

Федеральное государственное учреждение
«Федеральный научно-исследовательский центр
«Кристаллография и фотоника»
Российской академии наук»

Принято на Ученом совете ЦФ РАН
Протокол № 2 от 08.04.2020 г.

«Утверждаю»

Директор



 О.А. Алексеева

« 08 » апреля 2020 г.

Рабочая программа дисциплины
"Методы описания процессов в ансамблях наночастиц (самосборка)"

Направление подготовки
04.06.01. ХИМИЧЕСКИЕ НАУКИ
Направленность (профиль) подготовки
«Физическая химия» (02.00.04)

Квалификация (степень) выпускника
Исследователь. Преподаватель-исследователь

Форма обучения очная

Москва 2020

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения основной образовательной программы

В результате освоения основной образовательной программы подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре у обучающегося должны быть сформированы следующие универсальные, общепрофессиональные и профессиональные компетенции:

Код компетенции	Результаты освоения ООП <i>Содержание компетенций</i>	Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине
ОПК-1	Способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий	<p>знать:</p> <ul style="list-style-type: none"> - способы анализа имеющейся информации - методологию, конкретные методы и приемы научно-исследовательской работы с использованием современных компьютерных технологий - сущность информационных технологий <p>уметь:</p> <ul style="list-style-type: none"> - ставить задачу и выполнять научные исследования при решении конкретных задач по направлению подготовки с использованием современной аппаратуры и вычислительных средств - применять теоретические знания по методам сбора, хранения, обработки и передачи информации с использованием современных компьютерных технологий

ПК-3	<p>владение современными методами физико-химического исследования органических веществ, средствами планирования и организации исследований, проведения экспериментов, выдвижения гипотез и установления границ их применения</p>	<p>Знать: Физикохимию тепломассопереноса</p> <p>Уметь: Получать термодинамические потенциалы для ансамблей наночастиц из статистического подхода Уметь проводить классификацию методов описания самосборки в зависимости от характерного размера системы Уметь представлять результаты своих исследований в виде научных отчетов.</p> <p>Владеть: понятием о методах статистической физики и термодинамики, а также физической кинетики применимо к ансамблям наночастиц</p>
ПК-5	<p>умение применять основные законы химии при обсуждении полученных результатов, в том числе с привлечением информационных баз данных</p>	<p>Знать: методы математической физики в физикохимии</p> <p>Уметь: применять их для создания моделей тепломассопереноса в задачах самоорганизации и самосборки</p> <p>Владеть: современными методами решения дифференциальных уравнений и графической визуализации результатов (MATCAD, MATLAB, COMSOL и т.п.)</p>

2. Место дисциплины в структуре программы подготовки аспиранта

Дисциплина изучается на 2 курсе.

Курс предназначен для аспирантов, специализирующихся в области многомасштабного моделирования наноструктур, и служит введением в физику процессов самосборки – одного из ключевых понятий современных технологий, связанных с производством микро- и нано-структурированных материалов, в основе которых лежит использование самоорганизующихся ансамблей наноструктур (макромолекул, микро- и наночастиц) в

диссипативных системах, таких как испаряющиеся слои коллоидных растворов. В курсе также рассматриваются методы описания основных физико-химических свойств упорядоченных структур, полученных в результате указанных процессов.

Целью преподавания дисциплины «**Методы описания процессов в ансамблях наночастиц (самосборка)**» являются освоение принципов самосборки ансамблей микро- и наночастиц, движущих сил и способов управления архитектурой ансамбля частиц; изучение методов исследования физико-химических свойств наноструктур. Полученные в результате освоения данной дисциплины навыки и знания используются при проведении научно-поисковых исследований.

Описание процессов самосборки ансамблей частиц с методической точки зрения принципиально требует междисциплинарного подхода, привлечения ряда специальных разделов теоретической физики и физической химии, методов компьютерного моделирования и освоения экспериментальных методов получения и исследования микро- и наноструктур. В междисциплинарности подхода и состоит специфика данного курса, который не имел прямых аналогов в учебной программе, отражая новейшие потребности подготовки специалистов для работы в области нанотехнологий.

Для изучения дисциплины необходимы знания, сформированные у аспирантов в результате освоения дисциплин базовой части (общепрофессиональные дисциплины) и образовательных программ магистратуры и специалитета по направлению «Химия»:

-Неорганическая химия (состав, строение и химические свойства основных простых веществ и химических соединений, связь строения вещества и протекания химических процессов, навыки описания свойств веществ на основе закономерностей, вытекающих из периодического закона и Периодической системы элементов);

-Органическая химия (владение теоретическими представлениями органической химии, знаниями о составе, строении и свойствах органических веществ - представителей основных классов биологически активных соединений);

-Квантовая механика и квантовая химия (представление о механизмах образования химической связи, строении и спектральных свойствах атомов и молекул);

-Оптика (представление о природе и характеристиках света, его источниках, взаимодействии его с веществом, знакомство с простейшими оптическими приборами);

-Физические методы исследования (знание принципов и областей использования основных физических методов исследования и анализа веществ).

3. Объем дисциплины в зачетных единицах с указанием количества академических часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам занятий) и на самостоятельную работу обучающихся

Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 зачетных единицы (з.е.), 144 академических часа.

3.1. Объем дисциплины по видам учебных занятий (в часах)

Объем дисциплины	Всего часов
Общая трудоемкость дисциплины	144
Контактная работа обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) (всего)	36
<i>Аудиторная работа (всего):</i>	36
в том числе:	
Лекции	18
Научно-практические занятия	18
Самостоятельная работа (всего):	108

Индивидуальная работа обучающихся с литературой, интернет-ресурсами	108
Научно-исследовательская работа	
Групповая, индивидуальная консультация	
Творческая работа (рефераты)	
Объем дисциплины	Всего часов
Вид промежуточной аттестации (зачет)	зачет

4. Содержание дисциплины, структурированное по разделам с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий

4.1. Разделы дисциплины и трудоемкость по видам учебных занятий (в академических часах)

очная форма обучения

№ темы	Наименование разделов, тем дисциплины	Часы			
		Всего	Лекции	Практ. Занятия	СР
1	Теория самосборки: основные понятия и методы	42	2	6	30
2	Методы моделирования самосборки	62	8	6	34
3	Кинетика и динамика наночастиц в растворе	66	8	6	34
4	Зачёт	10			10
Итого		144	18	18	108

4.2. Содержание дисциплины, структурированное по разделам

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание
1	Теория самосборки: основные понятия и методы	<p>Лекционные занятия:</p> <p>Понятия самосборки и самоорганизации: история возникновения, эволюция, сходство и отличие.</p> <p>Упорядочение в диссипативной открытой системе: физическая сущность явления. Поведение термодинамических функций и параметров в процессе самосборки.</p> <p>Практические занятия:</p> <p>Две основные задачи при описании самосборки в микрокаплях и тонких пленках</p>
2	Методы моделирования самосборки	<p>Лекционные занятия</p> <p>Методы моделирования: континуальный; полудискретный; дискретный</p> <p>Практические занятия</p>

		Движущие силы процессов самосборки.
3	Кинетика и динамика наночастиц в растворе	<p>Лекционные занятия</p> <p>Кинетика и динамика наночастиц в растворе Физико-химические свойства и приложения ансамблей наноструктур, полученных методом самосборки. Растворы наночастиц как объект коллоидной химии.</p> <p>Практические занятия</p> <p>Способы управления самосборкой. Эксперименты по самосборке ансамблей наночастиц и теоретической (в т.ч. компьютерной) их интерпретации.</p>

5. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине

6.1. Паспорт фонда оценочных средств по дисциплине

Наименование раздела	Контролируемые разделы дисциплины (результаты по разделам)	Код контролируемой компетенции (или её части) / и ее формулировка	Наименование оценочного средства
Раздел 1	Тема 1. Понятия самосборки и самоорганизации: история возникновения, эволюция, сходство и отличие.	ОПК-1 ПК-3 ПК-5	зачет
	Тема 2. Упорядочение в диссипативной открытой системе: физическая сущность явления. Поведение термодинамических функций и параметров в процессе самосборки.		
	Тема 3. Две основные задачи при описании		

	самосборки в микрокаплях и тонких пленках		
Раздел 2	Тема 4. Методы моделирования: континуальный; полудискретный; дискретный		
	Тема 5. Движущие силы процессов самосборки.		
	Тема 6. Способы управления самосборкой.		
Раздел 3	Тема 7. Растворы наночастиц как объект коллоидной химии.		
	Тема 8. Кинетика и динамика наночастиц в растворе		
	Тема 9. Результаты экспериментов по самосборке ансамблей наночастиц и теоретической (в т.ч. компьютерной) их интерпретации.		
	Тема 10. Физико-химические свойства и приложения ансамблей наноструктур, полученных методом самосборки.		

5.2. Типовые контрольные задания или иные материалы

5.2.1. Итоговый контроль качества освоения дисциплины (зачет).

Вопросы к зачету

1. История возникновения понятий самосборки и самоорганизации, эволюция понятий, сходство и отличие.

2. Коллоидный раствор. Статистическая сумма и термодинамические функции разреженного коллоидного раствора.
3. Понятие самоорганизации в синергетике и его отличие от понятия самосборка.
4. Структура потенциалы взаимодействия коллоидных частиц согласно теории Дерягина-Ландау-Фервея-Овербика.
5. Способы управление самосборкой.
6. Устойчивость и коагуляция коллоидного раствора.
7. Самосборка и самоорганизация в природе. Экспериментальные методы исследования свойств наноструктурированных пленок.
8. Как изменяется энтропия ансамбля наночастиц в процессе самосборки.
9. Капельные технологии и их применение.
10. Упорядочение ансамбля наночастиц в растворе и второе начало термодинамики. Как изменяется энтропия ансамбля наночастиц в процессе самосборки.
11. Актуальность исследований процессов самосборки с фундаментальной и прикладной точек зрения.
12. Статистическая сумма и термодинамические функции раствора взаимодействующих наночастиц.
13. Назначение физического моделирования и компьютерного эксперимента в самосборке ансамблей наночастиц в микрокапле.
14. Диффузия и броуновское движение коллоидов. Среднее число столкновений в единицу времени.
15. Две основные задачи при описании самосборки в микрокаплях и тонких пленках.
16. Взаимодействие частиц с подложкой. Адсорбция раствора.
17. Самосборка в тонких пленках и микрокаплях: основные части системы и движущие силы процесса.
18. Геометрия капли на плоской подложке.
19. Самосборка ансамблей наноструктур и ее отношение к нанотехнологиям.
20. Испарение раствора: физическая модель и ее применение для капли на плоской подложке.
21. Методы моделирования: континуальный; полудискретный; дискретный. Чем регламентируется выбор.
22. Гидродинамические потоки в высыхающей капле раствора на подложке.
23. Движущие силы самосборки наночастиц в каплях и тонких пленках раствора: взаимодействия основных компонентов системы в процессе самосборки.
24. Теория Дебая-Хюккеля и электростатическая часть взаимодействия коллоидных частиц.
25. Основные представления о диссипативной динамике частиц. Общее и отличия по сравнению с молекулярной динамикой.
26. Дисперсионные взаимодействия коллоидных частиц.
27. Автоколебательные процессы в испаряющемся мениске коллоидного раствора.
28. Конвективные гидродинамические потоки в капле. Термофорез и термодиффузия.
29. Приложения строуктурированных элементов, полученных в процессе самосборки.
30. Уравнения движения коллоидной частицы в растворе. Диссипативная динамика частиц.

5.2 Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующие этапы формирования компетенций

Для контроля усвоения данной дисциплины учебным планом предусмотрена сдача зачета. Аспирант считается допущенным к сдаче зачета при условии выполнения им плана учебных занятий. На зачете обучающимся предлагается решить задачу и ответить на два теоретических вопроса по материалам учебной дисциплины.

При проведении зачета ответ считается зачтенным в случае более 50 % правильных ответов

на теоретические вопросы. Ответ считается не зачтенным, если материал усвоен аспирантом менее, чем на 50%.

Для получения более глубоких и устойчивых знаний аспирантам рекомендуется изучать дополнительную литературу, список которой приведен в п. 7 рабочей программы по дисциплине.

Для расширения знаний по дисциплине рекомендуется использовать Интернет-ресурсы: поисковые сайты, базы данных химических соединений, электронные библиотеки (п. 6).

6. Перечень основной и дополнительной литературы (учебной и научной), необходимой для освоения дисциплины

а) основная литература:

1. Лебедев-Степанов П.В. Введение в самосборку ансамблей наночастиц. М.: НИЯУ МИФИ, 2012, 184 с.
2. Лебедев-Степанов П.В. Введение в самоорганизацию и самосборку ансамблей наночастиц. М.: НИЯУ МИФИ, 2015. – 304 с. ISBN 978-5-7262-2132-8

б) дополнительная литература:

1. Л.Д. Ландау, Е.М.Лифшиц Теоретическая физика. Т. 10. Физическая кинетика. М.: Наука. 2002. 533 с.
2. Л.Д. Ландау, Е.М.Лифшиц Теоретическая физика. Т.6 Гидродинамика. М.: Наука. 2001.
3. Л.Д. Ландау, Е.М.Лифшиц Теоретическая физика. Т. 5. Статистическая физика. М.: Наука. 2002.

Периодические издания, электронные ресурсы, включая доступ к базам данных и т.д.:

РИНЦ	https://elibrary.ru/orgs.asp
Web of Science	http://apps.webofknowledge.com/WOS_GeneralSearch_input.do?product=WOS&search_mode=GeneralSearch&SID=F2LiEv3BvmxwoCqmOmV&preferencesSaved=
Scopus	https://www.scopus.com/home.uri
Google Scholar citations	https://scholar.google.ru/citations?user=NbJEoV8AAAJ&hl=ru
IOP Institute of Physics материалы компании IOP Publishing Limited, а именно, база данных IOP Journal	http://www.iop.org/
AIP материалы компании American Institute of Physics	https://www.aip.org/
CASC материалы издательства EBSCO Publishing, а именно база данных CASC	https://www.ebsco.com/e/ru-ru/products-and-services/research-databases
APS Журналы Американского физического общества база данных APS Online Journals	https://www.aps.org/
IEEE материалы компании The Institute of Electrical and Electronics	http://ieeexplore.ieee.org/Xplore/home.jsp

Engineers, Inc, а именно, база данных IEEE/IEL	
RSC материалы Royal Society of Chemistry	http://pubs.rsc.org/
Wiley материалы компании John Wiley & Sons Ltd., а именно база данных Wiley Journals	http://onlinelibrary.wiley.com/
Inspec материалы издательства EBSCO Publishing, а именно база данных INSPEC	https://www.ebsco.com/e/ru-ru/products-and-services/research-databases/inspec
ProQuest материалы компании и PROQUEST LLC, а именно база данных Proquest Dissertations and Theses Global	https://www.proquest.com/products-services/pqdtglobal.html
SpringerNature Зарубежные электронные ресурсы издательства, а именно: Springer Journals Springer Protocols Springer Materials Springer Reference zbMATH Nature Journals Nano Database	http://link.springer.com/ http://www.springerprotocols.com/ http://materials.springer.com/ http://link.springer.com/search?facet-content-type=%22ReferenceWork%22 http://zbmath.org/ http://npg.com/ https://nano.nature.com
Elsevier B.V. Science Direct Complete Freedom Collection зарубежные электронные ресурсы издательства Elsevier «Freedom Collection» и коллекция электронных книг «Freedom Collection eBook collection», размещенных на платформе Science Direct	https://www.elsevier.com/
CCDC - Cambridge Crystallographic Data Centre Зарубежные электронные ресурсы Кембриджского центра структурных данных	https://www.ccdc.cam.ac.uk/
Scifinder База данных	https://scifinder.cas.org

7. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

вид учебных занятий	организация деятельности обучающегося
---------------------	---------------------------------------

Лекция	Написание конспекта лекций: кратко, схематично, последовательно фиксировать основные положения, выводы, формулировки, обобщения; помечать важные мысли, выделять ключевые слова, термины. Если самостоятельно не удастся разобраться в материале, необходимо сформулировать вопрос и задать преподавателю на консультации, на практическом занятии.
Научно-практические занятия	Конспектирование источников. Работа с конспектом лекций, подготовка ответов к контрольным вопросам, просмотр рекомендуемой литературы, работа с текстом. Прослушивание аудио- и видеозаписей по заданной теме, решение расчетно-графических заданий, решение задач по алгоритму и др.
Самостоятельная работа/индивидуальные задания	Знакомство с основной и дополнительной литературой, включая справочные издания, зарубежные источники, конспект и т.д. Составление аннотаций к прочитанным литературным источникам и др. Работа по написанию раздела главы научно-исследовательской работы.
Реферат	Краткое изложение в письменном виде содержания научных трудов, литературы по предложенной научной теме.
Подготовка к экзамену (зачету)	При подготовке к экзамену (зачету) необходимо ориентироваться на конспекты лекций, рекомендуемую литературу и др.

8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине, включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем

1. Консультирование посредством электронной почты.
2. Интерактивное общение с помощью Skype.
3. Использование слайд-презентаций при проведении лекционных занятий.
4. При обсуждении тем лекционных занятий, обсуждаются последние достижения, опубликованные в научных статьях и на конференциях, новейшие приложения систем с самосборкой ансамблей микро- и наноструктур, микрофлюидных систем. Обязательным является самостоятельная работа студентов, выполнение индивидуальных заданий, работа с литературой.

9. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине

1. Аудитория, обеспеченная компьютером и проектором для демонстрации презентаций, а также стандартной доской для рисования мелом.

Составитель программы: П.В. Лебедев-Степанов