

федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования  
«Тольяттинский государственный университет»

ФТД.В.01  
(индекс дисциплины)

## РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Структура и свойства металлических кластеров, нано- и микрообъектов

(наименование дисциплины)

по направлению подготовки (специальности)

22.06.01 Технологии материалов

(Код и наименование направления подготовки, специальности в соответствии с ФГОС ВО)

Металловедение и термическая обработка металлов и сплавов

(направленность (профиль))

Форма обучения: очная

Год набора: 2018

**Распределение часов дисциплины по семестрам и видам занятий (по учебному плану)**

Количество ЗЕТ	8											
Часов по РУП	288											
Виды контроля в семестрах:	Экзамены			Зачеты			Курсовые проекты		Курсовые работы		Контрольные работы (для заочной формы обучения)	
	1											
	№№ курсов											
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	Итого
ЗЕТ по семестрам	8											8
Лекции	8											8
Лабораторные	16											16
Практические	16											16
Контактная работа	40											40
Сам. работа	212											212
Контроль	36											36
Итого	288											288

Тольятти, 2018

Рабочая программа составлена на основании ФГОС ВО и учебного плана направления подготовки (специальности) 22.06.01 Технологии материалов  
(код и наименование направления подготовки, специальности в соответствии с ФГОС ВО)

**Рецензирование рабочей программы дисциплины:**

- ☐ Отсутствует
- ☐ Учебная (рабочая) программа одобрена на заседании кафедры «Нанотехнологии, материаловедение и механика» (протокол заседания № 10 от «07» 03 2018 г.).
- ☐ Рецензент

**Срок действия программы практики до «07» 03 2022 г.**

**Информация об актуализации рабочей программы дисциплины:**

Протокол заседания кафедры № 13 от «19» 06 2018г.

Протокол заседания кафедры № 1 от «30» 08 2019г.

Протокол заседания кафедры № 1 от «31» 08 2020г.

Протокол заседания кафедры № 2 от «31» 08 2021г.

**УТВЕРЖДАЮ**

Заведующий кафедрой

НМиМ

(разработавшей РПД)

«\_\_\_» \_\_\_\_\_ 20\_\_ г.

\_\_\_\_\_  
(подпись)

А.С.Селиванов

(И.О. Фамилия)

**АННОТАЦИЯ**  
**дисциплины (учебного курса)**  
**ФТД.В.01 Структура и свойства металлических кластеров, нано- и**  
**микрообъектов**  
(индекс и наименование дисциплины (учебного курса))

**1. Цель и задачи изучения дисциплины (учебного курса)**

Цель – знакомство с основами технологического подхода «снизу-вверх» для получения нанообъектов, наносистем и наноматериалов из кластеров. Изучить механизмы роста, особенности строения и свойства нанообъектов.

Задачи:

1. Дать классификацию кластеров, нанообъектов и наносистем.
2. Ознакомить с моделями строения кластеров.
3. Ознакомить с технологией получения и механизмами роста нанообъектов из кластеров.
4. Показать особенности структуры и свойств нанообъектов и наносистем на основе металла.
5. Ознакомить с технологией получения механизмами роста, особенностями строения металлических нанообъектов и наноматериалов, полученных из кластеров, имеющих декаэдрическое или икосаэдрическое расположение атомов.

**2. Место дисциплины (учебного курса) в структуре ОПОП ВО**

Данная дисциплина (учебный курс) относится к ФТД.Факультативы (вариативная часть).

Дисциплины, учебные курсы, на освоении которых базируется данная дисциплина – методика постановки и проведения эксперимента, металловедение и термическая обработка металлов и сплавов, физическое материаловедение.

Дисциплины, учебные курсы, для которых необходимы знания, умения, навыки, приобретаемые в результате изучения данной дисциплины – итоговая аттестация, кандидатская диссертация.

**3. Планируемые результаты обучения по дисциплине (учебному курсу), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы**

Формируемые и контролируемые компетенции	Планируемые результаты обучения
- способностью выбирать приборы, датчики и оборудование для проведения	Знать: приборы, датчики и оборудование для проведения экспериментов и регистрации их результатов
	Уметь: выбирать приборы, датчики и оборудование для прове-

экспериментов и регистрации их результатов (ОПК-10)	дения экспериментов и регистрации их результатов
	Владеть: способностью выбирать приборы, датчики и оборудование для проведения экспериментов и регистрации их результатов
- умение на научной основе устанавливать количественную и качественную взаимосвязь химического и фазового состава, кристаллической структуры, структурного состояния и физическими, механическими, химическими и другими свойствами металлов и сплавов (ПК-1)	Знать: количественную и качественную взаимосвязь химического и фазового состава, кристаллической структуры, структурного состояния и физическими, механическими, химическими и другими свойствами металлов и сплавов
	Уметь: устанавливать количественную и качественную взаимосвязь химического и фазового состава, кристаллической структуры, структурного состояния и физическими, механическими, химическими и другими свойствами металлов и сплавов
	Владеть: Умением на научной основе устанавливать количественную и качественную взаимосвязь химического и фазового состава, кристаллической структуры, структурного состояния и физическими, механическими, химическими и другими свойствами металлов и сплавов

### Тематическое содержание дисциплины (учебного курса)

Раздел, модуль	Подраздел, тема
Кластеры, нанообъекты, наносистемы, наноизделия	Классификация кластеров и нанообъектов по размерным признакам, способам получения и природе.
	Характеристики изолированных кластеров и наносистем
	ПК HyperChem.
Методы получения нанообъектов и микроизделий из кластеров	Методы получения кластеров и наносистем
Металлические кластеры	Особенности строения, свойства, характеристики, фазовые превращения в нанообъектах
	Оптимизация структуры кластеров методом молекулярной механики
Термодинамика поверхности кластеров и нанообъектов	Энергетическая целесообразность появления и существования кластеров и нанообъектов
	Полуэмпирический расчет структуры молекулярных кластеров
Кластерные модели	Существующие модели кластеров, их классификация
	Полуэмпирический расчет характеристик молекулярных кластеров
Процессы самоорганизации и самосборки в кластерах и нанообъектах	Механизмы образования кластеров и формирования нанообъектов и наносистем
Пентагональные нанообъекты	Особенности роста при кристаллизации из кластеров нанообъектов и наносистем, роль технологических факторов

**Общая трудоемкость дисциплины (учебного курса) – 8 ЗЕТ.**

#### 4. Структура и содержание дисциплины Структура и свойства металлических кластеров, нано- и микрообъектов Курс изучения 9

Раздел, модуль	Подраздел, тема	Виды учебной работы							Необходимые материально- технические ресурсы	Формы текущего контроля	Рекоменду- емая лите- ратура (№)
		Аудиторные занятия (в часах)					Самостоятельная работа				
		всего			в т.ч. в интерак- тивной форме	Формы проведения лекций, лабораторных, практических занятий, методы обучения, реализующие применяемую образовательную технологию	в часах	формы организации самостоятельной работы			
		лекций	лабораторных	практических							
Кластеры, нанообъекты, наносистемы, наноизделия	Классификация кластеров и нанобъектов по размерным при- знакам, способам получения и при- роде.	2		2	2	Лекция-беседа Семинар	12	Самоподготовка к лабораторному заня- тию	Доска меловая, ме- диаобеспечение, специализирован- ное лабораторное оборудование		1 - 3, 8, 11, 12
	Характеристики изолированных кластеров и нано- систем			2	Семинар						
	Вводное занятие. Знакомство с ПК HyperChem.		2			Лабораторная работа					

Методы получения нанобъектов и микроизделий из кластеров	Методы получения кластеров и наносистем	2	2	2	4	Лекция-беседа Семинар-дискуссия Лабораторная работа	13	Самоподготовка к семинару	Доска меловая, медиаобеспечение, специализированное лабораторное оборудование		1, 4, 6, 8
Металлические кластеры	Особенности строение, свойства, характеристики, фазовые превращения в нанобъектах	2		2	4	Лекция-беседа Семинар-дискуссия	13	Самоподготовка к семинару	Доска меловая, медиаобеспечение, специализированное лабораторное оборудование	ЛР №1	1-12
	Оптимизация структуры кластеров методом молекулярной механики		4			Лабораторная работа – проект	18	Самоподготовка к лабораторной работе №1			
Термодинамика поверхности кластеров и нанобъектов	Энергетическая целесообразность появления и существования кластеров и нанобъектов			2		Практическое занятие	16	Самоподготовка к промежуточному тесту №1	Доска меловая, медиаобеспечение, специализированное лабораторное оборудование	Тест 1	1-12
	Полуэмпирический расчет структуры молекулярных кластеров		4		4	Лабораторная работа – проект	18	Самоподготовка к лабораторной работе №2		ЛР №2	
Кластерные модели	Существующие модели кластеров, их классификация	2		2	4	Лекция-беседа Семинар-дискуссия	13	Самоподготовка к семинару	Доска меловая, медиаобеспечение, специализированное лабораторное оборудование	ЛР №3	2, 3, 11, 12
	Полуэмпирический расчет характеристик молекулярных кластеров		4		4	Лабораторная работа – проект	18	Самоподготовка к лабораторной работе №4			

Процессы самоорганизации и самосборки в кластерах и нанобъектах	Механизмы образования кластеров и формирования нанобъектов и наносистем			2		Практическое занятие	16	Самоподготовка к промежуточному тесту №2	Доска меловая, медиаобеспечение, специализированное лабораторное оборудование	Тест 2	5, 11, 12
Пентагональные нанобъекты	Особенности роста при кристаллизации из кластеров нанобъектов и наносистем, роль технологических факторов			2	2	Семинар-дискуссия	13	Самоподготовка к семинару	Доска меловая, медиаобеспечение, специализированное лабораторное оборудование Библиотека, компьютер, интернет		1-12
							36	Самоподготовка к экзамену			
Итого:		8	16	16	24		248				
		288									

## 5. Критерии и нормы текущего контроля и промежуточной аттестации

Формы текущего контроля	Условия допуска	Критерии и нормы оценки
Защита лабораторной работы № 1.	1. Подготовлен бланк отчета ЛР в соответствии с требованиями УМП; 2. Правильно отвечает на вопросы по методике измерений, установке и обработке результатов.	Зачтено: 1. Полностью заполнен бланк отчета ЛР; 2. Экспериментальные данные согласуются с теоретическими; 3. По работе сформулированы правильные выводы; 4. Даны полные ответы на вопросы по защите ЛР; 5. Приведены решения задач (если имеются в данной работе).
Защита лабораторной работы № 2.	1. Подготовлен бланк отчета ЛР в соответствии с требованиями УМП; 2. Правильно отвечает на вопросы по методике измерений, установке и обработке результатов.	Зачтено: 1. Полностью заполнен бланк отчета ЛР; 2. Экспериментальные данные согласуются с теоретическими; 3. По работе сформулированы правильные выводы; 4. Даны полные ответы на вопросы по защите ЛР; 5. Приведены решения задач (если имеются в данной работе).
Защита лабораторной работы № 3.	1. Подготовлен бланка отчета ЛР в соответствии с требованиями УМП; 2. Правильно отвечает на вопросы по методике измерений, установке и обработке результатов.	Зачтено: 1. Полностью заполнен бланк отчета ЛР; 2. Экспериментальные данные согласуются с теоретическими; 3. По работе сформулированы правильные выводы; 4. Даны полные ответы на вопросы по защите ЛР; 5. Приведены решения задач (если имеются в данной работе).
Тестирование №1	Допускаются все студенты	Зачтено: 50 % и более верных ответов.
Тестирование №2	Допускаются все студенты	Зачтено: 50 % и более верных ответов.

Форма проведения промежуточной аттестации	Условия допуска	Критерии и нормы оценки	
Экзамен (тест)	Выполнены, защищены и сданы все 3 лабораторные работы, сданы 2 промежу- точных теста.	«отлично»	Верных ответов 80 - 100 %
		«хорошо»	Верных ответов 60 - 79 %
		«удовлетвори- тельно»	Верных ответов 40 - 59 %
		«неудовлетво- рительно»	Верных ответов 0 - 39 %

## 6. Вопросы к экзамену

№ п/п	Вопросы
1.	Понятие кластеров.
2.	Классификация по природе кластеров и нанобъектов.
3.	Особенности свойств и поведения изолированных кластеров и наносистем
4.	Металлические кластеры, их строение, свойства и структура.
5.	Кристаллическая решетка и магические числа.
6.	Геометрическая структура и размерные эффекты.
7.	Существующие модели кластеров, их недостатки и преимущества
8.	Физико-химические свойства кристаллов.
9.	Термодинамический анализ поверхности кластера и нанобъектов, их взаимосвязь, структура и морфология поверхности нанобъектов.
10.	Процессы самоорганизации в кластере и нанобъекте, механизм формирования из них наносистем
11.	Дефекты структуры и фазовые превращения в нанобъектах
12.	Влияние на процесс самоорганизации температурных и силовых полей
13.	Особенности образования, роста пентагональных нанобъектов
14.	Механизмы формирования из пентагональных кластеров нанобъектов и кристаллов
15.	Строение пентагональных нанобъектов
16.	Области применения нанобъектов и наносистем
17.	Механизмы формирования из нанобъектов готовых микроизделий
18.	Методы исследования кластеров и нанобъектов
19.	Метод электроосаждения как один из нескольких методов получения нанобъектов и наносистем
20.	Нанокотализаторы.
21.	Эмпирические методы моделирования нанобъектов.
22.	Полуэмпирические методы моделирования нанобъектов.
23.	Неэмпирические методы моделирования нанобъектов.
24.	Приближение Борна-Оппенгеймера.
25.	Метод Хартри-Фока.
26.	Атомные орбитали.
27.	Теория функционала плотности.
28.	Теория возмущения.
29.	Метод валентных схем.
30.	Метод молекулярных орбиталей.
31.	Понятие нанобъектов.
32.	Понятие наночастиц.
33.	Понятие нанокристаллов.
34.	Классификация по способам получения кластеров и нанобъектов.
35.	Процессы самоорганизации и самосборки в кластерах и нанобъектах.
36.	Понятие наноматериалов.
37.	Понятие наносистем.
38.	Классификация по геометрическим признакам кластеров и нанобъектов.
39.	Понятие наноизделий.
40.	Особенности роста при кристаллизации из кластеров нанобъектов и наносистем, роль технологических факторов.
41.	Энергетический анализ поверхности кластера и нанобъектов, их взаимосвязь,

	структура и морфология поверхности нанообъектов.
42.	Механизмы образования кластеров и формирования нанообъектов и наносистем.
43.	Пентагональные нанообъекты.
44.	Полуэмпирический расчет характеристик молекулярных кластеров.
45.	Существующие модели кластеров, их классификация.
46.	Кластерные модели.
47.	Характеристики изолированных кластеров и наносистем.
48.	Метод газофазного синтеза.
49.	Уравнение Томсона-Гиббса.
50.	Теорема Купманса.

## 7. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине

### 7.1. Паспорт фонда оценочных средств

№ п/п	Контролируемые разделы (темы) дисциплины	Код контролируемой компетенции (или ее части)	Наименование оценочного средства
1	Классификация кластеров и нанообъектов по размерным признакам, способам получения и природе.	ПК-1,	Тест
2	Характеристики изолированных кластеров и наносистем	ПК-1,	Разноуровневые задачи и задания
3	ПК HyperChem.	ПК-1,	Проект
4	Методы получения кластеров и наносистем	ПК-1, ОПК-10	Круглый стол
5	Особенности строения, свойства, характеристики, фазовые превращения в нанообъектах	ПК-1, ОПК-10	Круглый стол
6	Оптимизация структуры кластеров методом молекулярной механики	ПК-1, ОПК-10	Проект
7	Энергетическая целесообразность появления и существования кластеров и нанообъектов	ПК-1, ОПК-10	Разноуровневые задачи и задания
8	Полуэмпирический расчет структуры молекулярных кластеров	ПК-1, ОПК-10	Проект
9	Существующие модели кластеров, их классификация	ПК-1,	Круглый стол

10	Полуэмпирический расчет характеристик молекулярных кластеров	ПК-1, ОПК-10	Проект
11	Механизмы образования кластеров и формирования нанообъектов и наносистем	ПК-1, ОПК-10	Разноуровневые задачи и задания
12	Особенности роста при кристаллизации из кластеров нанообъектов и наносистем, роль технологических факторов	ПК-1, ОПК-10	Круглый стол

## 7.2. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы

### 7.2.1. Проект

#### Тема:

Моделирование кластеров и нанообъектов

#### Задачи:

- Овладение навыками моделирования в ПК HyperChem

#### Структура:

- Оптимизация структуры кластеров методом молекулярной механики;
- Полуэмпирический расчет структуры молекулярных кластеров;
- Полуэмпирический расчет характеристик молекулярных кластеров

#### Индивидуальные задания:

- Тетраэдр меди  $\text{Cu}_4$ ;
- Октаэдр меди  $\text{Cu}_6$ ;
- Декаэдрический кластер серебра  $\text{Ag}_7$ ;
- Икосаэдрический кластер серебра  $\text{Ag}_{13}$ ;
- Додекаэдрический кластер серебра  $\text{Ag}_{20}$ ;
- Серебряный усеченный декаэдрический кластер  $\text{Ag}_{13}$ ;
- Фуллерен  $\text{C}_{20}$ ;
- Фуллерен  $\text{C}_{24}$ ;
- Фуллерен  $\text{C}_{28}$ ;
- Металлокарбогедрен  $\text{Ti}_8\text{C}_{12}$  (симметрия  $T_h$ ).

#### Критерии оценки:

- оценка «зачтено» выставляется студенту, если .....;
- 1. Полностью заполнен бланк отчета ЛР;
- 2. Экспериментальные данные согласуются с теоретическими;

3. По работе сформулированы правильные выводы;
  4. Даны полные ответы на вопросы по защите ЛР;
  5. Приведены решения задач (если имеются в данной работе).
- оценка «не зачтено» при не выполнении любого из пяти критериев оценки "зачтено"

### **7.2.2. Комплект типовых разноуровневых задач для практических занятий**

#### *Тема № 1 «Критические размеры малых частиц»*

##### *Задачи:*

1.1. Методом испарения и конденсации в атмосфере инертного газа получены сферические наночастицы серебра, имеющие диаметр 15 нм. Определите долю поверхностного слоя от общего объема, толщину поверхностного слоя принять равной четырем атомным монослоям ( $t = 0.4$  нм). Оцените погрешность вычисления при использовании приближенного выражения.

1.2. Определите предельный размер, при котором малые частицы золота ( $\epsilon_F$  5.51 эВ) все еще проявляют металлические свойства.

1.3. Гидрогенизация этилена при температуре 520 К и давлении водорода 1 атм с использованием в качестве катализатора платины ( $\epsilon_F = 7.6$  эВ,  $d = 0.4$  нм) осажденной на  $\text{SiO}_2$  или  $\text{Al}_2\text{O}_3$  идет особенно интенсивно, когда расстояние между энергетическими уровнями становится больше 2 эВ. Оцените размер частиц платины.

1.4. В реакции гидрирования бензола с использованием в качестве катализатора полученных разложением металлоорганических комплексов наночастиц никеля на подложке  $\text{SiO}_2$  с уменьшением размера металлических частиц наблюдается увеличение удельной каталитической активности, т.е. активности отнесенной к одному поверхностному атому металла. При температуре 373 К и давления бензола  $\text{C}_6\text{H}_6$  и водорода  $\text{H}_2$  соответственно 6700 и 46700 Па резкий рост удельной каталитической активности наночастиц никеля в 3-4 раза происходит когда отношение числа поверхностных атомов к общему числу атомов близко к 1. Оцените размеры таких наночастиц никеля.

1.5. Методом газофазного синтеза получен медный нанокристаллический порошок, причем средний геометрический диаметр частиц 35 нм. Распределение частиц по размерам является логарифмически нормальным с дисперсией 1.5. Определите 1) нормировочный коэффициент распределения; 2) наиболее вероятный размер части; 3) средний размер частиц; 4) среднеквадратичный размер частиц; 5) долю частиц размеров 20-40 нм; 6) постройте график распределения в координатах  $d$  и  $\ln d$ .

#### *Тема № 2 «Температура плавления малых частиц»*

##### *Задачи:*

2.1. Рассчитайте общее число атомов икосаэдрического кластера, содержащего  $N$  атомных слоев. Расчеты приведите для первых 5 слоев.

2.2. Постройте кривую изменения температуры плавления олова от размера для следующих параметров:

$$\rho_s = 7.18 \cdot 10^3 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}, \quad \rho_l = 6.98 \cdot 10^3 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3},$$

$$\sigma_l = 0.58 \frac{\text{Н}}{\text{м}}, \quad \sigma_{sl} = 0.0622 \frac{\text{Н}}{\text{м}}, \quad Q = 58.5 \frac{\text{кДж}}{\text{кг}}, \quad \delta = 3.2 \text{ нм}, \quad T_{\text{melt}} = 505 \text{ К}.$$

2.3. Постройте графики зависимости температур плавления наночастиц алюминия, меди, никеля и титана от их обратного радиуса. По коэффициенту  $\alpha$  определите для каждого металла, какая формула для этого наиболее приемлема. Все необходимые параметры приведены в таблице.

Металл	$T_{\text{melt}},$ К	$Q,$ Дж·моль <sup>-1</sup>	$\sigma_s,$ Дж·м <sup>-2</sup>	$\rho_s \cdot 10^{-5},$ моль·м <sup>-3</sup>	$\sigma_{sl},$ Дж·м <sup>-2</sup>	$\rho_l \cdot 10^{-5},$ моль·м <sup>-3</sup>	$\alpha \cdot 10^{10},$ м
Al	934	10700	1.032	0.926	0.865	0.894	4.43
Cu	1358	13050	1.592	1.320	1.310	1.250	4.07
Ni	1728	17470	2.104	1.400	1.750	1.350	3.82
Ti	1943	14150	1.797	0.910	1.500	0.868	5.80

2.4. Разложите в ряд Тейлора химический потенциал вида  $\mu(p + \Delta p + \frac{2\sigma}{r}, T + \Delta T)$  ограничившись первыми (1, 2 и 3) малыми слагаемыми.

### Тема № 3 «Параметр решетки малых частиц»

Задачи:

3.1. Полагая, что уменьшение параметров решетки наночастиц серебра и золота является следствием избыточного давления Лапласа определите

$$\frac{\Delta a}{a} = f(r)$$

зависимость  $\frac{\Delta a}{a}$  от  $r$ .

3.2. Определить, используя уравнение Томсона-Гиббса, давление насыщенного пара над жидкой каплей (золота и серебра) имеющей радиус  $r$ .

3.3. Отклонение параметра решетки нанокристаллического алюминия, определяется избыточным объемом границ зерен, средней шириной гра-

$$\frac{\bar{a}}{a_0} = f(d)$$

ниц зерен и средним диаметром зерен. Постройте зависимость  $\frac{\bar{a}}{a_0}$  от  $d$ .

3.4. Оцените толщину тонкого слоя вблизи границы зерна, в котором может наблюдаться расширение кристаллической решетки.

### Тема № 4 «Уравнение Шрёдингера»

*Задачи:*

4.1. Рассмотрите свободное одномерное движение частицы, т.е. частица находится в поле с постоянным потенциалом и ее потенциальная энергия равна нулю.

4.2. Рассмотрите движение частицы в яме с бесконечно высокими стенками.

4.3. Рассмотрите одномерное движение частицы по оси  $x$  под воздействием упругой возвращающей силы  $F = -kx$ , где  $k$  – силовая постоянная. Такая система называется линейным гармоническим осциллятором.

4.4. Определите уровни энергии для частицы, движущейся в поле с потенциальной энергией  $U(x) = A(e^{-2\alpha x} - 2e^{-\alpha x})$ .

4.5. Определите уровни энергии для частицы, движущейся в поле с потенциальной энергией  $U(x) = -\frac{U_0}{\text{ch}^2 \alpha x}$ .

*Тема № 5 «Расчет молекул»*

*Задачи:*

5.1. Определите, какой из полуэмпирических методов наиболее точно оценивает для указанных молекул потенциал ионизации ( $I$ ), энергию сродства к электрону ( $A$ ), равновесное межатомное расстояние ( $r_e$ ) и энергию диссоциации ( $D_0$ ). Результаты оформите в виде таблиц. Задачу решить для следующих вариантов двухатомных молекул: а)  $\text{H}_2$ ; б)  $\text{Li}_2$ ; в)  $\text{C}_2$ ; г)  $\text{N}_2$ ; д)  $\text{O}_2$ ; е)  $\text{F}_2$ ; ж)  $\text{P}_2$ ; з)  $\text{S}_2$ ; и)  $\text{Cl}_2$ .

Молекула	$\text{H}_2$	$\text{Li}_2$	$\text{C}_2$	$\text{N}_2$	$\text{O}_2$	$\text{F}_2$	$\text{P}_2$	$\text{S}_2$	$\text{Cl}_2$
$I$ , эВ	15.2	5.1	12.4	15.6	12.1	15.7	11.1	9.4	11.5
$A$ , эВ	-	0.45	3.27	-	0.45	3.08	0.59	1.67	2.38
$r_e$ , Å	0.74	2.67	1.24	1.10	1.21	1.41	1.89	1.89	1.99
$D_0$ , ккал/моль	103	24	143	225	118	37	116	101	57

5.2. Используя теорему Купманса, рассчитайте методом AM1 потенциалы ионизации ( $I$ ) двухатомных молекул. Сравните полученные значения с экспериментальными данными и с результатами неэмпирических расчетов в базисе 6-31G.

Молекула	$\text{C}_2$	$\text{N}_2$	$\text{O}_2$	$\text{F}_2$	$\text{Al}_2$	$\text{Si}_2$	$\text{P}_2$	$\text{S}_2$	$\text{Cl}_2$
$I$ , эВ	12.4	15.6	12.1	15.7	6.21	8.0	11.1	9.4	11.5

5.3. В каком фуллерене (4, 6, 8, 20, 60, 80) полуторная связь C-C наиболее прочная? Расчет энергии выполнять без оптимизации геометрии, используя полуэмпирический метод CNDO. Данные по молекулам фуллерена прочитать из имеющихся файлов \*.hin.

5.4. Определите величину дипольного момента молекул, сравните полученные значения с экспериментальными данными. Как и почему изменяется сверху вниз по группе точность расчетов?

Молекула	$\text{NH}_3$	$\text{PH}_3$	$\text{AsH}_3$	$\text{H}_2\text{O}$	$\text{H}_2\text{S}$	$\text{H}_2\text{Se}$
----------	---------------	---------------	----------------	----------------------	----------------------	-----------------------

$\mu, D$	1.48	0.89	0.18	1.87	1.17	0.24
----------	------	------	------	------	------	------

5.5. Рассчитайте частоту валентных колебаний в частицах, сравните полученные значения с данными эксперимента. В какой частице связь наиболее прочная?

Частица	$O_2^+$	$O_2$	$O_2^-$	$O_2^{2-}$	$NO^+$	$NO$	$NO^-$	$NO^{2-}$
$\nu, \text{см}^{-1}$	1865	1580	1097	766	2273	1880	1365	886
Частица	HF	HCl	HBr	HI	F <sub>2</sub>	Cl <sub>2</sub>	Br <sub>2</sub>	I <sub>2</sub>
$\nu, \text{см}^{-1}$	4139	2991	2649	2310	892	546	319	215

5.6. Рассчитайте ширину энергетической щели ( $E_{gap}$ ) в полициклических конденсированных ароматических молекулах, которые имеют следующий состав:  $C_6H_6$ ,  $C_{18}H_{12}$ ,  $C_{24}H_{12}$ ,  $C_{42}H_{18}$ ,  $C_{54}H_{18}$ ,  $C_{84}H_{24}$ ,  $C_{96}H_{24}$ . Расчет энергии выполняйте без оптимизации геометрии, используя метод CNDO (почему?). Данные по молекулам считайте из имеющихся файлов \*.hin.

### Тема № 6 «Возмущение не зависящее от времени»

#### Задачи:

6.1. Определите поправку второго приближения  $\psi_n^{(2)}$  к собственным функциям.

6.2. Определите поправку третьего приближения к собственным значениям энергии.

6.3. Определите уровни энергии ангармонического линейного осциллятора с гамильтонианом

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} + \alpha x^3 + \beta x^4$$

6.4. Сферическая потенциальная яма с бесконечно высокими стенками подвергается малой деформации (без изменения объема), принимая форму слабо вытянутого или сплюснутого эллипсоида вращения с полуосями  $a = b$  и  $c$ . Найти расщепление уровней энергии частицы в яме при такой деформации.

### Тема № 7 «Секулярное уравнение. Возмущение зависящее от времени»

#### Задачи:

7.1. Определите поправки первого приближения к собственному значению и правильные функции нулевого приближения для двукратно вырожденного уровня.

7.2. Выведите формулу для поправок первого приближения к собственным функциям.

7.3. Выведите формулу для поправок второго приближения для собственных значений.

7.4. В начальный момент времени  $t = 0$  система находится в состоянии  $\psi_1^{(0)}$ , относящемся к двукратно вырожденному уровню. Определите ве-

роятность того, что в дальнейший момент времени  $t$  система будет находиться в другом состоянии  $\psi_2^{(0)}$  той же энергии; переход происходит под влиянием постоянного возмущения.

7.5. Определите изменение  $n$ -го и  $m$ -го решений уравнения Шредингера при наличии периодического возмущения вида  $\hat{V} = \hat{F}e^{-i\omega t} + \hat{G}e^{i\omega t}$ , с частотой  $\omega$  такой, что  $E_m^{(0)} - E_n^{(0)} = \hbar(\omega + \varepsilon)$ , где  $\varepsilon$  – малая величина.  $\hat{F}$  и  $\hat{G}$  – операторы, не зависящие от времени.

### Критерии оценки:

- оценка «зачтено» ставится за правильное и полное решение задачи, допускаются небольшие погрешности в изложении и вычислениях.
- оценка «не зачтено» ставится студенту не выполнившему требования к оценке "зачтено"

### 7.2.3. Перечень дискуссионных тем для круглого стола (дискуссии, полемики, диспута, дебатов)

#### 1. Методы получения кластеров и наночастиц

- Золь-гель метод;
- Синтез в мицеллах и обратных мицеллах;
- Золь метод;
- Гидротермальный метод;
- Сольвотермический метод;
- Направленное окисление;
- Химическое осаждение;
- Физическое осаждение;
- Электроосаждение;
- Сонохимический метод;
- Микроволновый метод;

#### 2. Методы исследования кластеров и наночастиц.

- Просвечивающая электронная микроскопия;
- Растровая электронная микроскопия;
- Рентгенография;
- Электронография;
- Нейтронография;
- Лазерная дифракция;
- Неупругое рассеяние света;
- УФ/Вид спектроскопия;
- Рамановская спектроскопия;
- Атомно-силовая микроскопия;
- Туннельная микроскопия.

#### 3. Моделировании атомных систем и процессов

- Метод классических (эмпирических) потенциалов;
- Полуэмпирический подход;

- Неэмпирический подход (моделирование из первых принципов);
  - Метод Монте-Карло.
4. Пакеты для моделирования нанообъектов
- HyperChem;
  - Gaussian;
  - GAMESS;
  - StoBe;
  - Кластер.

### Критерии оценки:

- оценка «зачтено» выставляется студенту, если он принимает активное участие на семинаре: выступает со своей темой или участвует в дискуссии минимум по 3 темам
- оценка «не зачтено» ставится студенту, не выполнившему требования к оценке "зачтено"

### 7.2.4. Комплект тестовых заданий

#### *Типовое тестовое задание №1*

1. Общая доля поверхностей раздела в наноматериалах составляет:

☐  $V_{n.p.} = 1 + \left[ \frac{L-s}{L} \right]^3;$

☐  $V_{n.p.} = 1 - \left[ \frac{L-s}{L} \right]^2;$

☐  $V_{n.p.} \sim \frac{3s}{L};$

☐  $V_{n.p.} = 1 - \left[ \frac{L-s}{L} \right]^3;$

☐  $V_{n.p.} = 1 + \left[ \frac{L-s}{L^3} \right]^{\frac{1}{2}}.$

2. Фриделевские осцилляции передаются решетке через:

- ☐ электрон-фононное взаимодействие;
- ☐ фотон-электронное взаимодействие;
- ☐ электрон-фотонное взаимодействие;
- ☐ электрон-электронное взаимодействие;
- ☐ фонон-фотонное взаимодействие.

3. Размерный эффект параметра решетки наночастицы связан с:

- ☐ ошибками методики измерения;
- ☐ адсорбцией примесей;
- ☐ температурой плавления;
- ☐ структурными превращениями;
- ☐ структурой дислокаций.

4. Особенности магнитных свойств наночастиц связаны с:

- ☐ изменением вида фононного спектра;
- ☐ дискретностью электронных состояний;
- ☐ изменением границ фононного спектра;
- ☐ дискретностью фононных состояний;
- ☐ все перечисленное.

5. Для двумерной системы типа малых островков на подложке уравнение Томсона-Гиббса имеет вид:

- ☐  $p = \frac{4\sigma}{r^3};$
- ☐  $p(r) = \frac{2\sigma}{r};$
- ☐  $p(r) = p_{\infty} e^{\frac{v}{RT} \frac{2\sigma}{r}};$
- ☐  $p(r) = p_{\infty} e^{\frac{1}{RT} \frac{\gamma}{r \rho_s}};$
- ☐  $p(r) = \frac{v_1}{v_2 - v_1} \frac{2\sigma}{r}.$

6. Основная причина изменения термодинамических характеристик нанокристаллов по сравнению с массивными материалами:

- ☐ большое число поверхностных атомов;
- ☐ изменение вида фононного спектра;
- ☐ дискретность электронных состояний;
- ☐ изменение границ фононного спектра;
- ☐ все перечисленное.

7. В наноматериалах по химическому составу и распределению фаз можно выделить структуры типа:

- ☐ коллоидные;
- ☐ матричные многофазные;
- ☐ статистические многофазные с неидентичными поверхностями раздела;
- ☐ однофазные;
- ☐ статистические многофазные с идентичными поверхностями раздела.

8. Размерный эффект температуры плавления малых частиц при уменьшении их размера в общем виде описывается выражением:

☐  $T_m(r) = T_m \left( 1 - \frac{\alpha}{r} \right);$

☐  $T_m(r) = T_m \left( 1 + \frac{\alpha}{r} \right);$

☐  $T_m(r) = \frac{T_m}{r};$

☐  $T_m(r) = T_m \left( 1 + \frac{\alpha}{r^2} \right);$

☐  $T_m(r) = \frac{1}{4\pi} \frac{T_m}{r^3}.$

9. Фриделевские осцилляции плотности вырожденного электронного газа вызываются:

- ☐ избыточным объемом;
- ☐ любыми дефектами, нарушающими трансляционную симметрию кристалла;
- ☐ экситонами;
- ☐ неравновесными вакансиями;
- ☐ давлением Лапласа.

10. Характерный размер петли Франка-Рида:

☐  $l_{\text{ФР}} = \frac{Gb^2}{\tau_{\text{кр}}};$

☐  $l_{\Phi P} = \frac{Gb}{2\tau_{ПН}};$

☐  $l_{\Phi P} = \frac{aGb}{\tau_{ПН}};$

☐  $l_{\Phi P} = \frac{G^3b}{\tau_{кр}};$

☐  $l_{\Phi P} = \frac{Gb}{\tau_{кр}}.$

11. Размер структурных составляющих наноматериалов определяют электронно-микроскопическими методами с помощью:

- ☐ светлопольных изображений;
- ☐ темнопольных изображений;
- ☐ рентгено-спектрального микроанализа;
- ☐ дилатометра;
- ☐ изображений прямого разрешения.

12. Давление Лапласа определяется формулой:

☐  $p = \frac{2\pi\sigma}{r};$

☐  $p = \frac{2\sigma^2}{r};$

☐  $p = \frac{2\sigma}{r};$

☐  $p = \frac{4\sigma}{r^3};$

☐  $p = \frac{2\sigma}{r^2}.$

13. Доля собственно межзеренных границ раздела в наноматериалах составляет:

☐  $V_{м.г.} = 1 + \left[ \frac{L-s}{L^3} \right]^{\frac{1}{2}};$

- ☐  $V_{м.з.} \sim \frac{3s}{L};$
- ☐  $V_{м.з.} = \frac{3s(L-s)^2}{L^3};$
- ☐  $V_{м.з.} = 1 - \left[ \frac{L-s}{L} \right]^3;$
- ☐  $V_{м.з.} = \frac{3\pi s(L-s)^2}{L^3}.$

14. Энергия, оказывающая разупорядочивающее действие на магнитные моменты ферромагнитной частицы, равна:

- ☐  $\Delta\varepsilon_0 = \frac{m_0 V^2}{2};$
- ☐  $\Delta\varepsilon_0 \approx \frac{\hbar^2}{2m_e \delta_0^2};$
- ☐  $\Delta\varepsilon_0 = \frac{\Delta p^2}{2m_e};$
- ☐  $\Delta\varepsilon_0 = \hbar \Delta \omega_0;$
- ☐  $\Delta\varepsilon_0 = h\nu.$

15. При поглощении света тонкозернистыми пленками металлов:

- ☐ происходит полное поглощение;
- ☐ происходит сильный нагрев пленок;
- ☐ видимая часть спектра полностью поглощается;
- ☐ инфракрасная часть спектра полностью поглощается;
- ☐ в видимой части спектра появляются пики поглощения, отсутствующие у массивных металлов.

16. В наноматериалах по форме можно выделить структуры типа:

- ☐ однофазная;
- ☐ пластинчатая;
- ☐ матричная многофазная;
- ☐ столбчатая;

- ☐ содержащая равноосные включения.

17. При каких размерах типичный ферромагнетик перейдет в суперпарамагнитное состояние:

- ☐ около 1 мкм;
- ☐ менее 1-10 нм;
- ☐ более 100 нм;
- ☐ около 100 нм;
- ☐ более 1-10 нм.

18. При моделировании структуры малоатомных кластеров необходимо учитывать:

- ☐ кластеры должны иметь избыточную энергию;
- ☐ кластеры должны быть энергетически устойчивы;
- ☐ кластеры должны иметь плотную упаковку;
- ☐ кластеры должны быть построены из простейших стабильных атомных конфигураций;
- ☐ кластеры должны состоять из четного числа атомов.

19. При какой температуре типичный ферромагнетик перейдет в суперпарамагнитное состояние:

- ☐  $T_b = 1273^{\circ}\text{C}$  ;

- ☐  $T_b = \frac{KV}{k \ln \frac{\tau_m}{\tau_0}}$  ;

- ☐  $T_b = \frac{KV}{2m_e}$  ;

- ☐  $T_b = 1000\text{K}$  ;

- ☐  $T_b = \frac{\hbar \omega}{k}$  .

20. Теплоемкость малой частицы определяется формулой:

- ☐  $C_V = 3R$  ;

- ☐  $C_V = \int_{\omega_{\min}}^{\omega_{\max}} \frac{\partial \varepsilon(\omega, T)}{\partial T} g(\omega) d\omega;$
- ☐  $C_V = \int_{\omega_{\min}}^{\omega_{\max}} g(\omega) d\omega;$
- ☐  $C_V = 9R \left( \frac{T}{\theta_D} \right)^3 \int_0^{\theta_D/T} \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} dx;$
- ☐  $C_V = \frac{1}{3} R.$

### *Типовое тестовое задание №2*

1. Какой из перечисленных операторов, действующих в линейном пространстве комплексных функций одной переменной, является линейным?

- ☐ комплексного сопряжения;
- ☐ вычисления действительной части;
- ☐ возведения в квадрат по модулю;
- ☐ никакой из перечисленных.

2. Для любого эрмитового оператора  $\hat{A}$ , действующего в некотором линейном пространстве, можно выбрать такой базис, в котором матрица оператора  $\hat{A}$  является:

- ☐ единичной;
- ☐ нулевой;
- ☐ антисимметричной;
- ☐ диагональной.

3. Собственные значения любого эрмитового оператора

- ☐ положительны;
- ☐ отрицательны;
- ☐ вещественны;
- ☐ чисто мнимы.

4. Какая из четырех матриц является матрицей эрмитового оператора?

☐  $\begin{pmatrix} 1 & i \\ i & 2 \end{pmatrix};$

☐  $\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 2-i \end{pmatrix};$

☐  $\begin{pmatrix} 1 & i \\ -i & 2 \end{pmatrix};$

☐  $\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{pmatrix}.$

5. Чему равен оператор  $(\hat{A}\hat{B})^\dagger$

☐  $\hat{A}^\dagger \hat{B}^\dagger;$

☐  $\hat{A}^\dagger + \hat{B}^\dagger;$

☐  $\hat{A}^\dagger - \hat{B}^\dagger;$

☐  $\hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger.$

6. В некотором линейном пространстве выбран ортонормированный базис  $\{f_i\}$ . Какой формулой определяются матричные элементы матрицы некоторого линейного оператора  $\hat{A}$ , действующего в этом пространстве?

☐  $a_{kn} = (f_k \hat{A} f_n);$

☐  $a_{kn} = (f_k \hat{A}^\dagger f_n)^*;$

☐  $a_{kn} = (\hat{A} f_k f_n);$

☐  $a_{kn} = (\hat{A}^\dagger f_k f_n)^*.$

7. Система находится в состоянии с нормированной волновой функцией  $\Psi(x, t)$ . Разложение этой функции по нормированным собственным функциям  $f_n(x)$  оператора физической величины  $\hat{A}$ , обладающего дискретным спектром собственных значений  $a_n$ , имеет вид:  $\Psi(x, t) = \sum C_n(t) f_n(x)$ . Пусть каждому собственному значению  $a_n$  отвечает единственная собственная

функция  $f_n(x)$ . Чему равна вероятность того, что в момент времени  $t$  величина  $A$  имеет значение, равное  $a_n$ ?

- ☐  $C_n(t)$ ;
- ☐  $|C_n(t)|$ ;
- ☐  $|C_n(t)|^2$ ;
- ☐  $\text{Re}(C_n(t))$ .

8. Квантовая система описывается нормированной волновой функцией  $\Psi(x, t)$ . Физической величине  $A$  отвечает оператор  $\hat{A}$ . По какой формуле из нижеследующих формул можно вычислить среднее значение результатов многих измерений величины  $A$  над ансамблем таких квантовых систем?

- ☐  $\int \Psi^*(x, t) \hat{A} \Psi(x, t) dx$ ;
- ☐  $\int \hat{A} |\Psi(x, t)|^2 dx$ ;
- ☐  $\int |\Psi(x, t)|^2 \hat{A} dx$ ;
- ☐  $\hat{A} \int |\Psi(x, t)|^2 dx$ .

9. Физическая величина  $A$  имеет в состоянии с волновой функцией  $\Psi(x, t)$  определенное значение, если

- ☐  $\Psi$  не зависит от времени;
- ☐  $\Psi(x, t)$  совпадает с одной из собственных функций оператора этой физической величины;
- ☐  $\Psi(x, t)$  является собственной функцией оператора Гамильтона системы;
- ☐  $\Psi$  не зависит от координат.

10. Действие оператора проекции импульса  $\hat{p}_x$  на произвольную функцию  $\Psi(x)$  в координатном представлении определяется соотношением:

- ☐  $\hat{p}_x \Psi = p_x \Psi$ ;

☐  $\hat{p}_x \Psi = -\hbar^2 \frac{d^2 \Psi}{dx^2};$

☐  $\hat{p}_x \Psi = -i\hbar \frac{d\Psi}{dx};$

☐  $\hat{p}_x \Psi = i\hbar \frac{d\Psi}{dp_x}.$

11. Частица находится в состоянии с нормированной волновой функцией  $\psi(x)$ . Какой формулой определяется средняя координата частицы в этом состоянии?

☐  $\bar{x} = \int x |\psi(x)| dx;$

☐  $\bar{x} = \int x |\psi(x)|^2 dx;$

☐  $\bar{x} = \int |\psi(x)| dx;$

☐  $\bar{x} = \int |\psi(x)|^2 dx.$

12. Оператор координаты  $\hat{x}$  в импульсном представлении – это:

☐  $-i\hbar \frac{\partial}{\partial p_x};$

☐ оператор умножения на координату  $x$ ;

☐ оператор умножения на импульс  $p_x$ ;

☐  $i\hbar \frac{\partial}{\partial p_x}.$

13. Частица находится во внешнем поле  $U(\vec{r}, t)$ . Какой из приведенных формул определяется оператор Гамильтона частицы  $\hat{H}$ ?

☐  $\hat{H} = -\frac{i\hbar}{m} \nabla;$

☐  $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta;$

☐  $\hat{H} = U(\vec{r}, t);$

☐  $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(\vec{r}, t).$

14. Дана волновая функция некоторого состояния частицы в импульсном представлении  $C(p, t)$ . По какой из нижеперечисленных формул можно найти волновую функцию этого состояния в координатном представлении  $\Psi(x, t)$ ?

☐  $\Psi(x, t) = C(x, t);$

☐  $\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int C(x, t) e^{-i\frac{px}{\hbar}} dp;$

☐  $\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int C(x, t) e^{i\frac{px}{\hbar}} dp;$

☐  $\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int C(x, t) \sin \frac{px}{\hbar} dp.$

15. Теория возмущений позволяет вычислить:

- ☐ оператор возмущения, если известно классическое выражение для возмущающего систему потенциала;
- ☐ поправки к энергиям стационарных состояний непрерывного спектра;
- ☐ поправки к энергиям стационарных состояний дискретного спектра;
- ☐ поправки к волновым функциям стационарных состояний дискретного спектра.

16. На частицу с зарядом  $e$  накладывается однородное электрическое поле с напряженностью  $E$ , направленное вдоль оси  $z$ . Каким является оператор возмущения?

☐  $\hat{V} = -eEr \sin \varphi;$

☐  $\hat{V} = -eEr \sin \vartheta;$

☐  $\hat{V} = -eEr \cos \varphi;$

☐  $\hat{V} = -eEr \cos \vartheta.$

17. Уровни энергии  $\varepsilon_i$  некоторой квантовой системы не вырождены. На систему накладывается возмущение  $\hat{V}$ , матричные элементы оператора кото-

рого с невозмущенными собственными функциями  $V_{ik}$  известны. Какой формулой определяется поправка первого порядка к энергии  $i$ -го стационарного состояния?

☐  $\Delta E_i^{(1)} = \frac{1}{2}(V_{i,i+1} + V_{i-1,i});$

☐  $\Delta E_i^{(1)} = \sum_k V_{ik};$

☐  $\Delta E_i^{(1)} = V_{ii};$

☐  $\Delta E_i^{(1)} = \sum_k V_{ki}.$

18. Какая из двух формул  $\Delta E_i^{(2)} = \sum_{k(k \neq i)} \frac{|V_{ik}|^2}{\mathcal{E}_i - \mathcal{E}_k}$  или  $\Delta E_i^{(2)} = \sum_{k(k \neq i)} \frac{|V_{ik}|^2}{\mathcal{E}_k - \mathcal{E}_i}$  для

поправки к энергии  $i$ -го стационарного состояния правильна?

☐ первая;

☐ вторая;

☐ обе, поскольку приводят к одинаковому результату;

☐ зависит от невозмущенной системы.

19. На некоторую квантовую систему накладывают малое возмущение  $\hat{V}$ , причем известно, что диагональный матричный элемент оператора возмущения с невозмущенными функциями основного состояния равен нулю. Увеличится или уменьшится при этом энергия основного состояния системы?

☐ увеличится;

☐ уменьшится;

☐ не изменится;

☐ мало информации для ответа.

20. На одномерную квантовую систему, собственные значения  $\mathcal{E}_i$  и собственные функции  $\varphi_i(x)$  оператора Гамильтона которой известны, накладывают возмущение  $\hat{V}(x)$ . Какой формулой определяются матричные элементы оператора возмущения?

$$\square V_{ik} = \frac{\int \varphi_i^*(x) \hat{V} \varphi_k(x) dx}{\varepsilon_i - \varepsilon_k};$$

$$\square V_{ik} = \int \varphi_i^*(x) \hat{V} \varphi_k(x) dx;$$

$$\square V_{ik} = \varphi_i^*(x) \hat{V} \varphi_k(x);$$

$$\square V_{ik} = \frac{\varphi_i^*(x) \hat{V} \varphi_k(x)}{\varepsilon_i - \varepsilon_k}.$$

### Критерии оценки:

- оценка «зачтено» выставляется при 50 % и более верных ответов.
- оценка «не зачтено» выставляется при наличии менее 50 % верных ответов.

## 8. Образовательные технологии и методические указания по освоению дисциплины (учебного курса)

При обучении студентов используются следующие образовательные технологии:

Технология развития критического мышления – организация учебного процесса, при котором студенты проверяют, анализируют, развивают, применяют полученную информацию с целью развития когнитивных умений и навыков

Информационные технологии – специальные способы, программные и технические средства для работы с информацией

Технология проблемного обучения – организация активной, самостоятельной деятельности студентов по разрешению ситуаций, требующих творческого овладения знаниями, умениями, навыками, развитие мыслительных способностей

Интерактивные технологии – способы активизации деятельности субъектов в процессе взаимодействия в группах, соревнования между группами.

### 8.1. Методические указания по подготовке к аудиторным занятиям

Аудиторная форма изучения дисциплины предполагает лекционные и практические занятия, а также лабораторный практикум.

Лекционные занятия проводятся в соответствии с утвержденной рабочей программой дисциплины. В процессе обучения используются как традиционные приемы преподавания, так и инновационные педагогические технологии.

Посещение лекционных занятий и последующее усвоение полученных в ходе лекции знаний является обязательным условием успешной подготовки к практическим и лабораторным занятиям.

Практические занятия представляют собой вид учебных занятий, в ходе которых студенты, закрепляют на практике полученные теоретические знания. Так же предполагается проведение проверочной работы в форме теста.

Лабораторный практикум заключается в знакомстве с современными методиками моделирования наноразмерных объектов неэмпирическими, полумэмпирическими методами и методами молекулярной динамики.

## **8.2. Методические указания к самостоятельной работе**

Самостоятельная работа проводится в соответствии с утвержденной рабочей программой дисциплины с учетом времени, предусмотренного на самостоятельное изучение.

Самостоятельная работа включает в себя работу с учебниками, учебными пособиями, интернет-ресурсами и т. д.

Конкретная форма самостоятельной работы выбирается студентом самостоятельно с учетом индивидуальных особенностей и целей познания.

## **8.3. Формы контроля знаний**

Контроль знаний студентов по изученной дисциплине предполагает проведение текущего, промежуточного и итогового контроля.

Текущий контроль осуществляется в форме выборочной проверки конспекта лекций, контроля за самостоятельной работой студентов на практике.

Важное значение в процессе осуществления текущего контроля имеет работа преподавателя со студентами в форме консультирования.

Промежуточный контроль осуществляется в форме теста на практическом занятии.

Итоговый контроль проводится на экзамене в форме теста. Экзамен проводится для контроля знаний, полученных в процессе изучения дисциплины в полном объеме.

При подготовке к экзамену целесообразно ознакомиться с перечнем вопросов, в случае возникновения спорных моментов обсудить их с преподавателем.

Подготовка к экзамену должна проводиться систематически, в течение всего учебного года. В процессе подготовки следует использовать материалы лекционного курса, справочную, учебную литературу и монографии.

## 9. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины (учебного курса)

### 9.1. Обязательная литература

№ п/п	Библиографическое описание	Тип (учебник, учебное пособие, учебно-методическое пособие, практикум, др.)	Количество в библиотеке
1.	Мишина, Е. Д. Методы получения и исследования наноматериалов и наноструктур. Лабораторный практикум по нанотехнологиям : учебное пособие : учебное пособие / Е. Д. Мишина, Н. Э. Шерстюк, А. А. Евдокимов ; под редакцией А. С. Сигова. — 6-е изд. — Москва : Лаборатория знаний, 2021. — 187 с. — ISBN 978-5-93208-545-5. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <a href="https://e.lanbook.com/book/166740">https://e.lanbook.com/book/166740</a> (дата обращения: 01.10.2021).	учебное пособие	ЭБС "Лань"
2.	Юсупов, А. Р. Материалы и методы нанотехнологий : учебное пособие / А. Р. Юсупов, Д. В. Кондратьев. — Уфа : БГПУ имени М. Акмуллы, 2020. — 99 с. — ISBN 978-5-907176-81-2. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <a href="https://e.lanbook.com/book/170438">https://e.lanbook.com/book/170438</a> (дата обращения: 01.10.2021).	учебное пособие	ЭБС "Лань"
3.	Смирнов, В. И. Физические основы нанотехнологий и наноматериалы : учебное пособие / В. И. Смирнов. — Ульяновск : УлГТУ, 2017. — 240 с. — ISBN 978-5-9795-1731-5. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <a href="https://e.lanbook.com/book/165058">https://e.lanbook.com/book/165058</a> (дата обращения: 01.10.2021).	учебное пособие	ЭБС "Лань"

## 9.2. Дополнительная литература и учебные материалы (аудио-, видеопособия и др.)

- фонд научной библиотеки ТГУ:

№ п/п	Библиографическое описание	Тип (учебник, учебное пособие, учебно-методическое пособие, практикум, аудио-, видеопособия и др.)	Количество в библиотеке
1.	Коллоидная химия : расчетные задания / ТГУ ; Ин-т химии и инженерной экологии ; каф. "Химия" ; [сост. Г.И. Остапенко]. - ТГУ. - Тольятти : ТГУ, 2010. - 39 с. : ил. - 11-08	расчетные задания	93
2.	Волков Г. М. Объемные наноматериалы : учеб. пособие / Г. М. Волков. - Гриф УМО. - М. : Кнорус, 2011. - 168 с. : ил. - Библиогр.: с. 159. - Прил.: с. 160-164. - Глоссарий: с. 165-168. - ISBN 978-5-406-00866-9: 198-00	учебное пособие	18
3.	Неволин В. К. Квантовая физика и нанотехнологии [Электронный ресурс] : [монография] / В. К. Неволин. - 2-е изд., испр. и доп. - Москва : Техносфера, 2013. - 128 с. - ISBN 978-5-94836-361-5.	монография	ЭБС "IPRbooks"
4.	Сергеев Н. А. Физика наносистем [Электронный ресурс] : [монография] / Н. А. Сергеев, Д. С. Рябушкин. - Москва : Логос, 2016. - 190 с. - ISBN 978-5-98704-833-7.	монография	ЭБС "IPRbooks"
5.	Золь-гель технология микро- и нанокompозитов [Электронный ресурс] : учеб. пособие / В. А. Мошников [и др.] ; под ред. О. А. Шиловой. - Санкт-Петербург : Лань, 2013. - 293 с. : ил. - (Учебники для вузов. Специальная литература). - ISBN 978-5-8114-1417-8.	учебник	ЭБС "Лань"
6.	Орлова М. Н. Нанoeлектроника [Электронный ресурс] : курс лекций / М. Н. Орлова, И. В. Борзых. - Москва : МИСиС, 2013. - 50 с. - ISBN 978-5-87623-725-5.	курс лекций	ЭБС "Лань"
7.	Наноструктуры в полимерах [Электронный ресурс] : учеб. пособие / сост. Г. Н. Федотов, А. Ф. Гордова. - Москва : МГПУ, 2013. - 98 с.	учебное пособие	ЭБС "IPRbooks"
8.	Потловский К. Г. Нанотехнологии и микромеханика [Электронный ресурс] : учеб. пособие : Ч. 6. Базовые технологические процессы микросистемной техники / К. Г. Потловский, Е. А. Скороходов, С. А. Козубняк. - Москва : Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2013. - 66 с. : ил.	учебное пособие	ЭБС "Лань"
9.	Давыдов С. Ю. Элементарное введение в теорию наносистем [Электронный ресурс] : учеб. пособие / С. Ю. Давыдов, А. А. Лебедев, О. В.	учебник	ЭБС "Лань"

№ п/п	Библиографическое описание	Тип (учебник, учебное пособие, учебно-методическое пособие, практикум, аудио-, видеопособия и др.)	Количество в библиотеке
	Посредник. - Изд. 2-е, перераб. и доп. - Санкт-Петербург : Лань, 2014. - 192 с. : ил. - (Учебники для вузов. Специальная литература). - ISBN 978-5-8114-1565-6.		
10.	Валянский С. И. Наноматериалы [Электронный ресурс] : Ленгмюровские пленки : учеб. пособие / С. И. Валянский, Е. К. Наими. - Москва : МИСиС, 2014. - 188 с. - ISBN 978-5-87623-817-7.	учебное пособие	ЭБС "Лань"

СОГЛАСОВАНО

Директор научной библиотеки

\_\_\_\_\_  
(подпись)

А.М. Асаева

(И.О. Фамилия)

«\_\_» \_\_\_\_\_ 20\_\_ г.

МП

### 9.3. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет"

- [www.biomagres.com/content](http://www.biomagres.com/content) - архив статей журнала BioMagnetic Research and Technology, посвященного нанотехнологиям.
- <http://thescipub.com/journals/ajnt> - рецензируемый журнал American Journal of Nanotechnology публикует результаты исследований в области материи на атомном и молекулярном уровне.
- <http://www.mammp-journal.com> - рецензируемый журнал Mechanics of Advanced Materials and Modern Processes публикует результаты исследований в области механики современных материалов, особый акцент делается на физику и механику деформации, повреждения и разрушения в производственных процессах.
- <http://www.immijournal.com> - рецензируемый журнал Integrating Materials and Manufacturing Innovation публикует результаты исследований в области открытия, развития и применения материалов с целью практического использования в производстве.
- WebofScience[Электронный ресурс] : мультидисциплинарная реферативная база данных. – Philadelphia: ClarivateAnalytics, 2016– . – Режим доступа : [apps.webofknowledge.com](http://apps.webofknowledge.com). – Загл. с экрана. – Яз. рус., англ.
- Scopus[Электронный ресурс] : реферативная база данных. – Netherlands: Elsevier, 2004– . – Режим доступа : [scopus.com](http://scopus.com). – Загл. с экрана. – Яз. рус., англ.
- Elibrary[Электронный ресурс] : научная электронная библиотека. – Москва : НЭБ, 2000– . – Режим доступа : [elibrary.ru](http://elibrary.ru). – Загл. с экрана. – Яз. рус., англ.
- SpringerLink[Электронный ресурс] : [база данных]. – Switzerland: SpringerNature, 1842– . – Режим доступа : [link.springer.com](http://link.springer.com). – Загл. с экрана. – Яз. англ.
- ScienceDirect[Электронный ресурс] : коллекция электронных книг издательства Elsevier. – Netherlands: Elsevier, 2018– . – Режим доступа : [sciencedirect.com](http://sciencedirect.com). – Загл. с экрана. – Яз. англ.
- Cambridgeuniversitypress[Электронный ресурс] : журналы издательства. – Cambridge: Cambridgeuniversitypress, 2018– . – Режим доступа : [cambridge.org](http://cambridge.org). – Загл. с экрана. – Яз. англ.
- NEICON[Электронный ресурс] : электронная информация : архив научных журналов. – Москва : НЭИКОН, 2002– . – Режим доступа : [neicon.ru/resources/archive](http://neicon.ru/resources/archive). – Загл. с экрана. – Яз. рус., англ.

#### 9.4. Перечень программного обеспечения

№ п/п	Наименование ПО	Количество лицензий	Реквизиты договора (дата, номер, срок действия)
1	Windows	1398	Договор № 690 от 19.05.2015г., срок действия - бессрочно
2	Office Standart	1398	Договор № 690 от 19.05.2015г., срок действия - бессрочно; Договор № 727 от 20.07.2016г., срок действия - бессрочно
3	MathCAD	25	ГК № 83 от 31.01.2008 (доп. согл. №84 от 31.01.2008) (бессрочная)

#### 9.5. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)

№ п/п	Наименование оборудованных учебных кабинетов, лабораторий, мастерских и др. объектов для проведения практических и лабораторных занятий	Перечень основного оборудования	Фактический адрес учебных кабинетов, лабораторий, мастерских и др.	Площадь, м <sup>2</sup>	Количество посадочных мест
1	Компьютерный класс. Учебная аудитория для проведения занятий лекционного типа. Учебная аудитория для проведения занятий семинарского типа. Учебная аудитория для проведения лабораторных работ. Учебная аудитория для курсового проектирования (выполнения курсовых работ). Учебная аудитория для проведения групповых и индивидуальных консультаций. Учебная аудитория для проведения за-	Столы ученические двухместные, столы ученические, стол компьютерный, стол преподавательский, ПК, доска трехсекционная аудиторная (меловая), стул преподавательский, проектор мультимедийный, экран для проектора, тумба выкатная	Российская Федерация, 445020, Самарская область, г. Тольятти, Центральный район, ул. Белорусская, д. 16-В позиция по ТП № 1, 2 этаж (Е-214)	75,9	32

№ п/п	Наименование оборудованных учебных кабинетов, лабораторий, мастерских и др. объектов для проведения практических и лабораторных занятий	Перечень основного оборудования	Фактический адрес учебных кабинетов, лабораторий, мастерских и др.	Площадь, м <sup>2</sup>	Количество посадочных мест
	нятий текущего контроля и промежуточной аттестации.				
2	Компьютерный класс. Помещение для самостоятельной работы. Учебная аудитория для проведения занятий семинарского типа. Учебная аудитория для курсового проектирования (выполнения курсовых работ). Учебная аудитория для проведения групповых и индивидуальных консультаций. Учебная аудитория для проведения занятий текущего контроля и промежуточной аттестации.	Столы ученические, стулья ученические, ПК с выходом в сеть Интернет	445667, г.Тольятти, Центральный р-н, ул. Белорусская, д.14, позиция по ТП № 48, 4 этаж (Г-401)	4,8	16
3	Помещение для самостоятельной работы студентов	Столы ученические двухместные и трехместные (модульные), стол преподавательский, стул преподавательский, доска аудиторная (меловая)	445667, г. Тольятти, ул. Белорусская, 14, ауд. Г-440	99,1	110