

**МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ**

**Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования «Российский химико-технологический университет
имени Д.И. Менделеева» (РХТУ им. Д.И. Менделеева)**

**Программа вступительных испытаний в магистратуру
по направлению**

28.04.02 Наноинженерия

Магистерская программа

«Функциональные и композиционные наноматериалы, изделия из них»

Москва 2024

Разработчики программы:

- руководитель магистерской программы «Функциональные и композиционные наноматериалы, изделия из них» – зав. кафедрой химического и фармацевтического инжиниринга, д.т.н., профессор Меньшутина Н.В.
- профессор кафедры химического и фармацевтического инжиниринга, д.т.н., доцент Гордиенко М.Г.
- доцент кафедры химического и фармацевтического инжиниринга, к.т.н., доцент Гусева Е.В.

1. Введение

Программа вступительных испытаний предназначена для лиц, желающих поступить в магистратуру ФГБОУ ВО «РХТУ им. Д.И. Менделеева» по направлению подготовки 28.04.02 – Наноинженерия по магистерской программе «Функциональные и композиционные наноматериалы, изделия из них».

Программа разработана в соответствии с Порядком организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам высшего образования – программам бакалавриата, программам специалитета, программам магистратуры, утвержденным приказом Министерства образования и науки РФ от 6 апреля 2021 года № 245.

Программа рекомендуется для подготовки к вступительным испытаниям выпускников бакалавриата или специалитета 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 наноинженерию» которая относится к обязательной части блока «Дисциплины» основной образовательной программы подготовки бакалавров по направлению «Наноинженерия» (федеральный государственный образовательный стандарт высшего образования (ФГОС ВО));

2. «Методы и инструментальные средства прогнозирования свойств наноматериалов», которая относится к обязательной части блока «Дисциплины» основной образовательной программы подготовки бакалавров по направлению «Наноинженерия» (федеральный государственный образовательный стандарт высшего образования (ФГОС ВО));

3. «Процессы и аппараты химической технологии», которая относится к обязательным частям блоков «Дисциплины» основной образовательной программы подготовки бакалавров по направлению «Наноинженерия» (федеральный государственный образовательный стандарт высшего образования (ФГОС ВО)) и основной образовательной программы подготовки бакалавров по направлению «Энерго- и ресурсосберегающие процессы в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии» (федеральный государственный образовательный стандарт высшего образования (ФГОС ВО));

4. «Наноинженерия в фармацевтических технологиях», которая относится к части, формируемой участниками образовательных отношений, блока «Дисциплины» основной образовательной программы подготовки бакалавров по направлению «Наноинженерия» (федеральный государственный образовательный стандарт высшего образования (ФГОС ВО));

5. «Технологические системы в нанотехнологии», относящейся к части, формируемой участниками образовательных отношений блока «Дисциплины» основной образовательной программы подготовки бакалавров по направлению «Наноинженерия» (ФГОС ВО);

6. «Методы кибернетики в наноинженерии», которая относится к части, формируемой участниками образовательных отношений блока «Дисциплины» основной образовательной программы подготовки бакалавров по направлению «Наноинженерия» (ФГОС ВО);

7. «Информационные системы хранения и обработки данных», относящейся к части, формируемой участниками образовательных отношений «Дисциплины» основной образовательной программы подготовки бакалавров по направлению «Энерго- и ресурсосберегающие процессы в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии» (ФГОС ВО).

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 два задания из следующих двух дисциплинарных блоков:

Блок 1. Основы нанотехнологий.

Блок 2. Моделирование нанопроцессов и наносистем. Процессы и аппараты химических технологий.

2. Содержание программы вступительных испытаний

2.1 Блок 1. Основы нанотехнологий

Тема 1. Введение в наноинженерию

Понятие нанотехнологии. Возникновение нанотехнологии. История развития нанотехнологии. Основные определения и понятия в наноинженерии. Классификации наноструктурированных и наноматериалов. Понятия и определения наночастиц, нанотрубок, нановолокон, нанодисперсий, наноструктурных поверхностей и пленок, нанокристаллических и нанопористых материалов. Физико-химические и термодинамические основы получения нано- и наноструктурированных материалов «снизу-вверх» и «сверху-вниз». Связь наноинженерии и химической технологии. Современные тенденции и направления развития нанотехнологий в биотехнологии, фармацевтике и медицине.

Тема 2. Особенности технологических процессов и аппаратов получения нано и наноструктурированных материалов.

Классификация основных методов получения наноструктурных материалов и их описание: механические, физические, химические и биологические. Методы измельчения для получения наноматериалов, применение различных мельниц. Метод интенсивной пластической деформации. Методы распыления. Методы испарения-конденсации. Метод электрического взрыва проводников. Методы с использованием химических реакций. Использование плазмы разной температуры для получения наноматериалов. Использование микроорганизмов для получения наноматериалов. Ультрадисперсные коллоидные системы. Наночастицы, наноматериалы, наносистемы. Свойства и качество наноматериалов. Размерный эффект. Фрактальные кластеры, фрактальная размерность. Дендримеры на основе нанокомпозитных полимерных материалов. Нанотрубки, фуллерены, графен. Аэрогели. Уравнение Кельвина. Распределение наночастиц по размерам. Биологические наноструктуры как объекты бионанотехнологий.

Тема 3. Аналитические исследования структуры и свойств функциональных и композиционных наноматериалов

Основные методы аналитических исследований наноструктурных материалов. Просвечивающая электронная микроскопия. Сканирующая электронная микроскопия. Сканирующая туннельная микроскопия. Атомно-силовая микроскопия. Методы определения среднего размера нанообъектов и их гранулометрического состава. Методы определения удельной площади поверхности наноструктурных материалов. Метод определения пористости наноструктурных материалов. Метод определения химического состава наноструктурных материалов.

2.2 Блок 2. Моделирование нанопроцессов и наносистем. Процессы и аппараты химических технологий.

Тема 1. Принципы построения математических моделей и этапы математического моделирования

Определение. Взаимосвязь математических и физических моделей. Приближенный характер математических моделей. Допущения, принимаемые при построении математической модели. Классификация математических моделей по временному (стационарные, нестационарные, квазистационарные модели) и пространственным признакам (с сосредоточенными параметрами, с распределенными параметрами, ячеечные модели).

Представление математического описания в соответствии с блочным принципом. Основные блоки, составляющие описание процесса и их взаимосвязь. Отражение принципов системного анализа в блочном подходе к построению математических моделей.

Изучение химико-технологических процессов методом математического моделирования. Этапы математического моделирования:

а) Составление математического описания аналитическим способом, эмпирическим способом, аналитико-эмпирическим способом.

б) Выбор метода решения. Аналитические и численные методы. Источники возникновения погрешностей. Анализ сходимости итерационных методов. Реализация выбранного метода решения в виде алгоритма. Разработка программы расчета по алгоритму.

в) Установление адекватности модели реальному объекту. Статистические гипотезы и проверка гипотез по статистическим критериям. Критерии установления адекватности однооткликowych и многооткликowych моделей.

г) Коррекция модели по результатам накопленной информации.

Тема 2. Моделирование нанопроцессов и наносистем. Модели представления данных, базы данных

Квантово-механические модели и методы молекулярной динамики. Основные определения и понятия. Квантовая химия и молекулярная динамика. Моделирование структуры и молекул классическими подходами. Квантово-механические постулаты. Основное уравнение квантовой механики. Математические основы молекулярной динамики.

Математическое моделирование структуры и свойств новых наноструктурированных материалов с использованием клеточно-автоматного подхода. Клеточный автомат. Клеточные автоматы для моделирования наноструктур. Модель агрегации, ограниченной диффузией. Модель агрегации, ограниченной реакцией. Модель кластер-кластерной агрегации. Модель слабоперекрывающихся сфер. Модель перекрывающихся сфер.

Механика сплошных и гетерогенных сред для описания процессов

получения наноматериалов. Предмет и методы механики сплошной среды. Основные гипотезы. Методы описания движения сплошной среды. Уравнения механики сплошной среды: уравнение неразрывности; уравнения движения сплошной среды; уравнения моментов количества движения. Дополнительные соотношения. Характеристики многофазной среды. Классификация многофазных (гетерогенных неоднородных) сред. Особенности математического описания гетерогенных сред. Основные уравнения.

Поиск количественных соотношений структура-свойство (Quantitative Structure-Activity Relationship, QSAR). Понятия дескриптора. Виды молекулярных дескрипторов. Методы построения моделей структура- свойство и их краткая характеристика.

Технологии и этапы проектирования баз данных. Методы представления данных (иерархические, сетевые, реляционные, постреляционные). Компьютерные средства для построения баз данных. Основные математические методы обработки массивов данных, характеристика и область применения каждого метода. Системы управления базами данных: основные функции, архитектура. Системы управления базами данных: основные функции, архитектура.

Пакеты ASPEN как пример коммерческих пакетов для проектирования химико- технологических, фармацевтических, нефтеперерабатывающих производств. Состав пакетов ASPEN. Проектирование технологических схем. Примеры.

Пакеты ANSYS для решения задач моделирования течения жидкостей и газов, межфазных взаимодействий и теплообменом методами вычислительной гидродинамики. ANSYS Fluent – как один из пакетов ANSYS.

Тема 3. Типовые модели структуры потоков. Общие закономерности гидродинамики. Гидромеханические процессы

Модель идеального смешения. Вывод дифференциального уравнения модели. Модель идеального вытеснения. Вывод дифференциального уравнения модели. Сравнительная оценка идеальных моделей. Ячеечная модель. Вывод уравнения предельного перехода к модели идеального вытеснения. Диффузионная модель. Комбинированные (многопараметрические модели). Байпасирование.

Свойства жидкостей. Закон внутреннего трения Ньютона. Динамический и кинематический коэффициенты вязкости. Классификация жидкостей. Режимы движения жидкостей. Характеристики течения жидкостей по трубопроводам. Профили скоростей при разных режимах. Модель сплошной среды. Основные гидродинамические величины. Уравнение неразрывности. Уравнения Эйлера и Навье-Стокса.

Классификация жидких и газовых гетерогенных систем: суспензии, эмульсии, пены, пыли, туманы. Материальный баланс процессов разделения гетерогенных систем. Внешняя задача гидродинамики. Обтекание твердых тел. Течение через неподвижные зернистые слои. Гидродинамика псевдооживленных (кипящих) слоев. Основные характеристики псевдооживленного слоя.

Зависимость потери давления от средней скорости потока. Фильтрация суспензий. Основное уравнение фильтрации. Фильтры объемного и поверхностного действия.

Тема 4. Термодинамические и массообменные процессы

Система и состояние системы. Уравнения состояния. Энергия. Работа. Теплота. Нулевой и первый законы термодинамики. Равновесные и обратимые процессы. Второй и третий законы термодинамики. Эксергия. Основные тепловые процессы: нагревание-охлаждение, конденсация, испарение. Тепловые балансы при изменении и без изменений фазового состояния теплоносителей. Прямоток и противоток теплоносителей. Расчет средней движущей силы процесса теплопередачи. Средняя движущая сила при прямотоке и противотоке теплоносителей.

Теплопроводность, конвективный теплообмен, тепловое излучение.

Закон Фурье и уравнение Фурье-Кирхгофа. Теплоотдача и теплопередача. Математическое описание, физический смысл коэффициентов, температурный градиент. Движущая сила. Коэффициенты теплоотдачи и их расчет при движении в трубах и каналах.

Классификация процессов массообмена. Способы выражения составов фаз. Равновесные условия массообмена. Диффузия, закон Фика. Уравнения неразрывности, конвективной диффузии. Движущие силы. Понятие о массоотдаче и массопередаче. Соотношение между коэффициентами массоотдачи и массопередачи. Расчет средней движущей силы массопередачи. Материальный баланс и уравнение рабочей линии при массопередаче (на примере абсорбции). Типы абсорбционных аппаратов и их математическое описание. Минимальный расход абсорбента.

3. Вопросы к вступительным испытаниям по магистерской программе «Функциональные и композиционные наноматериалы, изделия из них»

Перечень вопросов вступительных испытаний включает вопросы по следующим учебным курсам, относящимся к основной части и части, формируемой участниками образовательных отношений профессионального цикла дисциплин основной образовательной программы подготовки бакалавров по направлению «Наноинженерия» профиля «Функциональные и композиционные наноматериалы, изделия из них» (в соответствии с федеральными государственными образовательными стандартами высшего образования (ФГОС ВО)) по двум блокам:

Блок 1. Основы нанотехнологий

Блок 2. Моделирование нанопроцессов и наносистем. Процессы и аппараты химических технологий

Блок 1. Основы нанотехнологий

1. Понятие нанотехнологии. Возникновение нанотехнологии. История развития нанотехнологии.

2. Основные определения и понятия в наноинженерии. Классификации наноструктурированных и наноматериалов.
3. Понятие нанопористых твердых материалов. Примеры. Области применения. Основные методы получения нанопористых твердых материалов.
4. Понятие наночастиц. Примеры. Области применения. Основные методы получения наночастиц.
5. Понятие нанотрубок и нановолокон. Примеры. Области применения. Основные методы получения нанотрубок и нановолокон.
6. Понятие наноструктурных поверхностей и плёнок. Примеры. Области применения. Методы получения наноструктурных поверхностей и пленок.
7. Классификация механических методов получения нано и наноструктурированных материалов. Метод интенсивной пластической деформации.
8. Классификация физических методов получения нано и наноструктурированных материалов. Методы распыления.
9. Классификация химических методов получения нано и наноструктурированных материалов. Методы с использованием химических реакций.
10. Понятие аэрогелей как наноструктурированных материалов. Получение, применение.
11. Физико-химические и термодинамические основы получения нано- и наноструктурированных материалов «снизу-вверх» и «сверху-вниз».
12. Биологические наноструктуры как объекты бионанотехнологий. Описание, примеры использования.
13. Основные методы аналитических исследований наноструктурных материалов. Методы просвечивающей и сканирующей электронной микроскопии, описание.
14. Методы сканирующей туннельной и атомно-силовой микроскопии.
15. Методы определения среднего размера нанообъектов, их гранулометрического состава и удельной площади поверхности наноструктурированных материалов.

Блок 2. Процессы и аппараты химических технологий. Моделирование нанопроцессов и наносистем

1. Определение математической модели. Взаимосвязь математических и физических моделей. Приближенный характер математических моделей. Допущения, принимаемые при построении математической модели. Классификация математических моделей по временному и пространственному признакам.
2. Представление математического описания в соответствии с блочным принципом. Основные блоки, составляющие описание процесса и их взаимосвязь. Отражение принципов системного анализа в блочном подходе к построению математических моделей.

3. Теоретические основы системного анализа. Основные понятия о принципах системного анализа химических процессов. Математические методы решения уравнений моделей. Структурная и параметрическая идентификация моделей.

4. Математическое моделирование структуры и свойств наноструктурированных материалов с использованием клеточно-автоматного подхода. Понятие клеточного автомата. Клеточные автоматы для моделирования наноструктур. Модель агрегации, ограниченной диффузией.

5. Поиск количественных соотношений структура-свойство (Quantitative Structure-Activity Relationship, QSAR). Понятия дескриптора. Виды молекулярных дескрипторов. Методы построения моделей структура-свойство и их краткая характеристика.

6. Механика сплошных и гетерогенных сред для описания процессов получения наноматериалов. Уравнения механики сплошной среды: уравнение неразрывности; уравнения движения сплошной среды; уравнения моментов количества движения.

7. Характеристики многофазной среды. Классификация многофазных (гетерогенных неоднородных) сред. Особенности математического описания гетерогенных сред. Основные уравнения.

8. Пакеты ASPEN как пример коммерческих пакетов для проектирования химико-технологических, фармацевтических, нефтеперерабатывающих производств. Применение для решения задач моделирования течения жидкостей и газов, межфазных взаимодействий и теплообменом методами вычислительной гидродинамики. ANSYS Fluent – как один из пакетов ANSYS.

9. Основные модели структуры потоков, их параметры. Модели идеального смешения и вытеснения. Вывод уравнений. Сравнительная оценка моделей.

10. Ячеечная модель. Вывод уравнения предельного перехода к модели идеального вытеснения. Диффузионная модель. Комбинированные (многопараметрические модели).

11. Тенденции развития наномоделирования.

12. Свойства жидкостей. Закон внутреннего трения Ньютона. Динамический и кинематический коэффициенты вязкости. Классификация жидкостей. Режимы движения жидкостей.

13. Модель сплошной среды. Основные гидродинамические величины. Уравнение неразрывности. Уравнение Эйлера и Навье-Стокса.

14. Теплопроводность, конвективный теплообмен, тепловое излучение. Закон Фурье и уравнение Фурье-Кирхгофа. Теплоотдача и теплопередача.

15. Классификация процессов массообмена. Диффузия, закон Фика. Уравнения неразрывности, конвективной диффузии. Движущие силы. Понятие о массоотдаче и массопередаче. Соотношение между коэффициентами массоотдачи и массопередачи. Материальный баланс и уравнение рабочей линии при массопередаче (на примере абсорбции).

4. Рекомендуемая литература

По блоку 1. Основы нанотехнологий

Основная:

1. Меньшутина Н.В. Введение в нанотехнологию. Изд-во научной литературы Н.Ф. Бочкаревой, 2006.- 132 с.
2. Меньшутина Н.В. Наночастицы и наноструктурированные материалы для фармацевтики – Калуга: Издательство научной литературы Н.Ф. Бочкаревой, 2008. – 192с.
3. Гусев, А. И. Наноматериалы, наноструктуры, нанотехнологии. [Текст] / А. И. Гусев. - М. : "Физматлит", 2009. - 414 с.
4. Раков, Э. Г. Неорганические наноматериалы [Текст] : учебное пособие / Э. Г. Раков. - М. : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2013. - 477 с.

Дополнительная:

1. Старостин В.В. Материалы и методы нанотехнологии. М.: Бином. Лаборатория знаний, 2012. — 432 с.
2. Отто М. Современные методы аналитической химии. – Техносфера, 2006.
3. Рыжонков, Д. И. Наноматериалы [Текст] : учебное пособие / Д. И. Рыжонков, В. В. Лёвина, Э. Л. Дзидзигури. - 2-е изд. - М. : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2010. - 365 с.
4. Юртов, Е. В. Процессы получения наночастиц и наноматериалов [Текст] : учебно-методический комплекс / Е. В. Юртов. - М. : РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2010. - 152 с.

По блоку 2. Моделирование нанопроцессов и наносистем

Основная:

1. Меньшутина Н. В., Лебедев И.В., Гусева Е.В., Колнооченко А.В. Цифровые двойники новых материалов: клеточно-автоматное моделирование структуры и свойств: учебное пособие / - М. : РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2020. - 104 с.
2. Современные информационные системы хранения, обработки и анализа данных для предприятий химической и смежных отраслей: учеб. пособие / Н. В. Меньшутина, А. В. Матасов, И. В. Лебедев. – М.: РХТУ им. Д. И. Менделеева, 2022. – 300 с. ISBN 978-5-7237-1926-2.
3. Ахназарова, С. Л. Моделирование и оптимизация химико-технологических процессов с неполной информацией о механизме [Электронный ресурс]: учебное пособие / С. Л. Ахназарова, Л. С. Гордеев, М.Б. Глебов. – М.: РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2010. – 100 с.
4. Н.В. Меньшутина, А.В. Матасов. Современные информационные системы хранения данных, обработки и анализа данных для предприятий химической и смежных отраслей – М.: РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2011. – 308с.
5. Комиссаров, Ю. А. Процессы и аппараты химической технологии

[Текст]учебное пособие / Ю. А. Комиссаров, Л. С. Гордеев, Д. П. Вент; ред. Ю. А. Комиссаров. – М.: Химия, 2011. – 1229 с.

6. Нигматулин Р.И. Механика сплошной среды. – М.: ГЭОТАР-Медиа, 2014.– 640 с.

7. Кафаров В.В., Глебов М.Б. Математическое моделирование основных процессов химических производств. - М.: Высшая школа, 1991. – 400 с.

Дополнительная:

1. Дытнерский, Ю. И. Процессы и аппараты химической технологии [Текст]: учебник для вузов: В 2 ч. / Ю.И. Дытнерский. – 3-е изд. – М.: Химия. – Ч.1: Теоретические основы процессов химической технологии. Гидромеханические и тепловые процессы и аппараты: рекомендовано Мин. образования. – 2002. – 400 с.

2. Дытнерский, Ю. И. Процессы и аппараты химической технологии [Текст]: учебник для вузов: В 2 ч. / Ю.И. Дытнерский. – М.: Химия. – Ч.2: Массообменные процессы и аппараты: рекомендовано Мин.образования. – 2002. – 368 с.

3. Основные процессы и аппараты химической технологии: пособие по проектированию / ред. Ю. И. Дытнерский. – 4-е изд., стер., Перепеч. с изд. 1991г. – М.: Альянс, 2008. – 493 с.

4. Павлов, К. Ф. Примеры и задачи по курсу процессов и аппаратов химической технологии: учеб. пособие для вузов / К.Ф. Павлов, П.Г. Романков, А.А. Носков. – 11-е изд., стер. Перепечатка с изд. 1987 г. – М.: РусМедиаКонсалт, 2004. – 576 с.

5. Кафаров В.В. Методы кибернетики в химии и химической технологии/В. В. Кафаров. – М.: Химия, 1984.

6. Кафаров В.В. Системный анализ процессов химической технологии.Т.1. Основы стратегии / В.В. Кафаров, И.Н. Дорохов. – М.: Наука, 1976.