

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

Аннотированная рабочая программа дисциплины
Физико-химия поверхности нанокompозитных систем

Направление подготовки
04.04.01 Химия

Магистерская программа
Фундаментальная и прикладная химия веществ и материалов

Квалификация (степень) выпускника

магистр

Форма обучения
очная

Томск – 2016

1. Код и наименование дисциплины Б1.В.ОД.6 Физико-химия поверхности нанокompозитных систем

2. Цель изучения дисциплины

Цель курса:

– ознакомить студентов с современными подходами к теоретическому и экспериментальному изучению структуры, физико-химических свойств и реакционной способности поверхностей твердых тел.

– освоение магистрантами разделов курса, необходимых им при выполнении научных исследований, в том числе: термодинамические, структурные и электронные свойства поверхности твердых тел, а также современные подходы к изучению физико-химических и функциональных свойств поверхности и процессов, протекающих при формировании поверхности нанокompозитных материалов с использованием комплекса физико-химических методов исследования.

3. Год и семестр обучения: 1 год, 1 семестр.

4. Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетных единицы, 108 часов, из которых 34 часа составляет контактная работа обучающегося с преподавателем (18 часов – занятия лекционного типа, 16 часов – занятия семинарского типа, 2 часа – групповые консультации, 4 часа – индивидуальные консультации) 68 часов составляет самостоятельная работа обучающегося.

5. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы

Формируемые компетенции (код компетенции, уровень (этап) освоения)	Планируемые результаты обучения по дисциплине
ПК-1, I способность проводить научные исследования по сформулированной тематике, самостоятельно составлять план исследования и получать новые научные и прикладные результаты	У (ПК-1) – I. Уметь: определять основную цель и формулировать задачи исследований в области физикохимии поверхности. В (ПК-1) – I. Владеть: способами оценки фундаментальной и практической значимости поставленных задач в области создания материалов с заданными свойствами поверхности.
ПК-2, I владеть теорией и навыками практической работы в избранной области химии	У (ПК-2) – I. Уметь: ориентироваться в вопросах определения термодинамических свойств границ раздела фаз. З (ПК-2) – I. Знать: теоретические основы процессов, протекающих на границе раздела фаз «газ/жидкость» и «газ/твердое тело». В (ПК-2) – I. Владеть: подходами к разработке методологии практической реализации задач в области создания материалов с заданными свойствами поверхности.
ПК-3, I готовность использовать современную аппаратуру при проведении научных исследований.	З (ПК-3) – I. Знать: основы физических методов исследования состава, структуры и адсорбционных свойств поверхности твердых тел.

СПК-2, I способность использовать в исследованиях и расчетах приобретенные знания о физических и химических процессах получения неорганических веществ и материалов, их анализе и прогнозировании свойств.	З (СПК-2) – I. Знать: классификацию дефектов кристаллического строения твердых тел; закономерности и механизмы образования дефектов; теоретическое описание и закономерности формирования упорядоченного адсорбированного слоя; кинетику поверхностных диффузионных процессов.
СПК-5, I способность планировать и решать проблемы термодинамики, кинетики и механизма сложных химических реакций, в том числе на границе раздела фаз.	У (СПК-5) – I. Уметь: разбираться в особенностях строения межфазных границ и кристаллической решетки твердых тел; проводить термодинамические расчеты для оценки величины поверхностной энергии твердых материалов различной природы; определять равновесную форму кристалла. В (СПК-5) – I. Владеть: навыками и подходами к конструированию материалов с заданными свойствами поверхности, необходимыми методиками и подходами к методологии исследования свойств поверхности нанокompозитных материалов.

6. Содержание дисциплины и структура учебных видов деятельности

6.1. Структура учебных видов деятельности

Наименование разделов и тем	Всего (час.)	Контактная работа (час.)			Самостоятельная работа (час.)
		лекции	семинары	консультации	
Поверхности раздела фаз	13	2	2	1	8
Кристаллическое строение твердых тел	23	4	4	1	14
Термодинамика поверхности твердых тел	24	4	4	2	14
Процессы на поверхности твердых тел	31	6	4	1	20
Электронная структура поверхности твердых тел	17	2	2	1	12
Итого	108	18	16	6	68

6.2. Содержание дисциплины

1. Поверхности раздела фаз

Определения. Условия существования. Поверхностное натяжение. Особенности строения поверхностей жидкостей и твердых тел. Механизм образования поверхности. Кромка и ее строение. Явления релаксации и реконструкции. Общая характеристика процессов, протекающих на поверхности.

2. Кристаллическое строение твердых тел

Кристаллографическая ориентация граней. Индексы Миллера. Классификация дефектов. Точечные дефекты. Термодинамика равновесного кристалла с точечными дефектами. Источники образования точечных дефектов. Примеси. Механизмы миграции точечных дефектов.

Линейные дефекты (дислокации). Типы дислокаций. Понятие экстраплоскости. Вектор Бюргерса и его свойства. Взаимодействие точечных и линейных дефектов. Атмосферы Коттрела. Движение дислокаций. Механизмы образования дислокаций. Двумерные дефекты. Понятие границ зерен и субзерен.

3. Термодинамика поверхности твердых тел

Поверхностное натяжение и поверхностное напряжение. Равновесная форма кристалла. Теорема Вульфа. Способы теоретической оценки поверхностной энергии. Поверхностная энергия кристаллов инертных газов, ионных кристаллов и металлов. Факторы, влияющие на величину поверхностной энергии. Экспериментальные методы оценки поверхностной энергии твердых тел.

4. Процессы на поверхности твердых тел

Адсорбция на границе раздела газ-твердое тело. Теория хемосорбции Ньюса-Андерсена. Взаимодействие адсорбат-адсорбент при хемосорбции: реконструкция, внедрение, сегрегация. Правила Саморджая. Способы определения элементарной ячейки поверхностных структур. Поверхностная диффузия. Карты адсорбционного потенциала поверхности на примере монокристалла Хе. Механизмы поверхностной диффузии.

Эпитаксия и поверхностная сегрегация. Поверхностная сегрегация. Теория Абрахама-Брандла. Экспериментальное исследование сегрегации. Эпитаксия. Классификация процессов эпитаксиального роста: механизм Фольмера-Вебера, механизм Франка-Ван дер Мерве, механизм Странски-Крастанова. Понятие псевдоморфизма.

5. Электронная структура поверхности твердых тел

Элементы зонной теории. Поверхностные уровни Тамма и Шокли. Распределение Ферми-Дирака. Уровень Ферми, как электрохимический потенциал (термодинамический подход). Влияние процессов адсорбции, сегрегации примесей, биографических дефектов на электронную структуру поверхности твердых тел.

6.3. Форма промежуточной аттестации: зачет

7. Ресурсное обеспечение

7.1. Рекомендуемая литература (основная)

1. Родулгин В.И. Физикохимия поверхности. – Долгопрудный: Издательский Дом «Интеллект», 2011 – 568 с.
2. Чоркендорф И., Наймантсведрайт Х. Современный катализ и химическая кинетика. – Долгопрудный: Издательский Дом «Интеллект», 2013 – 504 с.
3. Родунер Э. Размерные эффекты в наноматериалах пер. с англ. А. В. Хачояна; под ред. Р. А. Андриевского Москва: Техносфера, 2010. – 350 с.
4. Оура К., Лифшиц В.Г., Саранин А.А., Зотов А.В., Катаяма М. Введение в физику поверхности. – М.: Наука, 2006. – 490 с.
5. Суздаев И.П. Физико-химия нанокластеров, наноструктур и наноматериалов. – М.: Комкнига, 2006. – 529 с.
6. Фенелонов В.Б. Введение в физическую химию формирования супрамолекулярной структуры адсорбентов и катализаторов. – Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2002. – 413 с.

7.2 Рекомендуемая литература (дополнительная)

1. Праттон М. Введение в физику поверхности. – Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2000. – 256 с.

2. Адамсон А. Физическая химия поверхностей. М.: Мир, 1979. – 508 с.
3. Ковтуненко П.В. Физическая химия твердого тела. Кристаллы с дефектами. – М.: Высшая школа, 1993. – 352 с.
4. Новиков И.И. Дефекты кристаллического строения металлов. – М.: Metallurgia, 1975. – 208 с.
5. Киселев В.Ф., Крылов О.В. Электронные явления в адсорбции и катализе на полупроводниках и диэлектриках. – М.: Наука, 1979 – 234 с.
6. Полупроводники. – Под ред. Н.Б. Хеннея. – М.: Инostr. Лит-ра, 1962. – 667 с.
7. Розовский А.Я. Катализатор и реакционная среда. - М.: Наука, 1988. – 304 с.
8. Ван Бюррен. Дефекты в кристаллах. – М.: Инostr. Лит-ра, 1962. – 584 с.
9. Лариков Л.Н. Залечивание дефектов в металлах. – Киев: Наукова Думка, 1980. – 280 с.
10. Карнаухов А.П. Адсорбция. Текстура дисперсных и пористых материалов. Новосибирск: Наука, 1999. – 470 с.
11. Боресков Г.К. Катализ. Вопросы теории и практики. Новосибирск: Наука СО АН СССР, 1987. – 536 с.
12. Томас Дж., Томас У. Гетерогенный катализ. - М.: Мир, 1969. – 450 с.
13. Волькенштейн В.С. Электронная теория катализа. – М.: Химия, 1985. – 410 с.
14. Грязнов В.М., Орехова Н. Катализ благородными металлами. - М.: Наука, 1989. – 223 с.
15. Крылов О.В. Промежуточные соединения в катализе. – М.: Наука, 1989 – 402 с.
16. Крылов О.В. Катализ неметаллами. – Л.: Химия, 1965 – 240 с.

7.3. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети Интернет

1. Электронная Библиотека Диссертаций [Электронный ресурс] / Российская государственная библиотека. – Электрон. дан. – М., 2003. URL: <http://diss.rsl.ru/>
2. Электронно-библиотечная система Znanium.com [Электронный ресурс] / Научно-издательский центр Инфра-М. – Электрон. дан. – М., 2012. URL: <http://znanium.com/>
3. ScienceDirect [Electronic resource] / Elsevier B.V. – Electronic data. – Amsterdam, Netherlands, 2016. – URL: <http://www.sciencedirect.com/>
4. Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU [Электронный ресурс]. – Электрон. дан. – М., 2000. – URL: <http://elibrary.ru/defaultx.asp/>

8. Автор программы: Водянкина Ольга Владимировна, д-р хим. наук, профессор, заведующий кафедрой физической и коллоидной химии ХФ ТГУ.