

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

*апрель* 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

**2021**

Код дисциплины в учебном плане: Б1.О.В.03

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:

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

– ПК-3. Способен к решению профессиональных производственных задач.

Результатами освоения дисциплины являются следующие индикаторы достижения компетенций:

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.

ИПК-1.3. Использует современное физико-химическое оборудование для получения и интерпретации достоверных результатов исследования в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках, применяя взаимодополняющие методы исследования.

ИПК-3.1. Анализирует имеющиеся нормативные документы по системам стандартизации, разработки и производству химической продукции и предлагает технические средства для решения поставленных задач.

ИПК-3.2. Производит оценку применимости стандартных и/или предложенных в результате НИР технологических решений на применимость с учетом специфики изучаемых процессов.

## **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 части образовательной программы, формируемой участниками образовательных отношений, является обязательной для изучения.

## **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 ИПК-1.1., ИПК-1.2., ИПК-1.3., ИПК-3.1., ИПК-3.2.

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:

- С.-J. Pan, М.-С. 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.