры применения пористых структур для стабилизации наночастиц.
7. Сравните фотохимическое и радиационно-химическое восстановление для синтеза наночастиц металлов. Приведите примеры.
8. Объясните принципы золь-гель-метода и особенности использования сверхкритических растворов для синтеза наночастиц.
9. Охарактеризуйте сходство и различие методов матричной изоляции и препаративной криохимии.
10. Назовите особенности конденсации веществ на холодные поверхности.
11. Опишите факторы, влияющие на реакции при низких температурах.
12. Приведите примеры установок для получения наночастиц с применением различных химических методов.
13. Как можно управлять размером и формой наночастиц?
14. Приведите примеры использования полимеров для управления формой наночастиц.
15. Назовите известные вам формы наночастиц. Приведите примеры.
16. Назовите методы исследования свойств частиц на поверхности и охарактеризуйте получаемую информацию.
17. Назовите методы исследования свойств наночастиц в объеме и охарактеризуйте получаемую информацию.
18. Охарактеризуйте особенности и специфику просвечивающей электронной микроскопии.
19. Опишите принципы работы зондовых микроскопов различных типов.
20. Охарактеризуйте особенности дифракционных методов анализа.
21. Сопоставьте специфику и чувствительность различных спектральных методов.
22. Объясните конкурентные механизмы реакций частиц магния с галогенуглеводородами.
23. Охарактеризуйте особенности криореакций частиц различных металлов с диоксидом углерода.
24. Объясните особенности и причины взрывных криореакций.
25. Приведите примеры применения полимеров для стабилизации моно- и биметаллических наночастиц.
26. Опишите и объясните особенности спектров серебро–свинец.
27. Охарактеризуйте особенности изменения проводимости моно- и бинаночастиц различных металлов.
28. На каких свойствах жидких кристаллов основано их использование в качестве стабилизаторов?
29. Объясните изменения, наблюдаемые в электронных спектрах и спектрах ЭПР в системе серебро-цианобифенил.
30. Приведите примеры использования метастабильных комплексов для изучения активности частиц металлов.
31. Охарактеризуйте особенности электронного строения РЗЭ.
32. Охарактеризуйте особенности реакций частиц самария со спиртами и углеводородами.

33. Назовите специфические особенности реакций частиц металлов в низкотемпературных конденсатах.
34. Проанализируйте реакционные возможности метода криоконденсации.
35. На примере самария и гольмия объясните особенности их спектров в матрице аргона.
36. Назовите и объясните особенности реакций частиц магния с галогенметанами при сверхнизких температурах.
37. Сравните реакции частиц магния и самария в двойных и тройных системах.
38. Охарактеризуйте особенности реакций частиц магния с четыреххлористым углеродом. Сформулируйте возможный механизм реакции.
39. Поясните на примерах понятия активности и селективности наночастиц металлов.
40. Объясните на примере частиц серебра, как можно управлять их размером и формой.
41. Охарактеризуйте особенности полуэмпирических, неэмпирических и гибридных методов теоретического моделирования.
42. Охарактеризуйте преимущества низких температур при изучении реакций с участием частиц металлов.
43. Охарактеризуйте особенности метода матричной изоляции и требования к матрицам.
44. Что такое нанореакторы?
45. Почему частицы магния пользуются особым вниманием исследователей? Приведите примеры.
46. Объясните особенности реакций и активности частиц магния и кальция с моногалогенметанами.
47. Приведите примеры реакций с участием нанокристаллов оксида магния.
48. Охарактеризуйте особенности реакций частиц ниобия с различными молекулами.
49. Объясните особенности размерного эффекта в кинетике реакций частиц ниобия с дейтерием и азотом.
50. Приведите примеры размерных эффектов с участием частиц вольфрама и ванадия.
51. Приведите примеры реакций немонотонной зависимости от числа атомов железа.
52. Охарактеризуйте особенности процесса получения сольватированных частиц металлов.
53. Приведите примеры реакций с участием наночастиц кобальта.
54. Охарактеризуйте особенности получения биметаллических частиц FePt.
55. Охарактеризуйте специфику реакций заряженных и нейтральных частиц меди.
56. Что такое пересольватация частиц металла? Приведите примеры.
57. Приведите примеры получения частиц разной формы.
58. Приведите примеры и проанализируйте особенности реакций с участием частиц алюминия.
59. Приведите примеры реакций с участием четных и нечетных частиц.
60. Охарактеризуйте самоорганизацию частиц и стабилизирующих лигандов. Приведите те примеры.
61. Приведите примеры и объясните процессы самоорганизации сферических и стержнеобразных частиц.
62. Сформулируйте условия, влияющие на самоорганизацию наночастиц.
63. Перечислите и охарактеризуйте методы исследования самоорганизации наночастиц.
64. Охарактеризуйте особенности химических реакций с участием фуллеренов.
65. Как получают нанотрубки? Какова химия нанотрубок?
66. Охарактеризуйте те процессы заполнения нанотрубок.
67. Как осуществляют прививку функциональных групп к нанотрубкам?
68. Приведите примеры внедрения атомов и молекул в многослойные трубки.
69. Какие размерные эффекты наблюдаются в нанохимии?
70. Какие модели использованы для анализа взаимодействий металл–лиганд?

71. Охарактеризуйте модели, использованные для описания зависимости температуры плавления от размера частиц металла.
72. Охарактеризуйте зависимость оптических спектров от размера частиц.
73. Как связана постоянная решетки с размером частицы?
74. Охарактеризуйте особенности кинетики реакций с участием малого числа частиц.
75. Охарактеризуйте особенности термодинамики наночастиц.
76. Охарактеризуйте влияние pH на термодинамику наночастиц.
77. Приведите примеры каталитических реакций на наночастицах различных металлов.
78. Охарактеризуйте отдельные стадии фотокаталитического восстановления дисульфидов на диоксиде титана с нанесенными наночастицами серебра.
79. Приведите примеры размерных эффектов в фотокатализе.
80. Охарактеризуйте возможности зондовой микроскопии в осуществлении химических реакций.
81. Охарактеризуйте особенности окисления оксида углерода частицами разного размера различных металлов.
82. Приведите примеры и отметьте особенности каталитических реакций с участием наночастиц палладия.
83. Приведите примеры реакции нанокристаллических оксидов.
84. Приведите примеры получения и использования полупроводниковых наночастиц.
85. Объясните влияние размера частиц полупроводников на ширину запрещенной зоны.
86. Объясните принцип работы наноразмерного электронного выключателя.
87. Приведите примеры сенсорных материалов на основе полупроводниковых оксидов и гетероструктур.
88. Какие возможности открывает для получения сенсоров использование наноматериалов?
89. Приведите примеры фотохимических превращений с участием наночастиц.
90. Приведите примеры использования углеродных нанотрубок.
91. Охарактеризуйте методы использования наночастиц в биологии и медицине.
92. Назовите методы введения биоматериалов в живые клетки и организмы.
93. Охарактеризуйте процессы распознавания биомолекулами неорганических материалов.
94. Охарактеризуйте значение квантово-химических методов анализа и реакций в газовой фазе.
95. Сформулируйте возможности использования низких температур для развития нанохимии.
96. Поясните, как в нанохимии пересекаются научные и практические проблемы.
97. Охарактеризуйте проблемы масштабирования и воспроизводимости и их связь с размером изучаемых частиц.
98. Объясните значение для нанохимии исследований в широком интервале температур.

Тематика рефератов:

1. Использование нанотрубок в химических сенсорах.
2. Лаборатории на чипе – химические наносенсоры
3. Наночастицы как катализаторы
4. Криохимия наночастиц
5. Полимерные нанокомпозиты
6. Наночастицы в современной медицине
7. Компьютерное моделирование структуры наночастиц
8. Компьютерное моделирование структуры нанокомпозитов
9. Размерные эффекты в нанохимии и нанотехнологии
10. Синтез и свойства наночастиц оксидов металлов
11. Синтез и свойства квантовых точек

12. Дендримеры как наночастицы и макромолекулы
13. Фуллерены в современной технологии наноматериалов
14. Неуглеродные нанотрубки
15. Координационная химия наночастиц
16. Методы исследования наноструктуры поверхностей
17. Методы исследования наночастиц в растворе
18. Методы получения нанокомпозитов
19. Наноструктурированные волокна. Получение и свойства.
20. Наноструктурированные пленки. Получение и свойства.

Вопросы для подготовки к зачету по дисциплине:

1. Как можно классифицировать методы синтеза наночастиц?
2. Как можно управлять размером и формой наночастиц?
3. Назовите методы исследования свойств частиц на поверхности и охарактеризуйте получаемую информацию.
4. Назовите методы исследования свойств наночастиц в объеме и охарактеризуйте получаемую информацию.
5. На каких свойствах жидких кристаллов основано их использование в качестве стабилизаторов?
6. Назовите и объясните особенности реакций частиц магния с галогенметанами при сверхнизких температурах.
7. Охарактеризуйте особенности полуэмпирических, неэмпирических и гибридных методов теоретического моделирования.
8. Охарактеризуйте особенности метода матричной изоляции и требования к матрицам.
9. Как получают нанотрубки? Какова химия нанотрубок?
10. Приведите примеры каталитических реакций на наночастицах различных металлов.

Рекомендуемая литература

а) Основная литература:

1. Нанотехнологии. Химические, физические, биологические и экологические аспекты : монография / М. Н. Тимофеева, В. Н. Панченко, В. В. Ларичкин [и др.]. - Новосибирск : Изд-во НГТУ, 2019. - 283 с. - (Серия «Монографии НГТУ»). - ISBN 978-5-7782-3863-3. - Текст : электронный. - URL: <https://znanium.com/catalog/product/1866282> (дата обращения: 02.10.2023). – ,

2. Методы получения и исследования наноматериалов и наноструктур. Лабораторный практикум по нанотехнологиям : учебное пособие / Е. Д. Мишина, Н. Э. Шерстюк, А. А. Евдокимов [и др.] ; под ред. А. С. Сигова. - 6-е изд. - Москва : Лаборатория знаний, 2021. - 187 с. - (Учебник для высшей школы). - ISBN 978-5-93208-545-5. - Текст : электронный. - URL: <https://znanium.com/catalog/product/1984941> (дата обращения: 02.10.2023). – Режим доступа: по подписке.

б) Дополнительная литература:

1. Раков, Э. Г. Неорганические наноматериалы : учебное пособие / Э. Г. Раков. — 3-е изд., электрон. — Москва : Лаборатория знаний, 2020. — 480 с. — (Нанотехнологии). — ISBN 978-5-00101-741-7. - Текст : электронный. - URL: <https://znanium.com/catalog/product/1094379> (дата обращения: 21.06.2021).

2. Метрологическое обеспечение нанотехнологий и продукции nanoиндустрии : учебное пособие / О. Д. Анашина, С. Е. Андрюшечкин, С. И. Аневский [и др.] ; под. ред. В. Н. Крутикова. - Москва : Логос, 2020. - 592 с. - ISBN 978-5-98704-613-5. - Текст : электронный. - URL: <https://znanium.com/catalog/product/1212442> (дата обращения: 21.06.2021).

3. Годымчук, А. Ю. Экология наноматериалов : учебное пособие / А. Ю. Годымчук, Г. Г. Савельев, А. П. Зыкова ; под ред. Л. Н. Патрикеева, А. А. Ревинной. — 3-е изд., электрон. — Москва : Лаборатория знаний, 2020. — 275 с. — (Нанотехнологии). — ISBN 978-5-00101-838-4. - Текст : электронный. - URL: <https://znanium.com/catalog/product/1093269> (дата обращения: 21.06.2021).

Илюшин В.А. Наноматериалы : учебное пособие / Илюшин В.А.. — Новосибирск : Новосибирский государственный технический университет, 2019. — 114 с. — ISBN 978-5-7782-3858-9. — Текст : электронный // Электронно-библиотечная система IPR BOOKS : [сайт]. — URL: <http://www.iprbookshop.ru/98719.html>