Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Новосибирский государственный технический университет»
Кафедра иностранных языков технических факультетов

Паспорт экзамена

по дисциплине «Иностранный язык»,

3 семестр

1. Структура экзамена

Письменная часть

1.Написание аннотации

2.Письменный перевод с иностранного на русский язык со словарем

Устная часть (билет)

1.Устное описание графика/таблицы/диаграммы

2.Устное реферирование на иностранном языке

2. Методика оценки

Экзамен проводится в письменной и устной форме по билетам.

Письменная часть включает:

- написание аннотации к научной статье по теме исследования магистранта (п. 6);
- выполнение письменного перевода с иностранного на русский язык со словарем профессионально-ориентированного текста объемом 1500 печатных знаков (п. 7).

Устная часть включает ответы на вопросы билета.

Билет состоит из 2 вопросов:

- первый вопрос включает устное описание графика/таблицы/диаграммы, отражающей результаты исследования (п. 8);
- второй вопрос включает устное реферирование на иностранном языке профессионально-ориентированного текста объемом 2000 печатных знаков (п. 9).

Таким образом, проверяются результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с установленными в программе индикаторами достижения компетенций.

Преподаватель вправе задавать студенту уточняющие и дополнительные вопросы по теме аннотируемой и/или реферируемой статьи, в рамках содержания статьи.

Форма экзаменационного билета

НОВОСИБИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ
Факультет РЭФ
Билет № _____
к экзамену по дисциплине «Иностранный язык»

Вопрос 1. Опишите устно график/таблицу/диаграмму.
Вопрос 2. Прочитайте текст и подготовьте устный реферат на иностранном языке.

Утверждаю: зав. кафедрой _____ доцент, Бочкарев А. И.
(подпись)
_____ (дата)

3. **Критерии оценки результатов обучения, соотнесенных с уровнями освоения индикаторов достижения компетенций**

Вид задания	**Уровень (в баллах)**			
	Неудовлетвори-тельный	**Пороговый**	**Базовый**	**Продвинутый**
Письменная часть				
«Написание аннотации»	< 6	8	10	12
«Письменный перевод со словарем»	< 4	6	7	8
Устная часть (билет)				
Вопрос 1 «Описание графика»	< 6	8	10	12
Вопрос 2 «Устное реферирование»	< 4	6	7	8
Итого по всем заданиям	**< 20**	**28**	**34**	**40**

Ответ на экзамене засчитывается на **продвинутом** уровне, если студент:
- выполняет написание аннотации и предоставляет текст, который удовлетворяет следующим требованиям: текст аннотации соответствует структуре жанра аннотации к научной статье; клишированные конструкции соответствуют научному стилю и письменной разновидности жанра, языковые средства соответствуют стилю письменной научной речи; диапазон используемых лексических и грамматических единиц широк;
- выполняет письменный перевод, который адекватен смысловому содержанию первоисточника;
- при устном ответе на первый вопрос экзаменационного билета демонстрирует умение в описании графика/таблицы/диаграммы, описание адекватно отражает содержание

представленной графически информации, студент использует речь, характеризующуюся широким диапазоном грамматических и лексических структур, их использует корректно; использует клишированные конструкции, соответствующие научному стилю и устной разновидности речи;
- при устном ответе на второй вопрос экзаменационного билета демонстрирует умение в реферировании, представляя устный реферат, содержание и структура которого полностью соответствуют жанру информативного реферата, использует языковые средства соответствующие стилю научной речи и устной разновидности жанра, употребляет грамматические, лексические и синтаксические трансформации, общенаучную лексику и адекватную терминологию, использует широкий диапазон средств связи, употребляет лексико-грамматических единицы корректно;
- сумма баллов по всем заданиям (письменная и устная часть) составляет *от 35 до 40 баллов* включительно.

Совокупность результатов обучения по дисциплине и соотнесенных с ними индикаторов достижения компетенций не содержит пробелов. Установленные в программе компетенции сформированы в полном объеме. Оценка составляет *от 35 до 40 баллов*.

Ответ на экзамене засчитывается на **базовом** уровне, если студент:
- выполняет написание аннотации и предоставляет текст, который в основном соответствует структуре жанра аннотации к научной статье; некоторые структурные компоненты аннотации раскрыты не полностью или наблюдается незначительное нарушение логичности расположения структурных компонентов; редко встречаются клишированные конструкции, не соответствующие стилю письменной научной речи или данному жанру; диапазон используемых лексических и грамматических единиц достаточно широк; присутствует небольшое количество лексических, грамматических и орфографических ошибок, не влияющих на понимание содержания;
- выполняет письменный перевод, который полный, адекватный смысловому содержанию первоисточника и содержит 2–3 смысловые неточности;
- при устном ответе на первый вопрос экзаменационного билета демонстрирует умение в описании графика/таблицы/диаграммы, которое в основном отражает содержание представленной графически информации, использует речь, характеризующуюся широким диапазоном грамматических и лексических структур, допускает небольшое количество лексических и грамматических ошибок, не влияющих на понимание содержания; использует клишированные конструкции, соответствующие научному стилю и устной разновидности речи.
- при устном ответе на второй вопрос экзаменационного билета демонстрирует умение в реферировании, представляя устный реферат содержание и структура которого в основном соответствуют жанру информативного реферата, и адекватно отражающего основную идею первоисточника, студент использует клишированные конструкции, не соответствующие стилю устной научной речи или данному жанру, использует приемы обобщения и перефразирования, допускает небольшое количество лексических, грамматических ошибок, не влияющих на понимание содержания;
- сумма баллов по всем заданиям (письменная и устная часть) составляет *от 29 до 34 баллов* включительно.

Совокупность результатов обучения по дисциплине и соотнесенных с ними индикаторов достижения компетенций содержит несущественные пробелы. Установленные в программе компетенции сформированы на базовом уровне. Оценка составляет *от 29 до 34 баллов*.

Ответ на экзамене засчитывается на **пороговом** уровне, если студент:
- выполняет написание аннотации и предоставляет текст, который только частично соответствует структуре жанра аннотации к научной статье; содержание структурных

компонентов раскрыто частично, большое количество клишированных конструкций не соответствует стилю письменной научной речи и данному жанру; наблюдается частичное несоответствие некоторых лексических и грамматических единиц стилю письменной научной речи, диапазон используемых лексических и грамматических единиц ограничен; наблюдается небольшое количество лексических и грамматических ошибок, мешающих пониманию содержания текста аннотации.
- выполняет неполный (2/3 – 1/2 всего текста) письменный перевод, допустил 2–3 ошибки в передаче смыслового содержания;
- при устном ответе на первый вопрос экзаменационного билета демонстрирует описание графика/таблицы/диаграммы, которое лишь частично отражает содержание представленной графически информации, использует ограниченный диапазон грамматических и лексических структур, допускает небольшое количество лексических, грамматических ошибок, влияющих на понимание содержания; использует клишированные конструкции, соответствующие научному стилю и устной разновидности речи.
- при устном ответе на второй вопрос экзаменационного билета демонстрирует умение в реферировании, представляя устный реферат, содержание и структура которого частично соответствуют жанру информативного реферата, и частично отражающего основную идею первоисточника, наблюдается не значительное нарушение логики первоисточника, в речи студента использует в речи лексических и грамматических единицы, не соответствующие стилю устной научной речи, использует ограниченный диапазон лексических и грамматических единиц, студент употребляет заученные фрагменты текста первоисточника, не использует приемы обобщения и перефразирования, допускает небольшое количество лексических и грамматических ошибок, влияющих на понимание содержания;
- сумма баллов по всем заданиям (письменная и устная часть) составляет *от 20 до 28 баллов* включительно.

Совокупность результатов обучения по дисциплине и соотнесенных с ними индикаторов достижения компетенций содержит пробелы. Установленные в программе компетенции сформированы на пороговом уровне. Оценка составляет *от 20 до 28 баллов*.

Ответ на экзамене считается **неудовлетворительным (**ниже порогового уровня), если студент:
- выполняет написание аннотации и предоставляет текст, который не соответствует структуре жанра аннотации к научной статье, в котором диапазон используемых лексических и грамматических единиц ограничен, допущено большое количество лексических и грамматических ошибок, влияющих на понимание;
- выполняет неполный (менее 1/2 всего текста) письменный перевод, частично адекватный смысловому содержанию первоисточника, допустил более 3 ошибок при передаче смыслового содержания;
- при устном ответе на первый вопрос экзаменационного билета демонстрирует описание графика/таблицы/диаграммы, которое не отражает содержание представленной графически информации, в котором диапазон используемых грамматических и лексических структур ограничен, присутствует большое количество лексических, грамматических ошибок, влияющих на понимание содержания.
- при устном ответе на второй вопрос экзаменационного билета не демонстрирует умение в реферировании, поскольку содержание и структура представленного устного реферата лишь частично соответствуют жанру информативного реферата, не отражена основная идея первоисточника, наблюдается нарушение логики первоисточника; студент в речи использует лексические и грамматические единицы, не характерные для стиля устной научной речи, использует ограниченный диапазон лексических и грамматических единиц, не использует приемы обобщения и перефразирования, употребляет заученные фрагменты

текста первоисточника, допускает большое количество лексических и грамматических ошибок, негативно влияющих на понимание;

- сумма баллов по всем заданиям (письменная и устная часть) составляет *менее 20 баллов*.

Совокупность результатов обучения по дисциплине и соотнесенных с ними индикаторов достижения компетенций содержит существенные пробелы. Установленные в программе компетенции не сформированы. Оценка составляет *менее 20 баллов.*

4. Шкала оценки

Экзамен считается сданным, если сумма баллов по всем заданиям (письменная и устная части) составляет от 20 до 40 баллов включительно. Сумма менее 20 баллов признается неудовлетворительным результатом промежуточной аттестации по дисциплине.

В общей оценке по дисциплине экзаменационные баллы учитываются в соответствии с правилами балльно-рейтинговой системы, установленными в НГТУ.

5. **Вопросы к** экзамену **по дисциплине «**Иностранный язык для научно-исследовательской деятельности**»**

Тематика профессионально-ориентированных текстов (реферируемых и/или аннатируемых научных статей) соответствует направлению подготовки магистранта.

6. Примерный текст научной статьи для написания аннотации

Прочитайте статью и напишите аннотацию к ней.

HIGH-PERFORMANCE PERFLUORINATED POLYMER ELECTRET FILM FOR MICRO POWER GENERATION

Yoshihiko Sakane[1*], Yuji Suzuki[2], and Nobuhide Kasagi[2]
[1]Chemicals Company, Research & Development Div., Asahi Glass Co., Ltd.
Hazawa-cho 1150, Kanagawa-ku,Yokohama, Kanagawa, 221-8757, JAPAN
[2]Department of Mechanical Engineering, The University of Tokyo
7-3-1 Hongo, Bunkyo-ku, Tokyo, 113-8656, JAPAN

Abstract: The development of a new high-performance polymer electret material with high surface charge density, stability, and high thermal resistibility of electric charge was studied. Previously, we found that MEMS-friendly perfluorinated polymer CYTOP™ CTL-M (Asahi Glass Co., Ltd.) shows excellent electret properties. In the present study, it is reported that the electret property and the thermal stability of CYTOP™ electret are markedly improved by doping silane coupling reagent into polymer. The charge density of 1.5 mC/cm^2, which is 1.6 times larger than that of the undoped CYTOP™, has been obtained on 16 μm-thick film. In addition, the power generation of 0.585 mW, which is about twice of our previous data, has been achieved at a low seismic frequency of 20Hz.

Key words: Electret, Energy harvesting, Micro power generation, Perfluorinated polymer, CYTOP

1. INTRODUCTION

Recently, the micro power generation systems as the alternatives of conventional secondary batteries attracted much attentions. It is known that the devices applying to RFIDs and mobile sensor networks consume a low electrical power. The vibration-driven energy harvesting devices are proposed for these applications [1-3]. Since the frequency range of vibration existing in the environment is below a few tens of Hz, electret power generators should have higher performance than electromagnetic ones [4-8].

We recently reported that CYTOP™ CTL-M (Asahi Glass Co., Ltd.), MEMS-friendly amorphous perfluorinated polymer, can possess high surface charge density, which is stable enough for electret material [7,8]. We also found that up to 0.28 mW can be obtained with the CYTOP™ electret at an oscillation frequency as low as 20Hz. However, higher surface charge density is required for better performance, and charge stored in CTL-M becomes unstable at relatively low temperature. In the present study, a novel electret material based on CYTOP™ is proposed for higher surface charge density and thermal stability, and its electret properties are systematically investigated.

2. ELECTRET POWER GENERATOR

Figure 1 shows a schematic of the micro electret generator designed in our previous study [7]. When the in-plane vibration is generated, the seismic mass with the electret brings about a relative motion to the counter electrode on the bottom substrate. Thus, the amount of induced charge on the counter electrode is changed corresponding to the overlapping area. Consequently, electric current is generated in the external circuit. The seismic mass is supported by high-aspect-ratio soft springs made of Parylene [9], which enables large amplitude of vibration and low resonance frequency.

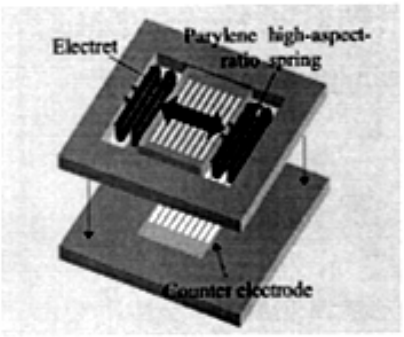


Fig. 1: Schematic of micro seismic electret power generator.

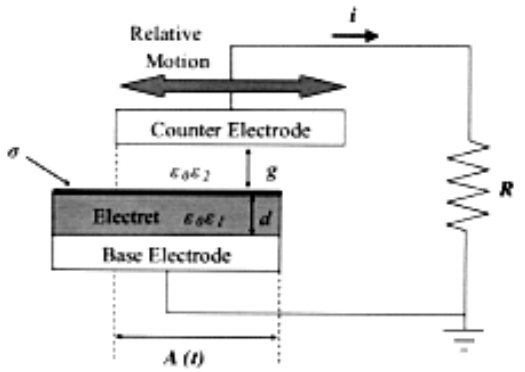


Fig. 2: Model of electret power generator.

Figure 2 shows a schematic of the simplified generator structure, where σ, *d*, *g*, and *A* are respectively the surface charge density, the thickness of electret, the gap between the electret and the counter electrode, and the overlapping area. Boland et al. [5] show that the maximum output power P_{MAX} is proportional to the squared surface charge density (σ^2), and is increased with the thickness of electret (*d*). On the other hand, the optimal external load R_{MAX} is independent of σ, but linearly dependent on *d* and *g*. P_{MAX} is also proportional to the time derivative of the overlapping area *dA(t)/dt*. Thus, the vibration frequency, the amplitude of vibration, and the number of poles should also have large impact on the generator performance.

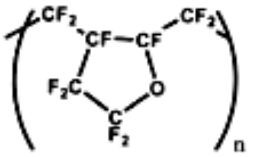
3. POLYMER ELECTRET MATERIAL

Various kinds of materials have been examined for electrets [10]. Among them, polymer dielectric materials, especially fluorinated polymers such as PTFE, are generally employed. Hsich et al. [11] use Teflon® AF (Du Pont) as the electret material for their MEMS microphone.

In our previous work [12], we found that CYTOP™ CTL-809M (Asahi Glass Co., Ltd.), which is amorphous perfluorinated polymer, can be also used for electrets. The candidates of dielectric for electret need to meet the following three requirements;

(a) Compatible with MEMS fabrication technique
(b) Easy to be formed into thick film
(c) Having high dielectric strength

CYTOP™ is compatible with MEMS fabrication process; it is soluble in perfluorinated solvents, and thus thick films can be obtained by multiple spin-coating. In addition, coated films can be patterned easily with photolithography process and O_2 plasma etching.



CTL-A : -COOH
CTX-S : $-CF_3$
CTL-M : $-CONH-C_3H_6-Si(OC_2H_5)_3$

Fig. 3: The molecular structure and the end groups of CYTOP™.

Tsutsumino et al. [7] found that the surface charge density of CYTOP™ is three times larger than that of Teflon® AF. Since power output of electret generator is proportional to the square of the surface charge density, electret generators with CYTOP™ can produce electricity nine times larger than generators with Teflon® AF.

The molecular structure of CYTOP™ is shown in Fig. 3. CYTOP™ is the perfluorinated polymer, so there are no hydrogen atom in the main chain, and that leads to unique properties as follows; (i) high chemical stability in any acids, alkalis, and organic solvents except for perfluorinated solvents, (ii) low surface energy (17 dyne/cm), (iii) high thermal stability (thermal decomposition temp is over 350 °C), (iv) low dielectric constant (2.1), (v) high volume resistivity (>10^{17}Ωcm). There are three different types of CYTOP™, which end groups are different respectively; the carboxylic acid type (CTL-A), trifluoromethyl type (CTL-S), and aminosilane type (CTL-M) [13].

To evaluate the performance of the electret material, we have measured temporal change of the surface charge density σ by using a surface voltmeter (Model279, Monroe Electronics). 16 -μm-thick CYTOP™ was spin-coated on 0.3-mm-thick copper substrate with area of 30x30 cm^2. The sample was charged by corona charging with -8 kV needle voltage for 3 minutes at 120 °C.

Figure 4 shows the surface charge density data obtained for CTL-S, CTL-A, CTL-M, and CTL-NMD, which is a new material developed in the present study. Samples were stored at 23 °C and 60 % humidity. This figure shows that 'pure' CYTOP™ CTL-S is the least stable, and the surface charge density is reduced to about 30% of its initial value in 1500 hours. On the other hand, small amount of functional end groups like

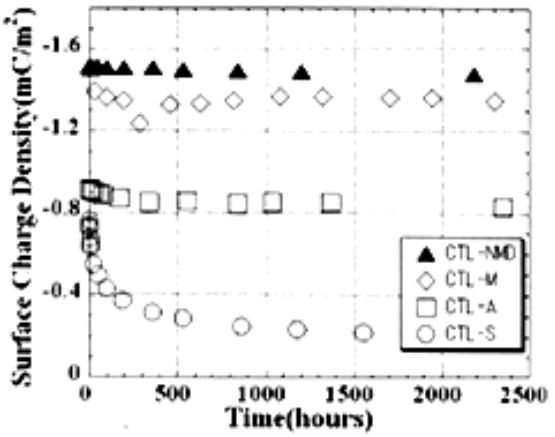


Fig. 4: Time trace of the surface charge density of Perfluorinated polymer electret films,CYTOP™ CTL-S, CTL-A, CTL-M and CTL-NMD.

carboxylic acid or aminosilane significantly enhance the electret performance; the surface charge density becomes higher, and the charge decay is suppressed. Especially, aminosilane end group (CTL-M) has the best performance to promote the surface charge density. To introduce more aminosilane into the CYTOP™ electret, we doped silane coupling reagent to CTL-A, accomplished the highest surface charge density of 1.5 mC/cm^2 (CTL-NMD)

To examine the thermal stability of charged electret, the open circuit thermally-discharge (TSD) measurement [14] has also been performed. Different TSD spectra peaks correspond to different charge trap mechanisms in dielectric materials [10, 14]; the peak corresponding to the dipole appears at the lowest temperature near the glass transition temperature (T_g=*108* ˚C). Peaks at the higher temperatures correspond to the surface and bulk traps. Therefore, TSD spectra are very useful for optimizing charging conditions and materials for more stable electrets.

The electret sample (e.g. copper substrate) and a facing probe were connected as shown in Fig.5, and heated up at the rate of 1 ˚C/min. Since the temperature increased, thermal energy was applied to electret and the trapped charges were released. The discharged current was measured with an electrometer (Model 6517A, Keithley Instruments) set into the circuit. As shown in Fig. 6, TSD spectra of CTL-S has a peak at 135 ˚C,

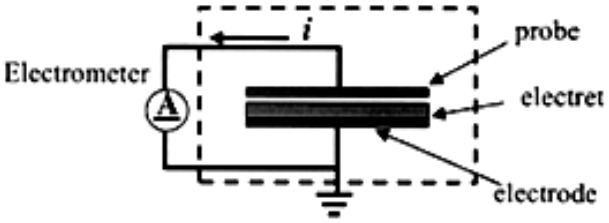


Fig. 5: Experimental setup of Thermally-stimulated-discharge (TSD) measurement.

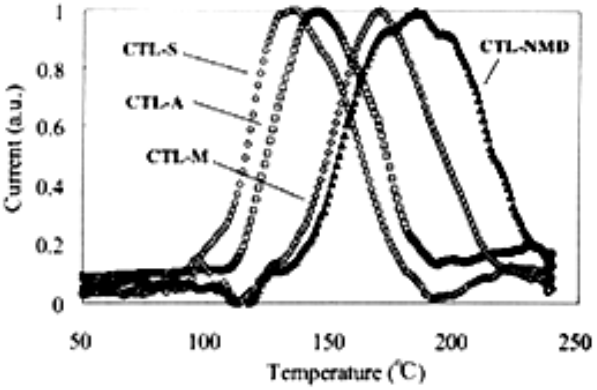


Fig. 6: Thermally-stimulated-discharge (TSD) spectra of CYTOP™ electret films.

which is the lowest among four samples examined. The peak shifted to higher temperature, when the functional end group is introduced into the chemical structure of CYTOP™. Especially, aminosilane promotes the thermal stability of trapped charge effectively, and the peak temperature of CTL-NMD TSD spectra has been improved to 185 ˚C, which is even higher than that of CTL-M and CTL-A. Therefore, not only the surface charge density, but also the thermal stability of charges can be improved with the doping of silane coupling reagent.

4. POWER GENERATION EXPERIMENT

Figure 7 shows the experimental setup for power generation, which consists of a patterned electret, a counter electrode, an alignment XYZ stage, and an electromagnetic shaker [7,8]. The electret and the counter electrode were microfabricated with standard lithography process. By using multiple spin coating technique, 16 μm-thick electret film was obtained after curing, followed by O_2 plasma etching for patterning.

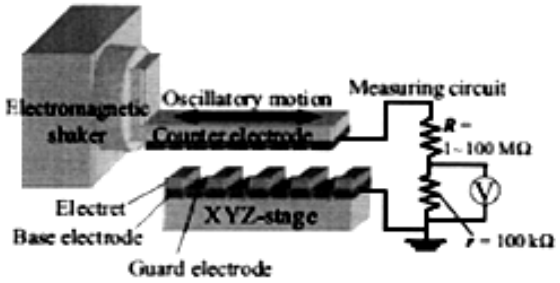


Fig. 7: Schematic of power generation experiment setup.

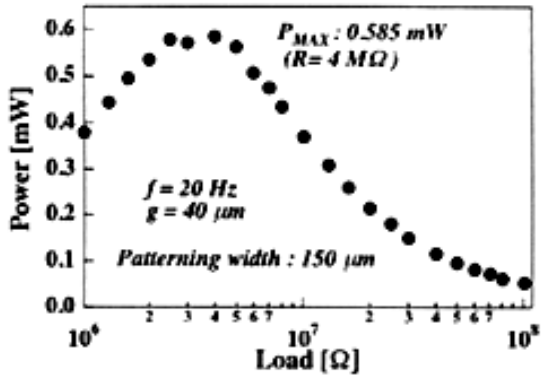


Fig. 8: Power output versus external load.

Finally, corona charging technique was applied to acquire surface potential of more than -550V. Total area of the electret was 20 x 20 mm^2 with an interdigital electrode configuration, where the line/space is 150 μm.

Figure 8 shows the output power with the CTL-M electret thus fabricated versus the external load for the oscillation amplitude of 1.2 mm_{p-p} at 20Hz. Peak power output of 0.595 mW, which is about twice of our previous data [8], has been obtained at the external load of 4 MΩ. Power generation experiment using the new electret material is now undertaken.

5. CONCLUSION

We examined MEMS-friendly perfluorinated polymer CYTOP™ with different functional end groups for electret generator applications through measurements of surface charge density and thermally-stimulated discharge. We have found that the aminosilane end group provides better surface charge density and thermal stability, and developed a novel electret material with the doping of silane coupling reagent. We also have obtained 0.59 mW at a low seismic frequency of 20Hz in our prototype power generator, which is about twice of our previous data.

ACKNOWLEDGMENT

We thank Dr. C. Kamezawa, and Messrs T. Tsutsumino and M. Edamoto for their extensive corporation for this research. This work is partially supported through Strategic Informetion and Communications R&D Promotion Programme (SCOPE) of JAPAN.

REFERENCE

[1] C. B. Williams, and R. B. Yates, *Sensors Actuators*, A, vol.52, pp. 8-11, 1996

[2] S. Roundy, P. K. Wright, and J. Rabaey, *Comp. Comm.*, vol. 26, pp. 1131-1144, 2003

[3] J. A. Paradiso, and T. Starner, IEEE Pervasive Comp., vol. 4, pp. 18-27, 2005

[4] Y. Tada, *IEEE Trans. Electrical Insulation*, vol. 21, pp. 457-464, 1986

[5] J. Boland, C.-H. Chao, Y. Suzuki, and Y.-C. Tai, *Proc. 16th IEEE Int. Conf. MEMS*, Kyoto, pp. 538-541, 2003

[6] J. S. Boland, J. D. M. Messenger, H. W. Lo, and Y.-C. Tai, *Proc. 18th IEEE MEMS 2005*, Miami, pp. 618-621, 2005

[7] T. Tsutsumino, Y. Suzuki, N. Kasagi, and Y. Sakane, *Proc. 19th IEEE MEMS 2006*, Istanbul, pp. 98-101, 2006

[8] T. Tsutsumino, Y. Suzuki, N. Kasagi, K. Kashiwagi, and Y. Morizawa, *Proc. PowerMEMS 2006*, Berkeley, pp. 279-282, 2006.

[9] Y. Suzuki, and Y.-C. Tai, *J. MEMS*, vol. 15, pp. 1364-1370, 2006

[10] G. M. Sessler, *"Electrets 3rd Edition,"* Laplacian Press, 1998

[11] W. H. Heisch, T. J. Yao, and Y.-C. Tai, *Int. Conf. Solidstate Sensors Actuators (Transducers '99)*, Sendai, pp. 1064-1067, 1999

[12] Y. Arakawa, Y. Suzuki, and N. Kasagi, *Proc. PowerMEMS 2004*, Kyoto, pp. 187-190, 2004

[13] *CYTOP™ Technical Bulletin*, ASAHI GLASS Co., LTD.

[14] H. Seggern, *J. Appl. Phys.*, vol. 50, pp. 2817-2821, 1979

7. **Примерный текст для письменного перевода**

Переведите текст на русский язык письменно со словарем

Nanotechnology

Regina Luttge, in Nano- and Microfabrication for Industrial and Biomedical Applications (Second Edition), 2016

4.3 Where Are We?

Trillions of nanosystems are packaged with ease in our body. Nature has mastered the assembly of nanosystems into workable machines through evolution. In the engineering sciences we can learn from nature, and use our findings as a source of inspiration for packaging artificial, higher assembled architecture devices. Of course, there is no competition between nature and engineering—it is synergy. Sometimes applying the concepts of nature and building from the bottom-up would simply take too much time and the top-down approach works better although additive manufacturing is on its way also to be explored in the nanoscale domain. In the next decade it is important that the engineering sciences deliver appropriate design rules for industry to justify investments in nanotechnology. This survey of design rules for nanoengineering must, and will be, clearly further supported by governmental incentives for creative research and development in this field. Based on such research incentives, the investment risk for industries can be further lowered, specifically in areas which have long development cycles, such as medicine and high-tech applications. Currently there are no clear solutions for novel products that require first appropriate packaging of nanodevices as such that they can interact within real-world devices.

Nanosystems and their design

Jeremy J. RamsdenJeremy J. Ramsden, in Nanotechnology (Second Edition), 2016

SUMMARY

Systems and nanosystems are defined. Nanotechnology implies many departures from traditional engineering practice. Regarding choice of materials, one should ultimately no longer be constrained to merely select suitable materials; rather materials with exactly the required properties can be specified and produced. Computation is much more intimately connected with nanotechnology than with larger scale technologies, because explicit and reliable simulation of complete systems is often possible. To cope with vastification, evolutionary computation offers a solution, vastly amplifying human capabilities (it can be considered as an “intelligence amplifier”, in the same way that muscular power is amplified by a traction engine).

With any nanosystem, it needs to be considered how its function can be made useful for human beings. Scaleout – massive parallelization – eliminates the barriers associated with traditional scaleup.

Any viable, integrated technological system requires standardization, first of vocabulary, than of the components used in constructing the artifacts of the technology.

Nanotechnology offers magnificent opportunities for creative design, possibly allowing a new era of innovation to nucleate and grow. Such growth will be driven not only by possibilities inherent in the technology but also by the fact that a far greater proportion of the population should be able to contribute than hitherto to conventional design and realization.

https://www.sciencedirect.com/topics/engineering/nanosystems

8. Примерное задание для описания графика

Устно опишите представленный график.

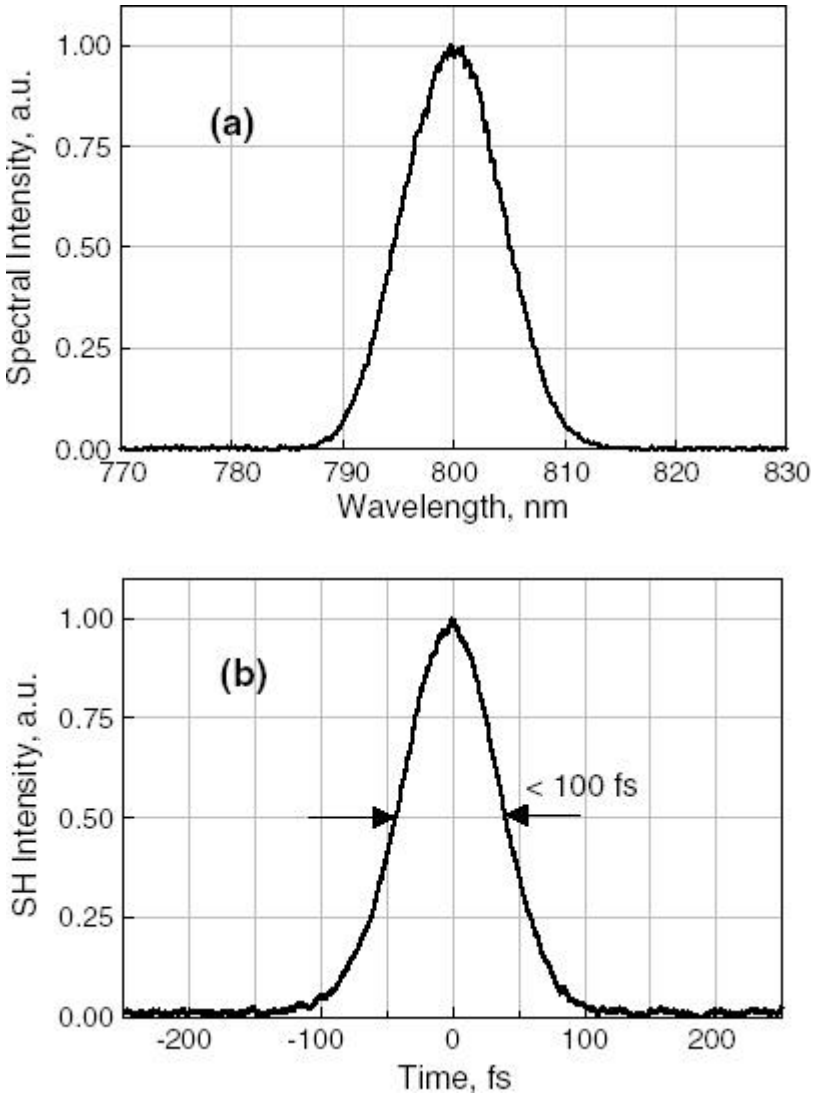


Figure 15. (a) Normalized optical spectrum and (b) an autocorrelation trace of a frequency-doubled soliton fibre laser. The conversion efficiency is about 50%.

9. Примерный текст для устного реферирования

Прочитайте текст и составьте устный реферат к тексту.

Computational Modelling of Nanoparticles

Florent Calvo, in Frontiers of Nanoscience, 2018

9.4.1 Structural phase diagrams of metal nanoparticles

One important property of nanosystems is their structure, which has a direct impact on properties essential for applications such as catalysis. Here we distinguish the detailed atomic arrangement between atoms, which notably contains information about the local coordination of the various atoms, from the more global shape of the nanoparticle. In large enough nanoparticles, the local order tends to the known bulk limit, and finite-size effects essentially consist of cutting the

nanoparticle from the bulk sample in such a way that the surface energies along the various axes are minimized. This so-called Wulff construction scheme [58] can be applied from the knowledge of the surface energies, typically borrowed from bulk data as well.

In contrast, the structure of very small clusters in the regime where each atom counts usually differ significantly from the bulk material, exceptions being known for ionic systems such as rocksalt nanoparticles [59]. From the theoretical perspective this is the realm of global optimization. For nanoparticles having several thousands of atoms global optimization is not achievable efficiently and the most direct experimental information usually available in this range, typically through electron microscopy, also consists of (projected) shapes. Such observations indicate that nanoparticles exhibit some particularly stable families of structures in which octahedral or pentagonal motifs are common, including decahedra, icosahedra, and truncated octahedra. Atoms in these families are distributed among shells, with individual shells having different proportions of surface exposures, in relation with the Wulff construction scheme.

If a potential energy surface for the element of interest is available and not too computationally involved, calculations over large nanoparticles can be conducted at least for these specific, highly symmetric structural families and trends can be extrapolated to even larger sizes. For a three-dimensional (3D) nanoparticle, the cohesion energy can notably be written as an expansion that reminds of the phenomenological laws discussed above for the melting temperature,

$$(14)\quad E_{coh}(N) = E_{\infty} + aN^{-1/3} + bN^{-2/3} + cN^{-1} + \cdots,$$

where E_{∞} denotes the bulk cohesion energy, a, b, and c energy coefficients that successively represent the contributions of surface, edge, and vertex atoms. In practice, these coefficients are determined from extrapolating the cohesion energies obtained for perfectly symmetric structures after local minimization. The relative stability of different structural families $\{\alpha\}$ can then be evaluated by comparing their extrapolated cohesion energies $E_{coh\alpha}(N)$.

https://www.sciencedirect.com/topics/engineering/nanosystems