

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования  
«Тольяттинский государственный университет»

**ФТД.01**

(индекс дисциплины)

## РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Структура и свойства металлических кластеров, нано- и микрообъектов

(наименование дисциплины)

по направлению подготовки  
22.06.01 Технологии материалов

направленность (профиль)  
Металловедение и термическая обработка металлов и сплавов

Форма обучения: очная

Год набора: 2020

Общая трудоемкость: 8 ЗЕ

### Распределение часов дисциплины по семестрам

| Курс                     | 4       | Итого |
|--------------------------|---------|-------|
| Форма контроля           | экзамен |       |
| Вид занятий              |         |       |
| Лекции                   | 8       | 8     |
| Лабораторные             | 16      | 16    |
| Практические             | 16      | 16    |
| Руководство: РГР         |         |       |
| Промежуточная аттестация |         |       |
| Контактная работа        | 40      | 40    |
| Самостоятельная работа   | 212     | 212   |
| Контроль                 | 36      | 35,65 |
| Итого                    | 288     | 288   |

Рабочую программу составил(и):

Доцент кафедры НМиМ, к.т.н. Тюрьков М.Н.

*(должность, ученое звание, степень, Фамилия И.О.)*

---

*(должность, ученое звание, степень, Фамилия И.О.)*

---

Рецензирование рабочей программы дисциплины:

☒

Отсутствует

☐

Рецензент

*(должность, ученое звание, степень, Фамилия И.О.)*

---

Рабочая программа дисциплины составлена на основании ФГОС ВО и учебного плана направления подготовки 22.06.01 Технологии материалов

**Срок действия рабочей программы дисциплины до 01.10.2024 г.г.**

УТВЕРЖДЕНО

На заседании кафедры

Нанотехнологии, материаловедение и механика

---

(протокол заседания № 1 от «30» августа 2019 г.).

## **1. Цель освоения дисциплины**

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

Задачи:

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

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

Дисциплины и практики, на освоении которых базируется данная дисциплина: «Материаловедение и технологии современных и перспективных материалов», «Методы и технологии получения наноматериалов», «Физика конденсированного состояния», «Теория дефектов кристаллической решетки».

Дисциплины и практики, для которых освоение данной дисциплины необходимо как предшествующее: научно-исследовательская работа.

### 3. Планируемые результаты обучения

| Формируемые и контролируемые компетенции<br>(код и наименование)  | Индикаторы достижения компетенций<br>(код и наименование) | Планируемые результаты обучения   |
|---|---|---|
| - способностью выбирать приборы, датчики и оборудование для проведения экспериментов и регистрации их результатов (ОПК-10)  | -   | Знать:<br>Механизмы взаимодействия микро- и нано- структуры с окружающей средой, полями , частицами и излучениями   |
|   |   | Уметь:<br>Определять влияние масштабного фактора на ход эксперимента и регистрацию результатов  |
|   |   | Владеть:<br>Навыками оценки масштабного фактора микро- и нано- структур   |
| - 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:<br>современные представления о влиянии микро- и нано- структуры на свойства материалов, их взаимодействии с окружающей средой, полями , частицами и излучениями  |
|   |   | Уметь:<br>использовать на практике современные представления о влиянии микро- и нано- структуры на свойства материалов, их взаимодействии с окружающей средой, полями , частицами и излучениями               |
|   |   | Владеть:<br>способностью использовать на практике современные представления о влиянии микро- и нано- структуры на свойства материалов, их взаимодействии с окружающей средой, полями, частицами и излучениями |



#### 4. Структура и содержание дисциплины

| Модуль<br>(раздел)  | Вид учебной<br>работы              | Наименование тем занятий<br>(учебной работы)   | Куос | Объем, ч.                | Баллы | Интерактив, ч. | Формы текущего<br>контроля<br>(наименование<br>оценочного<br>средства) |
|---|------------------------------------|--|------|--------------------------|-------|----------------|--|
| 1. Синтез и<br>классификация<br>нанокластеров и<br>нанокластерных<br>структур | Лек<br>Лаб<br>Пр<br>Ср             | Методы получения и<br>классификация нанокластеров.   | 4    | 2<br>4<br>4<br>40        | -     |                | <i>Проект<br/>Разноуровневые<br/>задачи и задания</i>                  |
| 2. Свойства<br>изолированных<br>нанокластеров                                 | Лек<br>Лаб<br>Пр<br>Ср             | Молекулярные лигандные кластеры<br>в растворах. Газовые безлигандные<br>кластеры. Коллоидные кластеры  | 4    | 2<br>4<br>4<br>60        | -     |                | <i>Проект<br/>Разноуровневые<br/>задачи и задания</i>                  |
| 3. Кластерные<br>наносистемы и<br>наноструктуры                               | Лек<br>Лаб<br>Пр<br>Ср<br>Контроль | Формирование наноструктур,<br>самоорганизация нанокластеров.<br>Внутрикластерная атомная<br>динамика. Межкластерная<br>динамика. Структурные<br>особенности наносистем. Свойства<br>нанокластерных систем. | 4    | 4<br>8<br>8<br>112<br>36 | -     |                | <i>Проект<br/>Разноуровневые<br/>задачи и задания</i>                  |
| <b>Итого:</b>   |                                    |  |      | 288                      |       |                |  |

## **5. Образовательные технологии**

В настоящем курсе используются следующие образовательные технологии:

- 1.Технология традиционного обучения (лабораторные работы, практические занятия, самостоятельная работа).
2. Интерактивные технологии (лекции-беседы)

## **6. Методические указания по освоению дисциплины**

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, полуэмпирическими методами и методами молекулярной динамики.

При подготовке к лабораторным занятиям студент должен:

- изучить теорию по теме лабораторной работы, используя конспект лекций и/или рекомендуемую техническую литературу;
- ознакомиться с методикой выполнения работы;
- ознакомиться с вопросами для проработки к лабораторной работе и быть готовым ответить на них во время собеседования с преподавателем по итогам выполнения работы.

Дидактические единицы, предусмотренные рабочей программой на самостоятельную проработку, должны быть изучены студентами в ходе самостоятельной работы. Самостоятельная работа проводится в соответствии с утвержденной рабочей программой дисциплины с учетом времени, предусмотренного на самостоятельное изучение. В ходе самостоятельной работы каждый студент обязан прочитать основную и по возможности дополнительную литературу по изучаемой теме, дополнить конспекты лекций недостающим материалом, выписками из рекомендованных первоисточников. Конспектирование наиболее сложные для понимания темы необходимо сочетать с получением письменных, а при возможности, и очных устных консультаций преподавателя.

При подготовке к занятиям, текущему контролю и промежуточной аттестации студенты могут воспользоваться электронной библиотекой ВУЗа, получить доступ к учебно-методическим материалам как библиотеки ВУЗа, так и иных электронных библиотечных систем. При необходимости студенты могут взять литературу на кафедре или на абонементе вузовской библиотеки в печатном виде, а также воспользоваться читальными залами.

## 7. Оценочные средства

### 7.1. Паспорт оценочных средств

| Курс | Код контролируемой компетенции<br>(или ее части) | Наименование<br>оценочного средства   |
|------|--|---|
| 4    | ОПК-10   | <i>Проект<br/>Разноуровневые задачи и задания<br/>Тестовые задания № 1 – 320.<br/>Вопросы к экзамену № 1 – 50</i> |
| 4    | ПК-1   | <i>Проект<br/>Разноуровневые задачи и задания<br/>Тестовые задания № 1 – 320.<br/>Вопросы к экзамену № 1 – 50</i> |

### 7.2. Типовые задания или иные материалы, необходимые для текущего контроля

#### 7.2.1. Проект

**Тема:**

Моделирование кластеров и нанобъектов

**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 Th).

**Критерии оценки:**

- оценка «зачтено» выставляется студенту, если

1. Полностью заполнен бланк отчета;
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 давлении 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:  $\rho_s = 7.18 \cdot 10^3 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$ ,  $\rho_l = 6.98 \cdot 10^3 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$ ,  $\sigma_l = 0.58 \frac{\text{Н}}{\text{м}}$ ,

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

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 | $T_{\text{melt}}$ ,<br>К | $Q$ ,<br>Дж·моль <sup>-1</sup> | $\sigma_s$ ,<br>Дж·м <sup>-2</sup> | $\rho_s \cdot 10^{-5}$ ,<br>моль·м <sup>-3</sup> | $\sigma_{sl}$ ,<br>Дж·м <sup>-2</sup> | $\rho_l \cdot 10^{-5}$ ,<br>моль·м <sup>-3</sup> | $\alpha \cdot 10^{10}$ ,<br>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

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 границ зерен и средним диаметром зерен. Постройте зависимость

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

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 фуллере (4, 6, 8, 20, 60, 80) полуторная связь C-C наиболее прочная? Расчет энергии выполнять без оптимизации геометрии, ис-

пользуя полуэмпирический метод CNDO. Данные по молекулам фуллерена прочитайте 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 | NH <sub>3</sub> | PH <sub>3</sub> | AsH <sub>3</sub> | H <sub>2</sub> O | H <sub>2</sub> S | H <sub>2</sub> Se |
|----------|-----------------|-----------------|------------------|------------------|------------------|-------------------|
| μ, 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 <sub>2</sub> <sup>+</sup> | O <sub>2</sub> | O <sub>2</sub> <sup>-</sup> | O <sub>2</sub> <sup>2-</sup> | NO <sup>+</sup> | NO              | NO <sup>-</sup> | NO <sup>2-</sup> |
|---------------------|-----------------------------|----------------|-----------------------------|------------------------------|-----------------|-----------------|-----------------|------------------|
| ν, см <sup>-1</sup> | 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>   |
| ν, см <sup>-1</sup> | 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<sub>6</sub>H<sub>6</sub>, C<sub>18</sub>H<sub>12</sub>, C<sub>24</sub>H<sub>12</sub>, C<sub>42</sub>H<sub>18</sub>, C<sub>54</sub>H<sub>18</sub>, C<sub>84</sub>H<sub>24</sub>, C<sub>96</sub>H<sub>24</sub>. Расчет энергии выполняйте без оптимизации геометрии, используя метод CNDO (почему?). Данные по молекулам считайте из имеющихся файлов \*.hin.

## Тема № 6 «Возмущение не зависящие 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

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

гамильтонианом

- 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 вероятность того, что в дальнейшем 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. Комплект тестовых заданий

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:

- ☐  $l_{\Phi P} = \frac{Gb^2}{\tau_{кр}};$
- ☐  $l_{\Phi P} = \frac{Gb}{2\tau_{ПН}};$
- ☐  $l_{\Phi P} = \frac{aGb}{\tau_{ПН}};$
- ☐  $l_{\Phi P} = \frac{G^3b}{\tau_{кр}};$
- ☐  $l_{\Phi P} = \frac{Gb}{\tau_{кр}}.$

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:

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

☐  $V_{\text{м.г.}} \sim \frac{3s}{L};$

☐  $V_{\text{м.г.}} = \frac{3s(L-s)^2}{L^3};$

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

☐  $V_{\text{м.г.}} = \frac{3\pi s(L-s)^2}{L^3}.$

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:

- ☐  $T_b = 1273^\circ\text{C}$  ;
- ☐  $T_b = \frac{KV}{k \ln \frac{\tau_m}{\tau_0}}$  ;
- ☐  $T_b = \frac{KV}{2m_e}$  ;
- ☐  $T_b = 1000\text{K}$  ;

$$\square \quad T_b = \frac{\hbar \omega}{k}.$$

20. Теплоемкость малой частицы определяется формулой:

$$\square \quad C_V = 3R;$$

$$\square \quad C_V = \int_{\omega_{\min}}^{\omega_{\max}} \frac{\partial \varepsilon(\omega, T)}{\partial T} g(\omega) d\omega;$$

$$\square \quad C_V = \int_{\omega_{\min}}^{\omega_{\max}} g(\omega) d\omega;$$

$$\square \quad C_V = 9R \left( \frac{T}{\theta_D} \right)^3 \int_0^{\theta_D/T} \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} dx;$$

$$\square \quad C_V = \frac{1}{3} R.$$

### 7.3. Оценочные средства для промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины

#### 7.3.1. Вопросы к промежуточной аттестации

Курс 4

| № п/п | Вопросы к экзамену   |
|-------|--|
| 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 nanoизделий.  |
| 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 нанобъектов. |
| 42. | Механизмы образования кластеров и формирования нанобъектов и наносистем.  |
| 43. | Пентагональные нанобъекты.  |
| 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.   |

### 7.3.2. Критерии и нормы оценки

| Курс | Форма проведения промежуточной аттестации | Критерии и нормы оценки |   |
|------|---|-------------------------|---|
| 4    | Экзамен (устно)                           | «отлично»               | Усвоение полученных знаний полное, в системе, в соответствии с требованиями учебной программы; допускаются единичные несущественные ошибки, самостоятельно исправляемые студентами                      |
|      |   | «хорошо»                | Усвоение полученных знаний полное, в системе, в соответствии с требованиями учебной программы; допускаются отдельные несущественные ошибки, исправляемые студентами после указания преподавателя на них |
|      |   | «удовлетворительно»     | Усвоение полученных знаний неполное, однако это не препятствует усвоению последующего программного материала; допускаются отдельные существенные ошибки, исправленные с помощью преподавателя           |
|      |   | «неудовлетворительно»   | Усвоение учебного материала неполное, бессистемное, что препятствует усвоению последующей учебной информации; существенные ошибки, неисправляемые даже с помощью преподавателя                          |

## 8. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

### 8.1. Обязательная литература

| №<br>п/п | Авторы, составители  | Заглавие (заголовок)   | Тип (учебник,<br>учебное<br>пособие,<br>учебно-<br>методическое<br>пособие,<br>практикум, др.) | Год издания | Количество в<br>научной<br>библиотеке /<br>Наименование<br>ЭБС |
|----------|--|--|--|-------------|--|
| 1        | Н. И. Минько, В. В. Строкова, И. В. Жерновский, В. М. Нарцев   | Методы получения и свойства нанообъектов : учебное пособие / Н. И. Минько, В. В. Строкова, И. В. Жерновский, В. М. Нарцев. — 3-е изд., стер. — Москва : ФЛИНТА, 2019. — 165 с. — ISBN 978-5-9765-0326-7. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <a href="https://e.lanbook.com/book/119402">https://e.lanbook.com/book/119402</a> | Учебное пособие  | 2019        | ЭБС "Лань"   |
| 2        | Д. И. Рыжонков, В. В. Лёвина, Э. Л. Дзидзигури                 | Рыжонков, Д. И. Наноматериалы : учебное пособие / Д. И. Рыжонков, В. В. Лёвина, Э. Л. Дзидзигури. — 5-е изд. — Москва : Лаборатория знаний, 2017. — 368 с. — ISBN 978-5-00101-474-4. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL: <a href="https://e.lanbook.com/book/94117">https://e.lanbook.com/book/94117</a>                       | Учебное пособие  | 2017        | ЭБС "Лань"   |
| 3        | Н. Т. Кузнецов, В. М. Новоторцев, В. А. Жабрев, В. И. Марголин | Основы нанотехнологии : учебник / Н. Т. Кузнецов, В. М. Новоторцев, В. А. Жабрев, В. И. Марголин. — 2-е изд. — Москва : Лаборатория знаний, 2017. — 400 с. — ISBN 978-5-00101-476-8. — Текст : электронный // Лань : электронно-   | Учебник  | 2017        | ЭБС "Лань"   |

| <b>№<br/>п/п</b> | <b>Авторы, составители</b> | <b>Заглавие (заголовок)</b>   | <b>Тип (учебник,<br/>учебное<br/>пособие,<br/>учебно-<br/>методическое<br/>пособие,<br/>практикум, др.)</b> | <b>Год издания</b> | <b>Количество в<br/>научной<br/>библиотеке /<br/>Наименование<br/>ЭБС</b> |
|------------------|----------------------------|---|---|--------------------|---|
|                  |                            | библиотечная система. — URL:<br><a href="https://e.lanbook.com/book/94129">https://e.lanbook.com/book/94129</a> |   |                    |   |

## **8.2. Дополнительная литература**

| <b>№<br/>п/п</b> | <b>Авторы, составители</b> | <b>Заглавие (заголовок)</b>  | <b>Тип (учебник,<br/>учебное<br/>пособие,<br/>учебно-<br/>методическое<br/>пособие,<br/>практикум, др.)</b> | <b>Год издания</b> | <b>Количество в<br/>научной<br/>библиотеке /<br/>Наименование<br/>ЭБС</b> |
|------------------|----------------------------|--|---|--------------------|---|
| 1                | А. А. Бунаков              | Бунаков, А. А. Материалы и методы нанотехнологий : учебное пособие / А. А. Бунаков. — Уфа : БГПУ имени М. Акмуллы, 2012. — 126 с. — ISBN 978-5-87978-833-4. — Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. — URL:<br><a href="https://e.lanbook.com/book/70165">https://e.lanbook.com/book/70165</a> | Учебное пособие   | 2012               | ЭБС "Лань"  |

### 8.3. Перечень профессиональных баз данных и информационных справочных систем

- Металлообработка [Электронный ресурс] : научно-произв. журн. / Электрон. [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.



#### 8.4. Перечень программного обеспечения

| № п/п | Наименование ПО  | Реквизиты договора (дата, номер, срок действия)   |
|-------|--|---|
| 1     | Windows:<br>WinPro 10 RUS Upgrd OLP NL Acdmc                     | договор № 757 от 04.07.2018,<br>срок действия – бессрочно;<br>контракт № 1653 от 14.12.2018,<br>срок действия – бессрочно |
| 2     | Office Standard:<br>OfficeStd 2019 RUS OLP NL Acdmc              | контракт № 1653 от 14.12.2018,<br>срок действия – бессрочно   |
| 3     | Mathcad Education - University Edition<br>Subscription (25 pack) | контракт № 469 от 05.06.2020,<br>срок действия - бессрочно  |

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

| № п/п | Наименование оборудованных учебных кабинетов, лабораторий, мастерских и др. объектов для проведения практических и лабораторных занятий, помещений для самостоятельной работы обучающихся (номер аудитории)   | Перечень основного оборудования   |
|-------|---|---|
| 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 занятий текущего контроля и промежуточной аттестации<br>Е-214 | Стол� ученические двухместные , столы ученические, стол компьютерный, стол преподавательский, ПК, доска трехсекционная аудиторная (меловая), стул преподавательский, проектор мультимедийный ,экран для проектора, тумба выкатная |
| 2     | Лаборатория "Термообработка материалов" Учебная аудитория для проведения лабораторных работ<br>Е-105  | Стол� ученические двухместные, стулья ученические , доска аудиторная (меловая), шкафы для учебных пособий, столы лабораторные, микроскоп металлографический, щит силовой  |
| 3     | Помещение для самостоятельной работы обучающихся Г-401  | Стол� ученические, стулья ученические, ПК с выходом в сеть Интернет   |
| 4     | Помещение для самостоятельной работы обучающихся Д-409  | Стол� ученические, стулья ученические, ПК с выходом в сеть Интернет   |