

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ (НИ ТГУ)

Химический факультет



УТВЕРЖДАЮ:

И.о. декана химического факультета

_____ А.С. Князев

» августа 2022 г.

Рабочая программа дисциплины

Физико-химия поверхности нанокompозитных систем

по направлению подготовки

04.04.01 Химия

Направленность (профиль) подготовки:

«Фундаментальная и прикладная химия веществ и материалов»

Форма обучения

Очная

Квалификация

Магистр

Год приема

2022

Код дисциплины в учебном плане: Б1.О.В.ДВ.03.01

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель ОП

_____ А.С. Князев

Председатель УМК

_____ В.В. Хасанов

Томск – 2022

1. Цель и планируемые результаты освоения дисциплины

Цель: ознакомить студентов с современными подходами к теоретическому и экспериментальному изучению структуры, физико-химических свойств и реакционной способности поверхностей твердых тел, а также формирование следующих компетенций:

– ОПК-2. Способен анализировать, интерпретировать и обобщать результаты экспериментальных и расчетно-теоретических работ в избранной области химии или смежных наук.

– ПК-1. Способен планировать работу и выбирать адекватные методы решения научно-исследовательских задач в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках.

Результатами освоения дисциплины являются следующие индикаторы достижения компетенций:

ИОПК-2.1. Проводит критический анализ результатов собственных экспериментальных и расчетно-теоретических работ, корректно интерпретирует их.

ИОПК-2.2. Формулирует заключения и выводы по результатам анализа литературных данных, собственных экспериментальных и расчетно-теоретических работ в избранной области химии или смежных наук

ИПК-1.1. Разрабатывает стратегию научных исследований, составляет общий план и детальные планы отдельных стадий.

ИПК-1.2. Выбирает экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи, используя достижения современной химической науки, и исходя из имеющихся, материальных, информационных и временных ресурсов.

2. Задачи освоения дисциплины

- Освоение материала дисциплины, включающего фундаментальные представления и анализ современного опыта (состояния), по вопросам термодинамических, структурных и электронных свойств поверхности твердых тел;

- Освоение современных методов и подходов к изучению физико-химических и функциональных свойств поверхности и процессов, протекающих при формировании поверхности нанокompозитных материалов с использованием комплекса физико-химических методов исследования; применение полученных знаний при выборе экспериментальных методов для решения задач НИР

- Научиться анализировать и систематизировать информацию по теме работ (исследований), составлять общий (детальный) план перспективных исследований.

3. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина относится к Блоку 1 «Дисциплина (модули) по выбору 3 (ДВ.3)»

Дисциплина относится к части образовательной программы, формируемой участниками образовательных отношений, предлагается обучающимся на выбор.

4. Семестр освоения и форма промежуточной аттестации по дисциплине

Семестр 1, зачет.

5. Входные требования для освоения дисциплины

Пререквизиты дисциплины: для успешного освоения модуля магистранты должны иметь необходимые знания, навыки, умения и профессиональные компетенции по дисциплинам обязательной части общепрофессионального цикла строение вещества и кристаллохимия, профессионального цикла неорганическая химия, органическая химия, аналитическая химия, физическая химия, коллоидная химия, а также дисциплин профессионального цикла адсорбционные процессы, гетерогенный катализ, методы

приготовления и исследования катализаторов, спектроскопические методы анализа учебного плана по программе бакалавриата 04.03.01 – Химия.

Постреквизиты дисциплины: полученные магистрантами знания необходимы им в научно-исследовательской работе при выполнении магистерских диссертаций.

6. Язык реализации

Русский

7. Объем дисциплины (модуля)

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 з.е., 108 часов, из которых:

– лекции: 16 ч.;

– практические занятия: 16 ч.;

в том числе практическая подготовка: 16 ч.

Объем самостоятельной работы студента определен учебным планом.

8 Содержание дисциплины, структурированное по темам

Программой дисциплины предусмотрены лекции и практические занятия, включающие занятия семинарского типа. На лекционных занятиях даётся краткий теоретический материал по теме раздела.

В рамках занятий семинарского типа на основании представленных слушателями докладов рассматриваются основные вопросы по тематическому разделу; обсуждаются результаты приготовления и исследования нанокompозитных материалов, подходы к синтезу материалов с заданными свойствами.

Тема 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. Поиск и подбор литературы по тематике раздела, изучение современных методов и подходов в области оценки поверхностной энергии твердых тел.

Тема 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.

Поиск и подбор литературы по тематике раздела, изучение современных методов и подходов в области определения дефектности строения твердых тел.

Тема 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.

Тема 4. Процессы на поверхности твердых тел

Адсорбция на границе раздела газ-твердое тело. Теория хемосорбции Ньюнса-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. Поиск и подбор литературы по тематике раздела, изучение современных методов и подходов в области механизмов формирования поверхностных слоев.

Тема 5. 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.

Тема 6. 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.

Поиск и подбор литературы по тематике раздела, изучение современных методов и подходов в области формирования заданной электронной структуры поверхности.

9. Текущий контроль по дисциплине

Для текущего контроля работы на практических занятиях предусмотрен опрос в рамках представленного индивидуального задания.

Текущий контроль по дисциплине проводится путем контроля посещаемости, деловых игр по темам, выполнения индивидуальных заданий и фиксируется в форме контрольной точки не менее одного раза в семестр.

10. Порядок проведения и критерии оценивания промежуточной аттестации

Изучение дисциплины завершается зачётом, допуском к которому является успешное выполнение текущего контроля. Зачет ставится по результатам устной защиты доклада по теме выбранного студентом индивидуального задания, оформленного в виде презентации и аналитической записки на итоговом семинаре.

Примерный перечень индивидуальных заданий, проверяющих освоение компетенций ИОПК-2.1., ИОПК-2.2., ИПК-1.1., ИПК-1.2., ИПК-1.3.

1. Адсорбция воды на металлических поверхностях.
2. Влияние структуры граней монокристалла TiO_2 на разделение зарядов при облучении.
3. Строение и свойства поверхности нанокompозитных материалов на основе графена.
4. Применение метода туннельной электронной микроскопии (STM) для анализа структуры поверхности.

11. Учебно-методическое обеспечение

а) Электронный учебный курс по дисциплине в электронном университете «Moodle» <https://moodle.tsu.ru/course/view.php?id=22075>

б) Оценочные материалы текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине.

в) План семинарских / практических занятий по дисциплине.

г) Методические указания по организации самостоятельной работы студентов с примерами выполненных индивидуальных заданий по курсу.

12. Перечень учебной литературы и ресурсов сети Интернет

а) основная литература:

- C.-J. Pan, M.-C. Tsai, W.-N. Su, J. Rick, N.G. Akalework, A.K. Agegnehu, S.-Y. Cheng, B.-J. Hwang, Tuning/exploiting Strong Metal-Support Interaction (SMSI) in Heterogeneous Catalysis, J. Taiwan Inst. Chem. 2017, V.74 154–186. <https://doi.org/10.1016/j.jtice.2017.02.012>
- Чоркендорф И., Наймантсведрайт Х. Современный катализ и химическая кинетика. Долгопрудный : Издательский Дом «Интеллект», 2013
- Родулгин В. И. Физикохимия поверхности. Долгопрудный: Издательский Дом «Интеллект», 2011
- Пахомов Н. А. Научные основы приготовления катализаторов: введение в теорию и практику. Новосибирск : Изд-во СО РАН, 2011

б) дополнительная литература:

- Родунер Э. Размерные эффекты в наноматериалах / пер. с англ. А. В. Хачояна; под ред. Р.А. Андриевского, Москва: Техносфера, 2010
- Synthesis of Solid Catalysts. Ed. K.P. de Jong, Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2009
- Qiang Fu, Thomas Wagner, Interaction of nanostructured metal overlayers with oxide surfaces, Surface Science Reports 62 (2007) 431–498.
- Оура К., Лифшиц В.Г., Саранин А.А., Зотов А.В., Катаяма, М. Введение в физику поверхности М.: Наука, 2006.
- Праттон М. Введение в физику поверхности. Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2000
- Карнаухов А.П. Адсорбция. Текстура дисперсных и пористых материалов. Новосибирск: Наука, 1999
- Ковтуненко П.В. Физическая химия твердого тела. Кристаллы с дефектами. М.: Высшая школа, 1993

в) ресурсы сети Интернет:

1. ScienceDirect [Electronic resource] / Elsevier B.V. – Electronic data. – Amsterdam, Netherlands, 2016. – URL: <http://www.sciencedirect.com/>
2. Scopus [Electronic resource] / Elsevier B.V. – Electronic data. – Elsevier, 2016. – URL: <https://www.scopus.com/>
3. Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU [Электронный ресурс]. – Электрон. дан. – М., 2000- . – URL: <http://elibrary.ru/defaultx.asp>

13. Перечень информационных технологий

а) лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение:

- Microsoft Office Standart 2013 Russian: пакет программ. Включает приложения: MS Office Word, MS Office Excel, MS Office PowerPoint, MS Office On-eNote, MS Office Publisher, MS Outlook, MS Office Web Apps (Word Excel MS PowerPoint Outlook);
- публично доступные облачные технологии (Google Docs, Яндекс диск и т.п.).

б) информационные справочные системы:

- Электронный каталог Научной библиотеки ТГУ – <http://chamo.lib.tsu.ru/search/query?locale=ru&theme=system>
- Электронная библиотека (репозиторий) ТГУ – <http://vital.lib.tsu.ru/vital/access/manager/Index>
- ЭБС Лань – <http://e.lanbook.com/>
- ЭБС Консультант студента – <http://www.studentlibrary.ru/>
- Образовательная платформа Юрайт – <https://urait.ru/>
- ЭБС ZNANIUM.com – <https://znanium.com/>

– ЭБС IPRbooks – <http://www.iprbookshop.ru/>

14. Материально-техническое обеспечение

Аудитории для проведения занятий лекционного типа.

Аудитории для проведения занятий семинарского типа, индивидуальных и групповых консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации.

Помещения для самостоятельной работы, оснащенные компьютерной техникой и доступом к сети Интернет, в электронную информационно-образовательную среду и к информационным справочным системам.

15. Информация о разработчиках

Водянкина Ольга Владимировна, д-р. хим. наук, профессор, кафедра физической и коллоидной химии Национального исследовательского Томского государственного университета, заведующий кафедрой.