

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева»

**Программа вступительных испытаний в магистратуру
по направлению**

**18.04.02 Энерго- и ресурсосберегающие процессы в химической технологии,
нефтехимии и биотехнологии**

Магистерская программа

«Ресурсосберегающие нанопроцессы, технологии и оборудование»

Разработчики программы:

– председатель комиссии университета по разработке программы вступительных испытаний в магистратуру по направлению 18.04.02 – Энерго- и ресурсосберегающие процессы в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии по магистерской программе «Ресурсосберегающие нанопроцессы, технологии и оборудование» – заведующий кафедрой кибернетики химико-технологических процессов, д.т.н., проф. Глебов М.Б.;

– руководитель магистерской программы «Ресурсосберегающие нанопроцессы, технологии и оборудование» – заведующий кафедрой кибернетики химико-технологических процессов, д.т.н., проф. Глебов М.Б.

1. Введение

Программа вступительных испытаний предназначена для лиц, желающих поступить в магистратуру ФГБОУ ВПО «РХТУ им. Д.И.Менделеева» по направлению 18.04.02 – Энерго- и ресурсосберегающие процессы в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии по магистерской программе «Ресурсосберегающие нанопроцессы, технологии и оборудование».

Программа разработана в соответствии с Порядком организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры (утв. приказом Министерства образования и науки РФ от 5 апреля 2017 г. № 301).

Программа рекомендуется для подготовки к вступительным испытаниям выпускников бакалавриата, специалитета или магистратуры классических университетов, технических и технологических вузов, в основных образовательных программах подготовки которых содержатся дисциплины (модули), рабочие программы которых аналогичны по наименованию и основному содержанию рабочим программам перечисленных ниже учебных дисциплин по уровню бакалавриата.

Содержание программы базируется на следующих учебных дисциплинах, преподаваемых в РХТУ им.Д.И.Менделеева:

1. «Введение в нанотехнологии», которая относится к обязательным дисциплинам вариативной части профессионального цикла дисциплин основной образовательной программы подготовки бакалавров по направлению «Энерго- и ресурсосберегающие процессы в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии» (профиль "Нанотехнологии для химии, фармацевтики и биотехнологии");

2. «Физико-химические основы нанотехнологии», которая относится к базовой части профессионального цикла дисциплин основной образовательной программы подготовки бакалавров по направлению «Энерго- и ресурсосберегающие процессы в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии» (профиль "Нанотехнологии для химии, фармацевтики и биотехнологии");

3. «Материаловедение наноматериалов и наносистем», которая относится к базовой части профессионального цикла дисциплин основной образовательной программы подготовки бакалавров по направлению «Энерго- и ресурсосберегающие процессы в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии» (профиль "Нанотехнологии для химии, фармацевтики и биотехнологии");

4. «Моделирование нанопроцессов в химической технологии, фармацевтике и биотехнологии», относящейся к обязательным дисциплинам вариативной части профессионального цикла дисциплин основной образовательной программы подготовки бакалавров по направлению «Энерго- и ресурсосберегающие процессы в химической технологии,

нефтехимии и биотехнологии» (профиль "Наноинженерия для химии, фармацевтики и биотехнологии");

5. «Основы надёжности технических систем», относящейся к обязательным дисциплинам вариативной части профессионального цикла дисциплин основной образовательной программы подготовки бакалавров по направлению «Энерго- и ресурсосберегающие процессы в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии» (профиль "Наноинженерия для химии, фармацевтики и биотехнологии");

6. «Нанокаталитические процессы и нанокатализаторы», относящейся к дисциплинам по выбору вариативной части профессионального цикла дисциплин основной образовательной программы подготовки бакалавров по направлению «Энерго- и ресурсосберегающие процессы в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии» (профиль "Наноинженерия для химии, фармацевтики и биотехнологии").

Программа включает перечень вопросов к вступительным испытаниям и перечень рекомендуемой основной и дополнительной литературы.

Вступительные испытания проводятся в форме устного экзамена по экзаменационным билетам, каждый из которых включает три задания из следующих трех дисциплинарных блоков:

Блок 1. Основы нанотехнологий.

Блок 2. Физико-химические основы нанотехнологий и материаловедение наносистем.

Блок 3. Моделирование нанопроцессов и наносистем.

2. Содержание программы вступительных испытаний

2.1. Блок 1. Основы нанотехнологий.

2.1.1. «Введение в наноинженерию»

Дисциплина состоит из пяти модулей:

Модуль 1. Наноинженерия в технологиях производства лекарственных средств, биотехнологии и материалов медицинского назначения.

Модуль 2. Методы моделирования и программные пакеты для наноинженерии.

Модуль 3. Методы получения наноструктур и наноматериалов.

Модуль 4. Аналитические методы в наноинженерии.

Модуль 5. Безопасность обращения с наноматериалами и риски от их использования в живых системах.

В первых трех модулях рассматриваются: Наночастицы как средства доставки лекарств и как новая форма лекарственных препаратов, Биосенсорная нанодиагностика, Нанороботы для медицинских целей. Наноинструменты и наноманипуляторы, Нанотехнологии в регенеративной медицине, Методы моделирования наноструктур, Моделирование, поиск, прогнозирование свойств химических соединений и биологических веществ, Аэрогели, Нанопорошки, Нанотрубки, Инкапсуляция, Микрореакторы.

2.1.2. Основы надёжности технических систем

Введение. Цели и задачи дисциплины. Структура курса. Краткий исторический очерк развития теории надёжности. Предмет и объекты надёжности технических систем.

Методы исследования надёжности технических систем.

Показатели надёжности наноизделий и наномашин. Основные понятия и определения курса: объект (изделие), система, элемент. Классификация состояний технической системы. Отказ – как ключевое понятие теории надёжности. Природа отказов, физика отказов, типы отказов, особенности их возникновения в микро- и наносистемах. Нормативная база в области надёжности технических систем. Понятия надёжности, безотказности, готовности, ремонтпригодности, долговечности, сохраняемости технических систем на всех стадиях жизненного цикла. Методы получения показателей надёжности: единичные и комплексные. Показатели надёжности технических систем: экспериментальные и расчетные методы. Особенности

проведения испытаний микро- и наноизделий (систем) и обработки экспериментальных данных: использование тестовых структур, ускоренные испытания, серийные испытания. Временные показатели надежности технических систем. Понятия восстанавливаемых и невосстанавливаемых систем. Понятия: ресурс, назначенный ресурс, остаточный ресурс, срок службы. Нарботка на отказ и до отказа.

Математические основы анализа надежности элементов и изделий технических систем.

Единичные показатели надежности невосстанавливаемых и восстанавливаемых систем и их определение вероятностными и статистическими методами: вероятности отказов и безотказной работы; среднее время наработки на отказ (до отказа), интенсивность отказа, плотность наработки на отказ. Взаимосвязь между единичными показателями надежности (безотказности). Параметр потока отказов и его свойства. Показатели ремонтпригодности, долговечности, комплексные показатели надежности: интенсивности восстановления, коэффициенты готовности, вынужденного простоя, технического использования. Модели надежности элементов на основе механических, физических и химических процессов: нагрузка-прочность на основе механических испытаний; использование механизмов, ускоряющих протекание физических и химических процессов при повышенных температурах. Модель Эйринга для диагностики ранних отказов. Моделирование коррозионных отказов и диффузионных процессов в твердых телах. Структурные дефекты в твердых телах.

Методы анализа надежности простых и сложных технических систем.

Структурные схемы анализа надежности систем: элементный и функциональный расчет надежности. Резервирование как способ повышения надежности: виды резервирования (с постоянным включением, замещением, скользящий, с дробной кратностью), особенности резервирования восстанавливаемых и невосстанавливаемых систем. Методы анализа надежности систем, основанные на применении теорем теории вероятностей для последовательных, параллельных и мостовых структур. Метод минимальных путей и сечений. Логико-вероятностные методы анализа надежности сложных технических систем: примеры их практического использования для исследования надежности различных структур. Методы анализа надежности систем с использованием марковских случайных процессов и дерева отказов: основные понятия теории марковских случайных процессов, графы смены состояний для восстанавливаемых и невосстанавливаемых систем. Запись систем обыкновенных дифференциальных уравнений для моделирования состояний системы. Определение вероятности безотказной работы, коэффициента готовности среднего времени наработки до первого отказа с использованием марковских

методов. Метод исследования надежности технических систем с использованием дерева отказов. Примеры практического использования.

Заключение.

Блок 2. Физико-химические основы нанотехнологий и материаловедение наносистем.

2.2.1. Физико-химические основы нанотехнологии

Введение. Определения нанопроцессов и наночастиц. Области их применения в промышленности – микро- и нанoeлектронике, биологии и медицине. Физическая химия наносистем. Основные понятия и представления. Классификация наноматериалов. Энергетические диаграммы и плотности электронных состояний для 2D, 1D, 0D структур в сравнении с трехмерной структурой.

Модуль 1. Квантовая химия нанопроцессов.

Наноструктурные материалы. Зависимость свойств наноматериалов от размеров структуры. Поведение подвижных носителей заряда в наноструктурах. Эффект квантового ограничения. Баллистический транспорт носителей заряда. Квантовые интерференционные эффекты. Туннельные и спиновые эффекты. Универсальная баллистическая проводимость. Средняя длина свободного пробега электрона и длина волны Ферми в металлических и полупроводниковых наноматериалах. Длина спиновой релаксации. Волновое уравнение Шредингера. Двойственность природы излучения. Волновая природа электрона. Соотношение неопределенностей. Свойства квантово-механических операций и функций. Момент импульса и операторы спина. Спин электрона. Собственные функции многоэлектронных систем. Принцип Паули.

Модуль 2. Математические основы теории физико-химических свойств наноматериалов.

Векторное и тензорное исчисление физико-химических полей. Смешанное векторно-скалярное произведение трех векторов. Годограф вектора. Расхождение вектора, его аналитическое выражение. Вихрь вектора. Его составляющие. Тензорное исчисление и использование тензоров для определения массы электрона или движущихся элементарных частиц в электрических и магнитных полях, для определения поляризуемости и механических свойств наноматериалов). Тензорный эллипсоид. Главные оси и главное значение тензора.

Модуль 3. Нанокластеры и нанокристаллы.

Упорядоченные (магические) и неупорядоченные нанокластеры. Неорганические нанокристаллы металлов и полупроводников. Кристаллическое пространство. Кристаллические решетки. Индексы узлов решетки, узловых рядов, узловых плоскостей. Обратная решетка. Точечная симметрия твердых тел. Матричный метод описания операций симметрии. Решетки Браве. Индексы Миллера. Модели энергетических зон диэлектриков, полупроводников, металлов. Носители зарядов в полупроводниках. Равновесные состояния в полупроводниках. Плотность заполнения уровней. Функция распределения Ферми- Дирака. Концентрация носителей заряда в полупроводниках. Собственные и примесные полупроводники. Явления переноса зарядов в условиях стационарной неравновесности. Неравновесные процессы в полупроводниках. Поверхностные процессы. Состояния Тамма и Шокли. Уравнения моделей, отражающих явления в полупроводниках – плотность тока, непрерывность, напряжение электрического поля. Зоны Брюэллена.

Модуль 4. Методы формирования наноразмерных тонких пленок.

Механизмы роста тонких пленок: послойный рост (рост Франка-ван дер Мерве), островковый рост (рост Вольмера-Вебера), рост Странского- Крастанова. Процессы на поверхности и в приповерхностных слоях тонких пленок: адсорбция и десорбция. Реконструкция и релаксация поверхностей. Поверхностная диффузия. Законы Фика. Анизотропия поверхностной диффузии. Атомные механизмы поверхностной диффузии.

Модуль 5. Самосборка и самоорганизация.

Пленки Лэнгмюра-Блоджетт. Амфифильные вещества. Пленки Y-, X- и Z-типа. Вертикальное и горизонтальное осаждение. Спонтанная кристаллизация. Изменение свободной энергии кристаллического зародыша в зависимости от его радиуса. Создание квантовых проволок самоорганизацией в процессе эпитаксиального роста на вицинальной поверхности. Атомная инженерия. Использование сканирующей туннельной микроскопии для направленного манипулирования атомами на поверхности твердого тела. Параллельные и последовательные процессы переноса атомов. Полевая диффузия.

Модуль 6. Кинетика процессов в наносистемах.

Гомоэпитаксия – кинетические эффекты. Внутрислойный и межслойный массоперенос. Барьер Эрлиха-Швобеля. Коэффициент прохождения (эффективность межслойного массопереноса). Механизмы роста при гомоэпитаксии. Рост за счет движения ступеней, послойный и многослойный рост. Гетероэпитаксия.

Кристаллографические плоскости и направления. Несоответствия решеток. Дислокации несоответствия (релаксация напряжений на границе пленка-подложка). Расстояния между дислокациями. Эффекты механических напряжений при гетероэпитаксии. Критическая толщина пленки. Псевдоморфный и релаксированный рост.

Модуль 7. Технологии получения нанопленок, нанопроволок, квантовых точек.

Метод химического осаждения из газовой фазы CVD и его модификации (APCVD, LPCVD, UHVCVD при атмосферном, низком давлении и сверхвысоком вакууме, MOCVD, и др.). Основные типы химических реакций: разложение галогенидов металлов, гидридов, карбониллов, металлоорганических соединений, реакции окисления, обмена, восстановления. Кинетика CVD. Аппаратурное оформление процесса. Молекулярно-лучевая эпитаксия. Аппаратурное оформление. Достоинства и недостатки метода. Электронно-лучевая литография для получения квантовых проволок и точек.

Модуль 8. Наноструктуры и их использование в электронных устройствах.

Углеродные нанотрубки. Формирование локтевых соединений между нанотрубками типа «кресло» и «зигзаг» и возникновение гетероперехода металл-полупроводник. Использование углеродных нанотрубок при создании выпрямляющих нанодиодов. Одноэлектронные транзистеры с наноразмерными проводящими каналами. Полевые транзистеры на металлических и полупроводниковых нанотрубках. Зависимость проводимости цепи нанотранзистера от потенциала затвора. Эффект туннельного переноса через металлическую нанотрубку. Молекулярные наноструктуры (супрамолекулярные ассоциаты, биомолекулы и биомолекулярные комплексы, мицеллы и липосомы) и их использование при создании молекулярных переключателей.

Модуль 9. Экспериментальные методы физической химии при изучении наноразмерных структур.

Просвечивающая электронная микроскопия ПЭМ. Сканирующая зондовая микроскопия (СЗМ) (Сканирующая туннельная микроскопия СТМ, Атомно-силовая микроскопия АТМ). Склерометрия и наноиндентирование. Спектральный анализ (Оже-спектроскопия, ИК-спектроскопия, Ядерный магнитный резонанс ЯМР, электронный магнитный резонанс ЭМР, радиоспектроскопия).

2.2.2. Материаловедение наноматериалов и наносистем.

Введение.

Предмет и метод дисциплины “Материаловедение наноматериалов и наносистем”.

Модуль 1. Поверхностная энергия наноматериалов и наносистем.

Ультрадисперсные коллоидные системы. Наночастицы, наноматериалы, наносистемы. Свойства и качество наноматериалов. Аномальные свойства наноматериалов и наносистем. Поверхностные явления в наноматериалах. Структура наноматериалов. Фрактальная размерность. Фрактальные кластеры. Дендримеры на основе нанокompозитных полимерных материалов. Нанотрубки, фуллерены, графен. Уравнение Кельвина. Распределение наночастиц по размерам. Поверхностная энергия наноматериалов. Размерный эффект. Поверхностное натяжение. Формула Толмена. Зависимость поверхностной энергии от свойств наночастиц. Кристаллическая решётка и её дефекты. Ближний и дальний порядок. Дислокации и дисклинации. Формирование и свойства гетероструктур. Квантовые эффекты, “квантовые точки”. Работы академика Ж.И. Алфёрова по гетероструктурам.

Модуль 2. Поверхностные явления в наноматериалах.

Адсорбция. Адгезия наночастиц и нанокапель. Теория Дирягина–Мюллера–Топорова. Смачивание. Уравнение Юнга. Диффузия. Закон Фика. Температурная зависимость коэффициента диффузии. Уравнение Аррениуса. Осмос в наноматериалах. Электрокинетические явления: электроосмос, электрофорез. Формула Генри.

Модуль 3. Оптические свойства наноматериалов и наносистем.

Оптические свойства наноразмерных плёнок и матриц. Взаимодействие с оптическим излучением. Экстинкция, поглощение и рассеяние оптического излучения малыми частицами. Оптическая теорема. Теория Релея. Поверхностные моды в малых частицах. Переменный коэффициент преломления. Наностёкла и их применение в лазерной технике. Окрашивание стекла коллоидными красителями. Основы зонной теории полупроводников. Преобразование инфракрасного излучения в видимый свет. Светодиоды. Электролюминесценция. Эпитаксия.

Модуль 4. Объёмные свойства наноматериалов.

Устойчивость наносистем. Расклинивающее давление. Теория Дирягина–Ландау–Фервея–Овербека. Константа Гамакера. Стабилизация. Потеря устойчивости. Золотое число. Структурно-механические свойства наноматериалов. Модуль Юнга. Модуль сдвига. Деформация, упругость,

твёрдость, пластичность. Уравнения Холла–Петча. Вектор Бюргерса. Структурированные наносистемы. Прочностные свойства графена. Особенности объёмных свойств нанобъектов. Деформация фазовых диаграмм нанобъектов, смещение сингулярных точек. Температура фазового перехода. Отжиг. Формула Томсона. Модель Линдемана. Спонтанные процессы в наносистемах: самосборка, самоорганизация. Межфазная поверхность. Метод Ленгмюра–Блоджетт. Проявление размерного эффекта в объёмных свойствах наноматериалов.

Блок 3. Моделирование нанопроцессов и наносистем.

2.3.1. Моделирование нанопроцессов в химической технологии, фармацевтике и биотехнологии.

Введение. Предмет и методы дисциплины «Моделирование нанопроцессов в химической технологии, фармацевтике и биотехнологии». Описание основных разделов курса. Структура курса и правила рейтинговой системы.

Модуль 1. Компьютерное моделирование нанопроцессов и наносистем.

1.1. Математическое моделирование наносистем.

Особенности моделирования. Компьютерное моделирование свойств веществ. Соотношение аналитической теории и компьютерного эксперимента. Роль сил взаимодействия наночастиц при компьютерном моделировании. Классификация полуклассических и квантово-механических моделей. Нанохимия и нанобиология.

1.2. Методы статистической механики для оценки макропараметров наносистем.

Описание движения ансамбля наночастиц с позиций статистической механики. Классификация взаимодействий. Энергия взаимодействия молекул в свободном пространстве и в средах. Энтропия, температура и свободная энергия Гельмгольца. Термодинамическое среднее величины. Эргодичность системы многих частиц. Канонический ансамбль частиц. Распределение Больцмана.

Модуль 2. Квантово-механические модели наносистем.

2.1. Основные понятия и математический аппарат квантовой механики.

Операторы в квантовой механике. Волновая функция и ее свойства. Свойства одноэлектронных атомов. Кратность вырождения энергетических уровней. Средний радиус орбитали электрона в атоме водорода. Наиболее вероятный радиус орбиты электрона в атоме водорода в основном состоянии.

2.2. Модели квантовых наносистем.

Уравнение Шредингера. Точные решения уравнения Шредингера для модельных потенциалов. Свободная частица. Потенциальные ямы. Прохождение частицы через потенциальный барьер. Туннелирование. Электрон в периодическом силовом поле. Кристаллы.

2.3. Описание квантовых наносистем с учетом возмущающих воздействий.

Теория возмущений. Стационарные и нестационарные возмущения. Теория сканирующего туннельного микроскопа. Квантовые точки. Промышленные применения квантовых точек.

2.4. Многочастичные квантовые наносистемы.

Вычислительные квантовые модели «из первых принципов». Точное решение уравнения Шредингера для атома водорода. Атомные орбитали как базисные функции приближенных решений. Вычисление средних величин.

Модуль 3. Вычислительный метод Монте-Карло в задачах нанотехнологии.

3.1. Моделирование методом Монте-Карло.

Моделирование систем с фиксированным числом частиц в заданном объеме с фиксированной температурой. Основные положения метода. Метод Метрополиса. Базовый алгоритм Монте-Карло. Периодические граничные условия. Обрезка потенциалов. Инициализация расчета методом Монте-Карло. Пробные шаги смещения.

3.2. Квантовые методы Монте-Карло для изучения наноструктур.

Вариационный метод Монте-Карло на основе алгоритма Метрополиса выборки по значимости. Диффузионный метод Монте-Карло для наносистем. Генетический алгоритм. Оценка сходимости алгоритма.

Модуль 4. Моделирование наносистем методом молекулярной динамики.

4.1. Основы метода молекулярной динамики.

Сходство моделирования методом молекулярной динамики с реальным экспериментом. Суть метода и алгоритм расчета. Инициализация. Расчет сил. Алгоритм Верле для интегрирования уравнений движения. Неустойчивость по Ляпунову. Применение метода молекулярной динамики для описания процесса диффузии. Молекулярная динамика на основе теории функционала плотности для задач вычислительной биологии.

4.2. Вычисление макроскопических параметров системы усреднением по времени.

Метод молекулярной динамики для вычисления макроскопических, термодинамических параметров системы: вириальное уравнение состояния. Молекулярная динамика для моделирования системы макромолекул.

Модуль 5. Применения компьютерного моделирования наносистем для фармацевтики, полимерных материалов, биотехнологии и нанoeлектроники.

5.1. Моделирование наносистем в фармацевтике и биотехнологии.

Дизайн лекарств. Использование молекулярной динамики со связями для моделирования систем макромолекул. Биологические наноматериалы. Строительные блоки и наноструктуры. Полипептидные нанопроволоки и белковые наночастицы. ДНК как сдублированная нанопроволока. Генетический код и синтез белка.

5.2. Модели сплошной среды для изучения наносистем.

Модель сплошной среды для процесса диффузия – реакция. Фазовые переходы. Кинетика роста нанокластеров.

5.3. Модели сплошной среды для описания образования наноструктур.

Механизм образования наноструктур. Супрамолекулярные системы. Модели нанокластеров. Молекулярная самосборка.

5.4. Моделирование нанопроцессов на поверхности.

Нанообъекты на поверхности. Моделирование наноразмерных кластеров на поверхности кремния. Миграция атомов и химические реакции.

5.5. Примеры использования численных моделей в задачах нанотехнологий.

Пакеты программ на основе моделей «из первых принципов» и их возможности для задач нанотехнологий. Нанопамять, наноматериалы и использование методов «из первых принципов» для их изучения. Определение примесей и дефектов в нанокристаллическом алмазе. Формирование роста гибридных углеродных наноматериалов.

Заключение. Роль математического моделирования в развитии нанотехнологий.

2.3.2. Нанокаталитические процессы и нанокатализаторы.

Модуль 1. Химическая термодинамика гетерогенных процессов, адсорбция многокомпонентных систем и кинетика химической реакции на нанокатализаторах.

Физико-химические свойства наночастиц адсорбентов и катализаторов. Адсорбция многокомпонентных реакционных систем. Кинетика многомаршрутных химических реакций на нанокатализаторах. Основные способы построения кинетических моделей. Установки проведения лабораторного кинетического эксперимента с различной гидродинамикой потока в реакторе, обеспечивающие получение констант с заданной точностью. Планирование непрерывного динамического эксперимента, дискриминация моделей, проверка адекватности моделей для заданного нанокатализатора и заданной каталитической реакции. По результатам динамического адсорбционного эксперимента оценка энергетической неоднородности поверхности катализатора, коэффициентов диффузии реагентов в микрогрануле катализатора, констант равновесия адсорбции и констант скоростей адсорбции. Установление кинетической модели адсорбции или модели изотермы адсорбции.

Модуль 2. Планирование непрерывного химического эксперимента и способы направленного подбора нанокатализаторов.

Примеры синтеза нанокатализаторов для процессов получения высокочистого этилена, алкилирования бензола пропиленом, изомеризации алканов и алкенов, риформинга бензиновых углеводородов.

Модуль 3. Цеолитные катализаторы с активными наночастицами, их структура и свойства.

Физико-химические свойства цеолитных катализаторов с активными наночастицами.

Классификация цеолитов – по цеолитному модулю (отношение Si/Al), размеру и строению каналов и полостей цеолитов, типу катионов в каналах цеолитов. Химические процессы формирования внутренней поверхности цеолитов и высокоактивных моно- и полифункциональных нанокаталитических кластеров в них. Бренстедовские и Льюисовские активные центры каркаса цеолитов. Силикатный и кремнезольный способы производства кристаллических алюмосиликатных гетерогенных нанокатализаторов.

Низкокремнистые, высококремнистые, ультравысококремнистые цеолиты. Формирование геометрической структуры и состава моно-, би- и поликомпонентов активных наночастиц цеолитных катализаторов на его внутренней поверхности. Методы организации в структуре

нанокатализаторов совмещенных химических реакций, обеспечивающих увеличение производительности и селективности каталитических процессов.

Модуль 4. Мезоструктурные алюмосиликатные материалы типа MCM-5, MCM-41, MCM-48.

Магнитно-электрические способы получения микро-однорядной структуры кристаллов цеолитов и организация внерешетчатых активных центров на их внешних поверхностях, а также би- и полифункциональных активных центров на внутренней поверхности.

Модуль 5. Полиметаллические нанокатализаторы. Приготовление нанокатализаторов методами порошковой металлургии.

Получение порошков металлов, оксидов металлов, сплавов металлов механическими и физико-химическими методами. Диспергирование твердых тел в окислительной, восстановительной и нейтральной средах. Формирование порошков в готовые изделия-гранулы различной поровой структуры и геометрической формы. Методы формирования – одно- или двухсторонне прессование в матрицах (пресс-формах) при давлениях 1.0-1000 МПа и температурах 293-873 К. Термообработка гранул катализаторов в инертной (аргон, гелий) и восстановительной (водород) средах при температурах 673-1473 К. Упрочнение гранул вследствие взаимной твердофазной диффузии различных компонентов. Восстановление активных наночастичек на внешней и внутренней поверхностях катализаторов.

Модуль 6. Полиметаллические нанесенные катализаторы.

Приготовление исходных гранул катализатора с нейтральной внутренней и внешней поверхностью. Нанесение оксидов I побочной группы и II группы периодической таблицы Д.И. Менделеева на поверхность гранулы. Сушка и прокалка гранулы. Загрузка гранул в реактор для приготовления катализатора, обеспечивающего нанесение активных компонентов на его поверхность в режиме организации высокотурбулентных потоков растворителя. Введение в реактор разбавленных растворов активной фазы катализатора. Регулирование по заданной программе pH жидкой фазы, скорости движения потока, температуры реакционной среды, длительности осаждения активного компонента. В зависимости от показателя по активности, процедура нанесения активного компонента повторяется несколько раз.

Модуль 7. Формирование катализаторов с наноструктурными активными центрами многослойным осаждением реагентов на поверхности катализаторов.

Последовательность операций. Приготовление гранулы катализатора с заданной внешней геометрией и внутренней поровой структурой и сформированной на поверхности пор подложкой. Организация на

поверхностных гранях катализатора постадийного осаждения реагентов в газовой и жидкой фазах при стационарных и нестационарных условиях в турбулентном режиме течения потоков.

Модуль 8. Основные режимы эксплуатации, регенерации и восстановления нанокатализаторов.

Анализ результатов их длительной эксплуатации и возможности промышленного использования. Каталитический процесс селективного гидрирования ацетилена в этан-этиленовой фракции газов пиролиза. Активация катализатора, вывод реактора на режим нормальной эксплуатации, пуск-остановочные режимы работы. Каталитический процесс селективного гидрирования метилацетилена в пропан-пропиленовой фракции пирогаза. Результаты эксплуатации стендовой установки Активация полиметаллического никелевого катализатора.

3. Вопросы к вступительным испытаниям по магистерской программе «Кибернетика химико-технологических процессов»

Перечень вопросов вступительных испытаний включает вопросы по следующим учебным курсам, относящимся к базовой и вариативной частям профессионального цикла дисциплин основной образовательной программы подготовки бакалавров по направлению «Энерго- и ресурсосберегающие процессы в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии» профиля «Наноинженерия для химии, фармацевтики и биотехнологии» (в соответствии с федеральными государственными образовательными стандартами высшего образования (ФГОС ВО)):

- 1 – Введение в наноинженерию.
- 2 - Основы надежности технических систем.
- 3 - Физико-химические основы нанотехнологии.
- 4.- Материаловедение наноматериалов и наносистем.
- 5 - Моделирование нанопроцессов в химической технологии, фармацевтике и биотехнологии.
- 6 - Нанокаталитические процессы и нанокатализаторы.

В каждом билете – по три вопроса. Перечень вопросов прилагается.

1. Введение в наноинженерию

1. Наночастицы как средства доставки лекарств и как новая форма лекарственных препаратов.
2. Биосенсорная нанодиагностика.

3. Нанороботы для медицинских целей.
4. Наноинструменты и наноманипуляторы.
5. Нанотехнологии в регенеративной медицине.
6. Методы моделирования наноструктур.
7. Моделирование, поиск, прогнозирование свойств химических соединений и биологических веществ.
8. Аэрогели,
9. Нанопорошки,
10. Нанотрубки.
11. Инкапсуляция, Микрореакторы.
12. Безопасность обращения с наноматериалами и риски от их использования в живых системах.

2. Основы надежности технических систем

1. Классификация состояний технической системы. Отказ – как ключевое понятие теории надежности. Классификация отказов.
2. Природа отказов, физика отказов, типы отказов, особенности их возникновения в микро- и наносистемах.
3. Понятия надежности, безотказности, готовности, ремонтпригодности, долговечности, сохраняемости технических систем.
4. Единичные и комплексные показатели надежности технических систем. Привести примеры.
5. Экспериментальные и расчетные методы получения показателей надежности.
6. Понятия восстанавливаемых и невосстанавливаемых систем. Привести примеры.
7. Понятия: ресурс, назначенный ресурс, остаточный ресурс, срок службы. Нарботка на отказ и до отказа.
8. Единичные показатели надежности невосстанавливаемых систем и их определение вероятностными методами: вероятности отказов и безотказной работы; среднее время наработки до отказа, интенсивность отказа, плотность наработки до отказа.
9. Единичные показатели надежности восстанавливаемых систем и их определение вероятностными методами: вероятности отказов и безотказной работы; среднее время наработки на отказ, интенсивность отказа, плотность наработки на отказ.

10. Взаимосвязь между единичными показателями надежности.
11. Параметр потока отказов и его свойства.
12. Показатели ремонтпригодности, долговечности, комплексные показатели надежности: интенсивности восстановления, коэффициенты готовности, вынужденного простоя, технического использования.
13. Структурные схемы анализа надежности систем: элементный и функциональный расчет надежности.
14. Резервирование как способ повышения надежности: виды резервирования (с постоянным включением, замещением, скользящий, с дробной кратностью).
15. Особенности резервирования восстанавливаемых и невосстанавливаемых систем. Привести примеры.
16. Методы анализа надежности систем, основанные на применении теорем теории вероятностей для последовательных и параллельных структур.
17. Методы исследования надёжности мостовых структур.
18. Логико-вероятностные методы анализа надежности сложных технических систем: примеры их практического использования для исследования надежности различных структур.
19. Методы анализа надежности систем с использованием марковских случайных процессов: основные понятия теории марковских случайных процессов, графы смены состояний для восстанавливаемых и невосстанавливаемых систем.
20. Запись систем обыкновенных дифференциальных уравнений для моделирования состояний системы с использованием марковских случайных процессов. Привести примеры для восстанавливаемых и невосстанавливаемых систем.
21. Определение вероятности безотказной работы, коэффициента готовности, среднего времени наработки до первого отказа с использованием марковских методов.
22. Метод минимальных путей и сечений для исследования мостовых структур.
23. Единичные показатели надежности невосстанавливаемых систем и их определение статистическими методами: вероятности отказов и безотказной работы; среднее время наработки до отказа, интенсивность отказа, плотность наработки до отказа.

24. Единичные показатели надежности восстанавливаемых систем и их определение статистическими методами: вероятности отказов и безотказной работы; среднее время наработки на отказ, интенсивность отказа, плотность наработки на отказ.

25. Определение показателей надежности мостовых структур методом разложения по базовому элементу.

3. Физико-химические основы нанотехнологии

1. Классификация наноматериалов (нанопленки, нанопроволоки, квантовые точки). Энергетические диаграммы и плотности электронных состояний для 3D, 2D, 1D, 0D структур.
2. Наноструктурные материалы. Поведение подвижных носителей заряда в наноструктурах. Эффект квантового ограничения. Баллистический транспорт носителей заряда. Туннельные и спиновые эффекты.
3. Универсальная баллистическая проводимость. Средняя длина свободного пробега электрона и длина волны Ферми в металлических и полупроводниковых наноматериалах. Длина спиновой релаксации.
4. Методы формирования наноразмерных тонких пленок. Механизмы роста тонких пленок: послойный рост (рост Франка-ван дер Мерве), островковый рост (рост Вольмера-Вебера), рост Странского-Крастанова.
5. Гомоэпитаксия. Внутрислойный и межслойный массоперенос. Барьер Эрлиха-Швобеля. Коэффициент прохождения (эффективность межслойного массопереноса). Механизмы роста при гомоэпитаксии.
6. Гетероэпитаксия. Несоответствия решеток. Дислокации несоответствия. Эффекты механических напряжений при гетероэпитаксии. Псевдоморфный и релаксированный рост.
7. Самосборка и самоорганизация. Пленки Лэнгмюра-Блоджетт. Амфифильные вещества. Пленки Y-, X- и Z-типа.
8. Метод химического газофазного осаждения – Chemical Vapour Deposition и его модификации (APCVD, LPCVD, UHVCVD при атмосферном, низком давлении и сверхвысоком вакууме, MOCVD, и др.). Основные типы химических реакций: разложение галогенидов металлов, гидридов, карбониллов, металлоорганических соединений,

реакции окисления, обмена, восстановления. Кинетика CVD. Аппаратурное оформление процесса

9. Атомная инженерия. Использование сканирующей туннельной микроскопии для направленного манипулирования атомами на поверхности твердого тела. Параллельные и последовательные процессы переноса атомов. Полевая диффузия
10. Наноструктуры и их использование в электронных устройствах. Углеродные нанотрубки. Формирование локтевых соединений между нанотрубками типа «кресло» и «зигзаг» и возникновение гетероперехода металл-полупроводник.

4. Материаловедение наноматериалов и наносистем

1. Наноматериалы и наносистемы. Размерный эффект.
2. Удельная поверхность наночастиц. Поверхностная энергия и её составляющие. Структура наноматериалов и наносистем. Факторы, определяющие удельную поверхность наночастиц.
3. Классификация наноматериалов по размерности. Примеры: графен, фуллерены и нанотрубки.
4. Кластеры. Фрактальная размерность. Дендримеры.
5. Волновые и корпускулярные свойства нанобъектов. Длина волны де Бройля. Принцип неопределённости Гейзенберга.
6. Частицы и квазичастицы. Бозоны и фермионы.
7. Объёмные свойства наноматериалов. Их аномальность.
8. Структурно-механические свойства наноматериалов. Виды деформации поверхности. Упругость, твёрдость, пластичность.
9. Поверхностные явления в наноматериалах. Релаксация и реконструкция поверхности, их причины.
10. Поверхностные явления в наноматериалах. Адгезия, адсорбция. Методы определения силы адгезии.
11. Аномалия напряжения и твёрдости наноматериалов. Уравнение Холла–Петча.
12. Виды диффузии в твёрдых наноматериалах.
13. Деформация фазовых диаграмм нанобъектов. Снижение температуры плавления. Смещение и раздвоение эвтектической точки. Уравнение Томсона, модель Линдемана. Вектор Бюргера.
14. Самоорганизация в наносистемах. Примеры. Реакция Белоусова–Жаботинского.
15. Самоорганизация в коллоидных системах. Кластеры. Мицеллы. Микроэмульсии. Их строение. Микроэмульсии как микрореакторы для получения наноматериалов.
16. Расчёт межионного расстояния и энергии связи в кристаллах ионного типа. Потенциал Ленарда–Джонса. Константа Маделунга.

5. Моделирование нанопроцессов в химической технологии, фармацевтике и биотехнологии

1. Соотношение теоретического и компьютерного прогнозирования свойств веществ и материалов.
2. Математические модели и этапы математического моделирования.
3. Методы установления адекватности математических моделей.
4. Нейросетевое моделирование. Этапы разработки нейросетевой модели. Обучение на основе обратного распространения ошибок.
5. Классификация взаимодействий. Молекулярные и поверхностные силы. Уравнение Ван-дер-Ваальса. Связь потенциала взаимодействия с силой взаимодействия. Парный потенциал Леннард-Джонса.
6. Взаимодействие молекул в газовой и жидкой средах. Влияние растворителя. Явление сольватации. Воздействие молекул растворителя на свойства растворенных молекул. Энергия, затрачиваемая на образование полости при растворении молекул.
7. Связь собственной энергии растворенной молекулы μ^i с парным потенциалом $W(r)$ в газовой и жидкой средах.
8. Роль статистической механики в моделировании наносистем. Статистическое определение энтропии и температуры системы частиц.
9. Энергетическое распределение Больцмана. Среднее значение энергии системы $\langle E \rangle$ при температуре T .
10. Эргодичность системы многих частиц.
11. Модели квантовых наносистем. Гипотеза Луи де Бройля о корпускулярно-волновом характере движения частиц. Соотношения неопределенностей Гейзенберга. Волновая функция $\Psi(r, t)$ и ее физический смысл. Вычисление средних значений через волновую функцию.
12. Основные операторы квантовой механики. Оператор полной энергии \hat{E} , потенциальной энергии \hat{U} , кинетической энергии \hat{K} , импульса \hat{p} , оператор Гамильтона \hat{H} . Правило вывода соотношений между квантовыми операторами.

13. Уравнение Шредингера. Ограничения, налагаемые на волновую функцию $\Psi(r, t)$. Стационарное уравнение Шредингера и его общее решение: собственные функции и собственные значения энергии E . Решение уравнения Шредингера в случае движения свободной частицы вдоль оси X .

14. Частица в одномерной прямоугольной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками. Граничные условия.

Энергетический спектр.

15. Прохождение частицы через потенциальный барьер. Туннелирование. Решение уравнения Шредингера для областей до, после и внутри потенциального барьера. Коэффициент прохождения частицы через барьер и его зависимость от высоты и ширины барьера. Принцип и схема работы сканирующего туннельного микроскопа.

16. Моделирование водородно подобных атомов (H, D, T, He⁺). Потенциальная энергия взаимодействия электрона с ядром. Описание движения электрона на основе стационарного уравнения Шредингера. Спектр энергий электрона в области $E < 0$.

17. Квантование волновой функции $\Psi(r, \theta, \varphi)$ электрона в атоме водорода. Главное квантовое число n ; орбитальное квантовое число l и магнитное квантовое число m . Спиновое квантовое число m_s .

18. Кратность вырождения различных энергетических уровней в атоме водорода. Средний радиус орбитали электрона в атоме водорода.

19. Метод Монте-Карло. Вычисление определенного интеграла методом Монте-Карло. Геометрическая интерпретация метода Монте-Карло для численного интегрирования функций.

20. Вычисление макросвойств наносистемы как термодинамические средние величины. Невозможность прямого вычисления конфигурационных интегралов. Метод Метрополиса (выборка по значимости) и его графическая интерпретация.

21. Базовый алгоритм Монте-Карло (модификация Метрополиса). Граничные условия. Инициализация расчета. Пробные смещения.

22. Сходство моделирования наносистемы методом молекулярной динамики и реального эксперимента. Алгоритм моделирования по методу

молекулярной динамики. Задание начальных значений параметров и положения частиц

(инициализация).

23. Расчет сил, действующих на каждую частицу в наносистеме.

Периодические граничные условия. Обрезка потенциала.

24. Интегрирование уравнений движения частиц наносистемы на основе закона Ньютона (алгоритм Верле).

25. Применение метода молекулярной динамики для моделирования процесса диффузии.

6. Нанокаталитические процессы и нанокатализаторы

1. Цеолиты различных типов: FAU, MFI, BEA, MOR. Структура элементарной ячейки, размеры пор, система каналов.
2. Термическая стабильность цеолитов. Методы модифицирования цеолитов.
3. Применение ИК-спектроскопии адсорбированных тестовых молекул для исследования цеолитов. Основные области ИК-спектра. Правило отбора в ИК-спектроскопии.
4. Метод электронной Оже-спектроскопии для диагностики состава поверхностных слоев катализаторов. Оже-переходы и переход Костнера-Кронинга. Методы численного анализа при обработке Оже-спектров.

4. Рекомендуемая литература

По блоку 1. Основы нанотехнологий.

Основная:

1. Старостин В.В. Материалы и методы нанотехнологии. М.: Бином. Лаборатория знаний, 2012. — 432 с.

Дополнительная:

1. Меньшутина Н.В. Введение в нанотехнологию. Изд-во научной литературы Н.Ф. Бочкаревой, 2006.- 132 с.
2. Андреев, В. В. Физические основы наноинженерии : учебное пособие для вузов по направлению 152200 "Наноинженерия" / В. В. Андреев, А. А. Столяров ; Ред. В. А. Шахнов . – М. : Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2011 .

– 224 с.

По блоку 2. Физико-химические основы нанотехнологий и материаловедение наносистем.

Основная:

1. Старостин В.В. Материалы и методы нанотехнологии. М.: Бином. Лаборатория знаний, 2012. — 432 с.

Дополнительная:

1. Рамбиди Н.Г., Берёзкин А.В. Физические и химические основы нанотехнологий. М.: Физматлит, 2008. - 456 с.

По блоку 3. Моделирование нанопроцессов и наносистем.

Основная:

1. Попов А.М. Вычислительные нанотехнологии. М.: КноРус, 2014-312 с.
2. Френкель Д, Смит Б. Принципы компьютерного моделирования молекулярных систем: от алгоритмов к приложениям. М.: Научный мир, 2013. – 578 с.

Дополнительная:

1. Джейкоб Израелашвили. Межмолекулярные и поверхностные силы. М.: Научный мир, 2011. – 456 с.