

**МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ**
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«Новосибирский национальный исследовательский государственный университет»
(Новосибирский государственный университет, НГУ)

**Физический факультет
Кафедра нанокompозитных материалов**



ПРЕДПОСЛАВЛЯЮ
Декан ФФ, д.ф.-м.н
В.Е.Блинов
2022 г.

Рабочая программа дисциплины
**НАНОУГЛЕРОДНЫЕ МАТЕРИАЛЫ:
НАНОТРУБКИ, ФУЛЛЕРЕНА, ГРАФЕН**

направление подготовки: **03.04.02 Физика**
направленность (профиль): **Общая и фундаментальная физика**

Форма обучения
Очная

Семестр	Общий объем	Виды учебных занятий (в часах)				Промежуточная аттестация (в часах)				
		Контактная работа обучающихся с преподавателем			Самостоятельная работа, не включая период сессии	Самостоятельная подготовка к промежуточной аттестации	Контактная работа обучающихся с преподавателем			
		Лекции	Практические занятия	Лабораторные занятия			Консультации	Зачет	Дифференцированный зачет	Экзамен
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
1	72	16	16		18	18	2			2
Всего 72 часа / 2 зачётных единицы, из них: - контактная работа 36 часов										
Компетенции ПК-1										

Руководитель программы
д.ф.-м.н.

И. Б. Логашенко

Новосибирск, 2022

Содержание

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесённых с планируемыми результатами освоения образовательной программы.	3
2. Место дисциплины в структуре образовательной программы.	4
3. Трудоёмкость дисциплины в зачётных единицах с указанием количества академических часов, выделенных на контактную работу обучающегося с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу.	4
4. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведённого на них количества академических часов и видов учебных занятий.	5
5. Перечень учебной литературы.	9
6. Перечень учебно-методических материалов по самостоятельной работе обучающихся.	9
7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины.	9
8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине.	10
9. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине.	10
10. Оценочные средства для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине.	11

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

Курс «Нанюглеродные материалы: нанотрубки, фуллерены, графен» предназначен для приобретения магистрантами современных представлений и знаний о нанюглеродных материалах, о взаимосвязях между их строением и свойствами, об основных аллотропных модификациях углерода и изменении их свойств при переходе от макро- к наноразмерным системам, а также перспективных областях их применения.

Цель курса - формирование у студентов профессиональных научно-исследовательских навыков по приобретению знаний о нанюглеродных материалах, методологии их исследований.

Для достижения этой цели выделяются следующие основные задачи курса:

- получение знаний о фазовых диаграммах состояния углерода и аллотропных модификациях углерода, взаимных превращениях различных форм углерода, изменении их свойств при переходе от макро- к наноразмерным системам; методах их получения, реакционной способности; о взаимосвязях строения углеродных материалов с их физико-химическими свойствами (механической прочностью, тепло- и электропроводностью, спектральными характеристиками и др.);
- ознакомление с методами получения наноразмерных форм углерода, идентификации с использованием физических методов, химической модификации, формировании на их основе композиционных соединений и устройств и областях их использования;
- детальный анализ взаимосвязей строения наноразмерных углеродных материалов с их электронными свойствами на основе молекулярного моделирования этих объектов с использованием методов молекулярной механики, квантовой химии; ознакомление со структурными базами данных химических соединений, программами для моделирования свойств молекулярных объектов.

Такие специальные знания необходимы современному специалисту, работающему в области нанюглеродных материалов.

Дисциплина нацелена на формирование у обучающегося профессиональной компетенции:

Результаты освоения образовательной программы (компетенции)	Индикаторы	Результаты обучения по дисциплине
ПК-1 Способен использовать специализированные знания в области физики при решении поставленных задач в научно-исследовательской деятельности в соответствии с профилем подготовки в зависимости от специфики объекта исследования.	<p>ПК 1.1 Применяет специализированные знания в области физики при решении конкретных задач в области научных исследований в соответствии с профилем подготовки в зависимости от специфики объекта исследования.</p> <p>ПК 1.2 Выбирает наиболее эффективные методы решения конкретных задач в области научных исследований в соответствии с профилем подготовки в зависимости от специфики объекта исследования.</p>	<p>Знать основные типы аллотропных модификаций углерода и нанюглеродных материалов, методы их получения и свойства, взаимосвязи между их строением и физико-химическими свойствами.</p> <p>Уметь предсказывать и объяснять особенности свойств материалов на основе наноразмерных углеродных модификаций, планировать и проводить структурные и физико-химические исследования, связанные с изучением свойств, а также с разработкой таких материалов, используемых в различных областях науки и техники.</p> <p>Владеть представлениями об основах моделирования свойств нанюглеродных материалов на основе</p>

Результаты освоения образовательной программы (компетенции)	Индикаторы	Результаты обучения по дисциплине
		молекулярных моделей, их построения с использованием структурных баз данных, и исследования свойств с использованием квантово-химических методов, и молекулярной механики.

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы.

Дисциплина «Нанокarbonные материалы: нанотрубки, фуллерены, графен» читается в первом семестре 1 курса для магистрантов и является одной из дисциплин по выбору по направлению подготовки 03.04.02 Физика, направленность «Общая и фундаментальная физика» развивает знания, умения и навыки, сформированные у обучающихся по результатам общей базовой подготовки в рамках программ бакалавриата. Дисциплина должна предшествовать выполнению магистерской диссертации т.к. дает магистранту необходимые знания и навыки для выполнения на современном уровне научно-исследовательских работ по созданию нанокomпозитных материалов и устройств на основе наноразмерных форм углерода, проведению структурных и физико-химических исследований, связанных с изучением свойств таких материалов, используемых в различных областях науки и техники.

3. Трудоемкость дисциплины в зачётных единицах с указанием количества академических часов, выделенных на контактную работу обучающегося с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу.

Семестр	Общий объем	Виды учебных занятий (в часах)				Промежуточная аттестация (в часах)				
		Контактная работа обучающихся с преподавателем			Самостоятельная работа, не включая период сессии	Самостоятельная подготовка к промежуточной аттестации	Контактная работа обучающихся с преподавателем			
		Лекции	Практические занятия	Лабораторные занятия			Консультации	Зачет	Дифференцированный зачет	Экзамен
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
1	72	16	16		18	18	2			2
Всего 72 часа / 2 зачётных единицы, из них: - контактная работа 36 часов										
Компетенции ПК-1										

Реализация дисциплины предусматривает практическую подготовку при проведении следующих видов занятий, предусматривающих участие обучающихся в выполнении отдельных элементов работ, связанных с будущей профессиональной деятельностью: лекции, практические занятия, контрольные работы, консультации, самостоятельная работа магистранта и её контроль преподавателями с помощью заданий, экзамен.

Программой дисциплины предусмотрены следующие виды контроля:

Текущий контроль успеваемости: контрольные вопросы на знание материала предыдущей лекции, домашние задания, контрольная работа, задания для самостоятельного решения.

Промежуточная аттестация: экзамен.

Общая трудоемкость рабочей программы дисциплины составляет 2 зачетных единицы:

- занятия лекционного типа – 16 часов;
- практические занятия – 16 часов;
- самостоятельная работа в течение семестра, не включая период сессии – 18 часов;
- промежуточная аттестация (подготовка к сдаче экзамена, консультация и экзамен) – 24 часа.

Объём контактной работы обучающегося с преподавателем (занятия лекционного типа, практические занятия, групповые консультации, экзамен) составляет 36 часов.

4. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведённого на них количества академических часов и видов учебных занятий.

Дисциплина «Нанотрубки, фуллерены, графен» представляет собой полугодовой курс, читаемый в магистратуре физического факультета НГУ в осеннем семестре 1 курса. Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 зачетные единицы, 72 академических часа.

№ п/п	Раздел дисциплины	Неделя семестра	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу студентов и трудоемкость (в часах)				Промежуточная аттестация (в часах)
			Всего	Аудиторные часы		Сам. работа во время занятий (не включая период сессии)	
				Лекции	Практические занятия		
1	2	3	4	5	6	7	8
1.	Элемент углерод. Строение атома углерода. Изотопы углерода. Нахождение в природе. Радиоуглеродный анализ. Типы гибридизации. Энергии связей в углеродных материалах. Фазовые диаграммы углерода. Температура Дебая для различных модификаций углерода. Взаимосвязь размеров углеродных частиц с их устойчивостью в различных условиях.	1	4	1	1	2	
2	Графит и графитоподобные материалы. Структура графита и его физико-химические свойства. Анизотропия свойств. Синтетический углерод и графит. Дефектная структура графитоподобных материалов (дефекты упаковки, точечные, линейные, поверхностные, объемные дефекты, дефекты Стоуна — Уэйлса и др.). Карбонизация и графитизация. Межслойные соединения графита.	2	3	1	1	1	
3	Алмаз и алмазоподобные материалы. Природные и синтетические алмазы. Синтез	3	4	1	1	2	

	алмазов и взаимосвязь условий синтеза с фазовой диаграммой. Свойства и области применения алмазов и алмазоподобных материалов.						
4	Фуллерены. Гигантские фуллерены. Химия фуллеренов. Эндофуллерены. Фуллериты. Углерод луковичной структуры. методы получения и свойства. Области применения фуллереноподобных материалов.	4	3	1	1	1	
5.	Углеродные нанотрубки (УНТ). Типы и строение нанотрубок. Семейства однослойных и многослойных нанотрубок. Методы синтеза. Свойства индивидуальных нанотрубок. Проводимость, теплопроводность, механические свойства.	5	3	1	1	1	
6.	Графен и графеноподобные материалы. Физические и химические свойства. Методы получения графенов. Дефекты в графенах. Взаимосвязи электронных свойств графена и УНТ.	6	3	1	1	1	
7	Композиционные (композитные) материалы на основе УНТ. Взаимодействие УНТ – матрица композита. Работа адгезии материалов матрицы к УНТ. Перколяционные явления. Композиционные материалы на основе полимерных матриц. Методы получения, свойства и основные области применения.	7	3	1	1	1	
8	Композиционные материалы на основе металлических, оксидных и керамических матриц, модифицированных УНТ. Реакционноспособные интерфейсы. Взаимосвязи с фазовыми диаграммами на основе углерода и других элементов. Механизмы упрочнения композитов за счет введения УНТ. Методы получения, свойства и основные области применения.	8	3	1	1	1	
9	Перспективные области использования материалов на основе УНТ и графенов (1). Наномашины, космический лифт, энергетика (электро-химические устройства)	9	3	1	1	1	
10	Перспективные области использования материалов на основе УНТ и графенов (2). Электроника, сенсоры.	10	3	1	1	1	
11	Программы для молекулярного моделирования	11	3	1	1	1	
12	Структурные базы данных. База данных по неорганическим кристаллическим структурам (ICSD). Кембриджский структурный банк данных (CSD). Протеиновый банк данных (PDB)	12	3	1	1	1	

13	Построение и визуализация структур наноуглеродных материалов (Комплекс программ HyperChem, Nanotube Modeler, VESTA).	13	3	1	1	1	
14	Ознакомление с методами молекулярной механики (ММ) и основными методами квантово-химических расчетов (ab initio Хартри-Фока, DFT, полуэмпирические расчеты (SE) на примере комплекса программ HyperChem).	14	3	1	1	1	
15	Задачи по расчету энергии взаимодействия между молекулами (ММ), энергии сольватации, адсорбции молекул, расчеты энергии связи в простейших молекулах.	15	3	1	1	1	
16	Задачи по расчету колебательных, электронных спектров, изменения электронной структуры при адсорбции молекул на наноразмерные углеродные материалы.	16	3	1	1	1	
17	Самостоятельная подготовка к экзамену		18				18
18	Групповая консультация		2				2
19	Экзамен		2				2
Всего			72	16	16	18	24

Программа и основное содержание лекций (16 часов)

Модуль 1. Наноуглеродные материалы: строение, методы контроля состояния, свойства, области применения.

1. Элемент углерод. Строение атома углерода. Изотопы углерода. Нахождение в природе. Радиоуглеродный анализ. Типы гибридизации. Аллотропные формы углерода. «Фуллереновая революция» (Нобелевская премия!). Семейство углеродных наноматериалов. Фазовые диаграммы углерода. Изменение фазовой диаграммы с уменьшением размера углеродных частиц. Температура Дебая для различных углеродных фаз. Стабильность наноразмерных углеродных материалов. Основные методы контроля состояния углерода в материалах (Методы электронной микроскопии (просвечивающая, растровая), туннельная сканирующая микроскопия и микроскопия атомных сил, рентгенофазовый анализ, спектроскопия комбинационного рассеяния, инфракрасная микроскопия, рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия, электронная и рентгеновская спектроскопия, методы измерения удельной поверхности и др.). Цель данного раздела – познакомить студентов с

2. Графит и графитоподобные материалы. Структура графита и свойства. Синтетический углерод и графит. Дефектная структура графитоподобных материалов (дефекты упаковки, точечные, линейные, поверхностные, объемные дефекты, дефекты Стоуна — Уэйлса и др.). Карбонизация и графитизация. Аморфный углерод, сажи. Межслоевые соединения углерода. Терморасширенный графит. Формованный углерод, углерод/углеродные композиты. Стеклоуглерод. Углеродные волокна. Области применения графитоподобных материалов.

3. Алмаз. Природные и синтетические алмазы. Наноразмерные алмазы. Взрывные наноалмазы. Алмазные пленки, полученные методом газофазного осаждения в условиях. Диамантоиды. Графитизация алмаза. Свойства и области применения алмазоподобных материалов.

4. Фуллерены. Гигантские фуллерены. Химия фуллеренов. Эндофуллерены. Фуллериты. Химия фуллеренов. Углерод луковичной структуры. методы получения и свойства. Области применения фуллереноподобных материалов. Принципы самоорганизации в углеродных системах. Фрагменты фуллеренов, как частицы замкнутых углеродных нанотрубок. Области применения фуллеренов.

5. Графен. Физические и химические свойства. Методы получения графенов. Дефекты в графенах. Взаимосвязи электронных свойств графена и УНТ. Металлы и полупроводники – модификация свойств НУМ за счет химической модификации. Электронное строение нанотрубок по данным квантовой химии и π -электронных расчетов. Измерения электропроводности. Квантовые провода. Баллистический транспорт. Перенос электронного спина. Эффект Ааронова-Бома и магнетосопротивление. Индуцированная сверхпроводимость. Собственная сверхпроводимость. Орбитальный момент. Спин-орбитальное взаимодействие. Графеновая электроника.... Композиты.... Композиты на гибридных углеродных системах.

6. Углеродные нанотрубки (УНТ). Типы и строение нанотрубок. Семейства однослойных и многослойных нанотрубок. Свойства индивидуальных нанотрубок. Проводимость, теплопроводность, механические свойства. График Катауры. Методы получения УНТ. Некаталитические методы (дуговые УНТ, газовый разряд, сворачивание УНТ и др.). Каталитические методы получения УНТ, взаимосвязь с ростом нитевидных кристаллов. Основные стадии процесса, важность стадии зародышеобразования, принципы подбора катализаторов. Взаимосвязь с фазовыми диаграммами (М-С). Принципы подбора катализаторов и оптимизация процессов роста УНТ с заданными свойствами. Управляемый рост упорядоченных рядов углеродных нанотрубок. Длинные нити из нанотрубок. Самые тонкие нанотрубки.

7. Композиционные (композитные) материалы на основе УНТ. Методы получения композитов, модифицированных УНТ и др НУМ. Взаимодействие УНТ – матрица композита. Работа адгезии материалов матрицы к УНТ. Механизмы изменения механических свойств. Проводимость композитов (перколяция). Практические приложения УНТ 1. Композиционные материалы на основе полимерных матриц. Основная проблематика. Функционализация УНТ и взаимосвязь с работой адгезии УНТ к материалу матрицы. Методы введения УНТ в состав полимерных матриц: механическое смешение, экструзия из расплавов, осадительная коагуляция, *in situ* полимеризация и др., мастребатчи. Реологические свойства полимерных композитов, электропроводность, теплопроводность, термическая устойчивость. Упорядоченность и ориентация УНТ внутри полимерных матриц. Практические приложения.

8. Практические приложения УНТ 2. Композиционные материалы на основе металлических матриц. Возможные интерфейсы УНТ и металлических матриц. Механизмы упрочнения металлических композитов за счет введения УНТ. Взаимосвязь интерфейсов с фазовыми диаграммами М-С. Al-МУНТ - Zentalium (Bayer). Перспективы и ограничения. Практические приложения.

9. Практические приложения УНТ 3. Композиционные материалы на основе керамических матриц (оксидных и бескислородных). Возможные интерфейсы УНТ и керамических матриц. Взаимосвязь интерфейсов с фазовыми диаграммами С-керамика. Перспективы и ограничения. Практические приложения.

10. Перспективные области использования материалов на основе УНТ. Конструирование материалов на основе наноструктурированных форм углерода. Космический лифт, провода на основе УНТ, наномашин и т.п. – миф или реальность? УНТ в энергетике и практических приложениях. Принципы конструирования молекулярных транзисторов, диодов, логических элементов, ячеек памяти, нанорадиоприёмника и термоакустического громкоговорителя на пленках из нанотрубок, химических сенсоров, эмиссионных оптических и рентгеновских источников излучения, электромеханических преобразователей, солнечные батареи, аккумуляторы, топливные элементы, оптические приложения, очистка газов, мед- и биоприложения etc.

Программа практических занятий (16 часов)

Модуль 2. Моделирование свойств наноуглеродных материалов.

1. Программы для молекулярного моделирования. Построение и визуализация структур наноуглеродных материалов (Комплекс программ HyperChem, Nanotube Modeler, VESTA).
2. Структурные базы данных. База данных по неорганическим кристаллическим структурам (ICSD). Кембриджская структурная база данных (CSD). Протеиновый банк данных (PDB)

3. Ознакомление с методами расчета свойств молекулярных моделей. Метод молекулярной механики (ММ), основные типы квантово-химических расчетов (ab initio Хартри-Фока, DFT, полуэмпирические расчеты (ПЭР) на примере комплекса программ HyperChem, MOPAC, информация о пакетах квантово-химических программ GAUSSIAN, VASP, Quantum Espresso).

4. Задачи по расчету энергии взаимодействия между молекулами (ММ, ПЭР), энергии сольватации, адсорбции молекул, расчеты энергии связи в простейших молекулах.

5. Задачи по расчету колебательных, электронных спектров, изменения электронной структуры при адсорбции молекул на наноразмерные углеродные материалы.

Самостоятельная работа студентов (36 часов)

Перечень занятий на СРС	Объем, час
Подготовка к практическим занятиям.	6
Подготовка к контрольным работам	6
Изучение теоретического материала, не освещаемого на лекциях	6
Подготовка к экзамену	18

5. Перечень учебной литературы.

1. Харрис П. Углеродные нанотрубы и родственные структуры. Новые материалы XXI века / Петер Харрис ; пер. с англ. под ред. и с доп. Л. А. Чернозатонского Москва : Техносфера, 2003.- 335 с. (1 экз)
2. Харрис П. Углеродные нанотрубки : синтез, свойства и применение / Питер Харрис ; пер. с англ. под ред. Двуреченского А.В. ; пер.: Ефимов В.М. ; [Ин-т физики полупроводников им. А.В. Ржанова. Новосибирск : Офсет-ТМ, 2016 (1 экз)

6. Перечень учебно-методических материалов по самостоятельной работе обучающихся.

Самостоятельная работа студентов поддерживается следующими учебными пособиями:

1. Дьячков П. Н. Электронные свойства и применение нанотрубок, [Электронный ресурс] / 3-е изд. (эл.). — Электрон. текстовые дан. (1 файл pdf :491 с.). — М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2015. — (Нанотехнологии). — Систем. требования: Adobe Reader XI; экран 10». ISBN 978-5-9963-2639-6.
6. Деривативное электронное издание на основе печатного аналога: Электронные свойства и применение нанотрубок /П. Н. Дьячков. — М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2010. — 488 с. : ил.— (Нанотехнологии).—ISBN 978-5-9963-0154-6. (1 экз)

7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины.

Для освоения дисциплины используются следующие ресурсы:

- электронная информационно-образовательная среда НГУ (ЭИОС);
- образовательные интернет-порталы;
- информационно-телекоммуникационная сеть Интернет.

7.1 Современные профессиональные базы данных

1. Chemnet - официальное электронное издание Химического факультета
<http://www.chem.msu.ru/rus>
2. Справочно-информационный сайт по химии <http://www.alhimikov.net>

3. База данных по неорганическим кристаллическим структурам (ICSD, сетевая версия, лицензия закуплена ИК СО РАН)
4. Кембриджская структурная база данных (CSD, сетевая, лицензия закуплена РАН)
5. Протеиновый банк данных (PDB, <https://www.rcsb.org/>, свободный доступ)
6. Моделирование нанотрубок (Nanotube Modeler 1.7.3, ©JCrystalSoft 2015-2018)

7.2. Информационные справочные системы

Не используются.

8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине.

Для обеспечения реализации дисциплины используются аудитории, оборудованные всем необходимым для чтения лекций (доска, экран, компьютер, мультимедийный проектор), в том числе стандартный комплект программного обеспечения (ПО), включающий регулярно обновляемое лицензионное ПО Windows и MS Office.

Практические занятия проводятся на базе ИК СО РАН на основе договора о практической подготовке.

Персональные компьютеры с установленным лицензионным программным обеспечением:

- Комплекс программ для молекулярного моделирования HyperChem 8 (сетевая версия, приобретена ИК СО РАН);
- Vesta (свободно распространяемая программа);
- База данных по неорганическим кристаллическим структурам (ICSD, сетевая версия, лицензия закуплена ИК СО РАН)
- Кембриджская структурная база данных (CSD, сетевая, лицензия закуплена РАН).

9. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине.

Для реализации дисциплины используются специальные помещения:

1. Учебные аудитории для проведения занятий лекционного типа, практических занятий, курсового проектирования (выполнения курсовых работ), групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля, промежуточной и итоговой аттестации.

2. Помещения для самостоятельной работы обучающихся.

Учебные аудитории укомплектованы специализированной мебелью и техническими средствами обучения, служащими для представления учебной информации большой аудитории.

Помещения для самостоятельной работы обучающихся оснащены компьютерной техникой с возможностью подключения к сети "Интернет" и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду НГУ.

Для проведения занятий лекционного типа предлагаются следующие наборы демонстрационного оборудования и учебно-наглядных пособий:

- комплект лекций-презентаций по темам дисциплины.

Материально-техническое обеспечение образовательного процесса по дисциплине для обучающихся из числа лиц с ограниченными возможностями здоровья осуществляется согласно «Порядку организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья в Новосибирском государственном университете».

10. Оценочные средства для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине.

10.1 Порядок проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине

Текущий контроль

Текущий контроль осуществляется в ходе семестра путем проведения выборочных опросов и заслушивания сообщений, самостоятельно подготовленных магистрантами и доложенных на практических занятиях.

Оценка успеваемости магистранта при прохождении дисциплины «Нанокarbonные материалы» проводится путем 15-минутного тестирования на знание материала предыдущей лекции (на каждом занятии), сдачи домашних заданий и написания контрольных работ. В зависимости от результатов работы в течение семестра магистрант имеет право на получение оценки (4 – хорошо) «автоматом» на основании бально-рейтинговой системы.

Для этого он должен:

- в ходе прохождения дисциплины посетить не менее 70 % занятий;
- написать на положительные оценки две контрольные работы;
- активность на практических занятиях и решение домашних заданий.

Промежуточная аттестация по дисциплине проводится в виде экзамена.

Промежуточная аттестация

Освоение компетенций оценивается согласно шкале оценки уровня сформированности компетенции. Положительная оценка по дисциплине выставляется в том случае, если заявленная компетенция ПК-1 сформирована не ниже порогового уровня.

Окончательная оценка работы студента в течение семестра происходит на экзамене. Экзамен проводится в конце семестра в экзаменационную сессию по билетам в устной форме. Вопросы билета подбираются таким образом, чтобы проверить уровень сформированности компетенции ПК-1.

Вывод об уровне сформированности компетенций принимается преподавателем. Каждый вопрос билета оценивается от 0 до 5 баллов. Положительная оценка ставится, когда все компетенции освоены не ниже порогового уровня. Оценки «отлично», «хорошо», «удовлетворительно» означают успешное прохождение промежуточной аттестации.

Соответствие индикаторов и результатов освоения дисциплины

Таблица 10.1

Индикатор	Результат обучения по дисциплине	Оценочные средства
ПК 1.1 Применяет специализированные знания в области физики при решении конкретных задач в области научных исследований в соответствии с профилем подготовки в зависимости от специфики объекта исследования.	Знать основные типы аллотропных модификаций углерода и нанокarbonных материалов, методы их получения и свойства, взаимосвязи между их строением и физико-химическими свойствами.	Проведение контрольных работ, тестирование, экзамен

<p>ПК 1.2 Выбирает наиболее эффективные методы решения конкретных задач в области научных исследований в соответствии с профилем подготовки в зависимости от специфики объекта исследования.</p>	<p>Уметь предсказывать и объяснять особенности свойств материалов на основе наноразмерных углеродных модификаций, планировать и проводить структурные и физико-химические исследования, связанные с изучением свойств, а также с разработкой таких материалов, используемых в различных областях науки и техники.</p> <p>Владеть представлениями об основах моделирования свойств наноуглеродных материалов на основе молекулярных моделей, их построения с использованием структурных баз данных, и исследования свойств с использованием квантово-химических методов, и молекулярной механики.</p>	<p>Проведение контрольных работ, тестирование, экзамен</p>
---	--	--

10.2 Описание критериев и шкал оценивания индикаторов достижения результатов обучения по дисциплине «Наноуглеродные материалы: нанотрубки, фуллерены, графен».

Таблица 10.2

Критерии оценивания результатов обучения	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций)	Уровень освоения компетенции			
		Не сформирован (0 баллов)	Пороговый уровень (3 балла)	Базовый уровень (4 балла)	Продвинутый уровень (5 баллов)
1	2	3	4	5	6
Полнота знаний	ПК 1.1	Уровень знаний ниже минимальных требований. Имеют место грубые ошибки.	Демонстрирует общие знания базовых понятий по темам/разделам дисциплины. Допускается значительное количество негрубых ошибок.	Уровень знаний соответствует программе подготовки по темам/разделам дисциплины. Допускается несколько негрубых/несущественных ошибок. Не отвечает на дополнительные вопросы.	Уровень знаний соответствует программе подготовки по темам/разделам дисциплины. Свободно и аргументированно отвечает на дополнительные вопросы.
Наличие умений	ПК 1.2	Отсутствие минимальных умений. Не умеет решать стандартные задачи. Имеют место грубые ошибки.	Продемонстрированы частично основные умения. Решены типовые задачи. Допущены негрубые ошибки.	Продемонстрированы все основные умения. Решены все основные задания с негрубыми ошибками или с недочетами.	Продемонстрированы все основные умения. Решены все основные задания в полном объеме без недочетов и ошибок.

Наличие навыков (владение опытом)	ПК 1.2	Отсутствие владения материалом по темам/разделам дисциплины. Нет навыков в решении стандартных задач. Наличие грубых ошибок.	Имеется минимальный набор навыков при решении стандартных задач с некоторыми недочетами.	Имеется базовый набор навыков при решении стандартных задач с некоторыми недочетами.	Имеется базовый набор навыков при решении стандартных задач без ошибок и недочетов. Продемонстрированы знания по решению нестандартных задач.
-----------------------------------	--------	--	--	--	---

10.3 Типовые контрольные задания и материалы, необходимые для оценки результатов обучения

Перечень контрольных вопросов, использованных для тестирования:

- Основные аллотропные модификации углерода
- Переносчики заряда в углеродных материалах
- Фазовая диаграмма углерода
- Причины анизотропии свойств графита
- Сравнение электропроводности углеродных материалов с металлами
- Каков тип проводимости в трубке (m,n)? – индексы выбираются произвольно
- Типы дефектов в графеноподобных материалах
- Изменение теплоемкости графита, температура Дебая графита
- Влияние строения наполнителей в композитах на порог перколяции
- Изменение энергии связи C-C в ацетилене, этилене, этане, графите, графене, нанотрубках
- Причины существования графика Катауры
- Природа носителей заряда в графене, нанотрубках, графите
- Природа баллистической проводимости
- Что такое «конус Дирака»?
- Изменение электронного строения при переходе от однослойного графена к двухслойному.

Перечень заданий к контрольной работе к модулю №2 «Практические занятия – «Моделирование свойств наноуглеродных материалов»:

1. Построить фрагмент частицы окиси графена. Рассчитать ИК-спектры функциональных групп (метод РМЗ), сравнить с литературными данными. (Оформить в виде таблицы и рисунков).
2. Представить структуры графеновых лент, получаемых при окислительном «разрезании» однослойных нанотрубок (с индексами m,m и m,0, диаметром до 14 Å). Для фрагментов с ограниченной длиной рассчитать и представить изменение мод колебаний в зависимости от ширины наноленты (nanoribbon).
3. На основании построения моделей ОУНТ с введенными в них молекулами коронена (не берите больше 5-ти) показать влияние диаметра ОУНТ на расположение молекул коронена внутри УНТ (14, 17, 20 нм, метод ММ). Каков минимальный диаметр ОУНТ, в которой может адсорбироваться молекула коронена?
4. Оценить адсорбционную емкость фуллереновых сфер (C₆₀, C₁₈₀, C₂₄₀) для молекул азота (N₂). Для критических N₂ построить график изменения энергии напряжения углеродного каркаса.
5. Оценить энергии связи различных групп: >C-COOH, >C-OH в зависимости от размеров ароматического фрагмента (фенил, нафтил, антрацен, коронен, Ar 19) и изменение их колебательных спектров (РМЗ)

6. Рассчитать энергию связывания молекул додецилсульфата натрия на ОУНТ разного диаметра 14, 20, 25 А для двух видов ориентации молекул ПАВ – продольной и поперечной.
7. Рассчитать изменение ширины запрещенной зоны для графеновых фрагментов разного размера (бензол, наталин, антрацен, коронен, и т.д. симметрия C_{6v} (PM3)).
8. Рассчитать энергию связывания молекул Triton X100 на ОУНТ разного диаметра 14, 20, 25 А для двух видов ориентации молекул ПАВ – продольной и поперечной.
9. Оценить адсорбционную емкость ОУНТ для молекул азота в гр N2/гр ОУНТ в зависимости от диаметра ОУНТ (10, 14, 18 А)

Перечень задач для домашних заданий:

1. Оценить энергию появления дефектов Стоун-Велс с использованием ПЭ метода PM3 (использовать фрагмент с 19 ароматическими циклами). Сравнить с литературными данными.
2. Построить модель интеркалята КСб и сравнить энергию связывания атома калия в интеркаляте и межслойном пространстве пучка их трех ОУНТ. Оценить возможность существования таких фрагментов.
3. Оценить энергии связи различных групп: -COOH, OH в зависимости от размеров алмазного фрагмента (адамantan, и C_n) и изменение их колебательных спектров (PM3)

Перечень задач и вопросов на практических занятиях:

Задание №1 (10 баллов)

Построение моделей однослойных углеродных нанотрубок определенной хиральности. предсказание их свойств (тип электропроводности, диаметр).

Построение моделей многослойных углеродных наотрубок на основе моделей однослойных нанотрубок

Построение моделей графенов, наноалмазов, фуллеренов, углерода луковичной структуры.

Построение моделей функционализированных НУМ

Задание № 2 (10 баллов)

Расчет колебательных, оптических спектров моделей НУМ

Расчеты энергии адсорбции различных молекул (например, ПАВ, молекул растворителей, газов) на поверхности НУМ с использованием методов молекулярной механики и полуэмпирических квантово-химических расчётов (пакет MORAC).

Расчет адсорбционной ёмкости углеродных нанотрубок по отношению к различным молекулам методами молекулярной механики

Оценка энергии связи в различных НУМ с использованием полуэмпирических расчетов в рамках пакета программ HyperChem и MORAC.

Контрольная работа по заданиям № 1 и № 2 с оформлением результатов по ГОСТ 7.32-2001 («Отчёт о научно-исследовательской работе») -20 баллов

Задание № 3 (30 баллов)

Подготовка литературного обзора в области синтеза, исследования свойств или применения НУМ (оформляется по ГОСТ 7.32-2001 «Отчёт о научно-исследовательской работе», не менее 30 источников).

или

Небольшое макетное исследование свойств НУМ с использованием физического(их) метода(ов), построением моделей и расчетом их свойств, сопоставление результатов расчета с экспериментом. (оформляется по ГОСТ 7.32-2001 «Отчёт о научно-исследовательской работе»)

Перечень вопросов, выносимых на экзамен.

Каждый из билетов содержит два вопроса по различным разделам модуля №1.

Билет №1.

1. Фазовые диаграммы углерода. Влияние размера углеродных частиц на их устойчивость. Аллотропные модификации углерода.
2. Каталитические методы получения УНТ, взаимосвязь с ростом нитевидных кристаллов. Теория зародышеобразования, механизм роста УНТ и нитевидных нанокристаллов.

Билет №2.

1. Типы и строение нанотрубок. Семейства однослойных и многослойных нанотрубок.
2. Возможные интерфейсы УНТ и окисных керамических матриц. Взаимосвязь строения интерфейсов с фазовыми диаграммами «С-элементы керамики».

Билет №3.

1. Структура графита и свойства. Синтетический углерод и графит. Типы дефектов в графитоподобных материалах. Анизотропия свойств в графитоподобных материалах, взаимосвязь с их строением.
2. Сравнительный анализ электронного строения нанотрубок и графена. Взаимосвязи и различия электронных свойств графена и УНТ. Проводимость графеноподобных материалов и УНТ –модификация их свойств за счет химической модификации.

Билет №4.

1. Фуллерены. Гигантские фуллерены. Химия фуллеренов. Эндофуллерены. Электронная структура.
2. Принципы работы электрохимических устройств на основе УНТ (суперконденсаторы, литий-ионные аккумуляторы).

Билет № 5.

1. Процессы карбонизации и графитизации углеродных материалов, взаимосвязи с температурой Дебая для графитоподобных соединений. Аморфный углерод, сажи. Формованный углерод, углерод/углеродные композиты. Стеклоуглерод. Углеродные волокна. Области применения графитоподобных материалов.
2. Проводимость углеродных нанотрубок. Принципы конструирования молекулярных транзисторов, диодов, логических элементов, ячеек памяти, нанорадиоприёмника и термоакустического громкоговорителя на основе нанотрубок.

Билет № 6.

1. Электронное строение нанотрубок по данным квантовой химии и π -электронных расчетов. Измерения электропроводности. Квантовые провода. Баллистический транспорт. Перенос электронного спина. Эффект Ааронова-Бома и магнетосопротивление. Индуцированная сверхпроводимость. Собственная сверхпроводимость.
2. Методы получения композитов, модифицированных УНТ и др НУМ. Взаимодействие УНТ – матрица композита. Работа адгезии материалов матрицы к УНТ. Механизмы изменения механических свойств. Проводимость композитов (перколяция)

Форма экзаменационного билета представлена на рисунке

<p>МИНОБРНАУКИ РОССИИ</p> <p><i>Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Новосибирский национальный исследовательский государственный университет» (Новосибирский государственный университет, НГУ)</i></p> <p>Физический факультет</p>
<p>ЭКЗАМЕНАЦИОННЫЙ БИЛЕТ № _____</p> <p>1. 2. 3.</p> <p>Составитель _____ /Ф.И.О. преподавателя/ (подпись)</p> <p>« ____ » _____ 20 ____ г.</p>

Оценочные материалы по промежуточной аттестации, предназначенные для проверки соответствия уровня подготовки по дисциплине требованиям СУОС, хранятся на кафедре-разработчике РПД в печатном и электронном виде.

**Лист актуализации рабочей программы
дисциплины «Наноклеродные материалы: нанотрубки, фуллерены, графен»
по направлению подготовки 03.04.02 Физика
Профиль «Общая и фундаментальная физика»**

№	Характеристика внесенных изменений (с указанием пунктов документа)	Дата и № протокола Учёного совета ФФ НГУ	Подпись ответственного