

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования «Новосибирский национальный исследовательский государствен-
ный университет» (Новосибирский государственный университет, НГУ)

Факультет естественных наук



СОГЛАСОВАНО

Декан ФЕН

Резников В. А.

Подпись

5 октября 2020 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

«Физика и химия поверхности»

Специальность: 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия
направленность (профиль): Фундаментальная и прикладная химия

Форма обучения: очная

Разработчик:

к.х.н., Нартова А.В.

Зав. кафедрой

д.х.н., академик РАН, Болдырев В.В.

Руководитель программы:

д.х.н., доц. Емельянов В.А.

Новосибирск, 2020

Содержание

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

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

| Индикатор компетенции | Результаты обучения по дисциплине |
|--|--|
| С-ОПК-1. Способен анализировать, интерпретировать и обобщать результаты экспериментальных («в стекле» и « <i>in silico</i> ») работ химической направленности | |
| С-ОПК-1.2. Предлагает интерпретацию результатов собственных экспериментов, в том числе и компьютерных с использованием теоретических основ химии | - <i>умеет выбирать</i> методы исследования и базы данных для анализа результатов эксперимента для получения необходимой информации о процессах, протекающих на поверхности. |
| С-ОПК-1.3. Формулирует заключения и выводы по результатам анализа литературных данных и собственных экспериментальных работ химической направленности | - <i>анализирует</i> литературные данные в области исследований, связанных с процессами, протекающими на поверхности. |

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплины (практики), изучение которых необходимо для освоения дисциплины *Физика и химия поверхности*:

- физическая химия,
- термодинамика,
- неорганическая химия,
- аналитическая химия,
- химия твердого тела.

Дисциплины и практики, для изучения которых необходимо освоение дисциплины *Физика и химия поверхности*:

- ознакомительная практика,
- производственная практика,
- научно-исследовательская работа.

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

Трудоемкость дисциплины – 2 з.е. (72 ч)

Форма промежуточной аттестации: экзамен

| № | Вид деятельности | 8 семестр |
|---|-------------------------|-----------|
| 1 | Лекции, ч | 36 |
| 2 | Практические занятия, ч | 0 |

| | | |
|---|---|----|
| 3 | Занятия в контактной форме, ч из них | 40 |
| 4 | из них аудиторных занятий, ч | 36 |
| 5 | консультаций, час. | 2 |
| 6 | промежуточная аттестация, ч | 2 |
| 7 | Самостоятельная работа, час. | 32 |
| 8 | Всего, ч | 72 |

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

8 семестр
Лекции (36 ч)

| Наименование темы и их содержание | Объем, час |
|--|------------|
| <i>Тема 1. Введение. Общие понятия «науки о поверхности».</i> Введено понятие «поверхности» как границы раздела двух фаз. Дано краткое описание основных исторических этапов развития науки о поверхности как самостоятельной области знаний. Рассмотрены различные варианты классификации твердых тел с точки зрения их поверхности. Введена базовая классификация пористых тел – адсорбентов. Осуществлено первое знакомство с миром нанообъектов. | 2 |
| <i>Тема 2. Методы приготовления: чистых поверхностей монокристаллов; нанокластеров; адсорбентов.</i> Описана общая методика очистки поверхности монокристаллов и ее подготовки для изучения процессов, протекающих на поверхности, таких как: реконструкция поверхностных структур, адсорбция, гетерогенная реакция и т.д. Приведена классификация и описание практически значимых или перспективных способов приготовления наноразмерных объектов (нанокластеров) различной природы. Рассмотрены принципиальные способы приготовления пористых углеродных материалов на примере «Сибунита» и КВУ (каталитический волокнистый углерод), а также оксидных адсорбентов методом осаждения на примере силикагеля. При этом особое внимание уделяется процессам, влияющим на формирование текстуры пористого тела, поскольку именно текстура, наравне с химической природой материала, определяет особенности адсорбционного поведения адсорбента. | 2 |
| <i>Тема 3. Методы исследования поверхности твердых тел.</i> Рассмотрены физические принципы, характер получаемой информации и особенности ее интерпретации для наиболее практически значимых и распространенных методов исследования поверхности твердых тел, таких как: рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия (РФЭС), Оже-электронная спектроскопия (ОжеЭС), Масс-спектрометрия вторичных ионов (МСВИ), сканирующая туннельная спектроскопия (СТС), дифракция медленных электронов (ДМЭ), инфракрасная спектроскопия (ИКС), сканирующая туннельная микроскопия (СТМ), атомно-силовая микроскопия (АСМ), электронная микроскопия (ЭМ), порометрия и т.д. Возможности применения вышеперечисленных методов продемонстрированы на примере новейших работ, выполненных как в ведущих международных исследовательских центрах, так и в Институтах СО РАН. Знакомство с программным обеспечением, позволяющим анализировать электронные спектры, а также микроскопические изображения. | 2 |

| | |
|---|---|
| <p><i>Тема 4 Методы исследования адсорбционных процессов.</i> Приведена общая схема проведения адсорбционных экспериментов на монокристаллах с использованием самых современных методов исследования. Рассмотрены основные принципы, лежащие в основе методов изучения адсорбции на пористых адсорбентах: волюмометрический, гравиметрический, проточный. Проведено сравнение представленных методов. Перечислены основные способы определения теплоты адсорбции на пористых телах. Температурно-программируемая десорбция и температурно-программируемая реакция.</p> | 2 |
| <p><i>Тема 5 Кристаллография поверхности твердых тел.</i> Введены основные понятия кристаллографии поверхности, как-то: плоская примитивная ячейка, плоская примитивная ячейка Вигнера - Зейтца, двумерные решетки Браве, модель жестких плотноупакованных шаров и т.д. Рассмотрены особенности кристаллического строения поверхностей металлов в случае идеальных плотноупакованных граней, высокоиндексных, ступенчатых граней, а также реальных металлов. Введено понятие реконструкции поверхности, рассмотрены основные причины перестроения поверхностных атомов, а также наиболее значимые примеры реконструкций. Систематизированы принципиальные особенности кристаллического строения поверхности ковалентных и ионных кристаллов.</p> | 2 |
| <p><i>Тема 6 Нанокластеры: кристаллическая структура и электронное строение</i> Введены основные понятия, используемые для описания наноразмерных кластеров, рассмотрены особенности электронного и кристаллического строения подобных объектов. Проведено сравнение практически значимых свойств массивных фаз и нанокластеров того же материала.</p> | 2 |
| <p><i>Тема 7 Основы термодинамики поверхности и дисперсных систем.</i> Глава посвящена основам термодинамики поверхности и наноразмерных объектов. Введены основные понятия и рассмотрены принципиальные подходы к термодинамическому описанию подобных систем: метод слоя конечной толщины и метод поверхностных избытков Гиббса. Введены понятия поверхностного натяжения, работы когезии и адгезии, особое внимание уделено их физическому смыслу. Приведено обобщенное правило фаз Гиббса. Для дисперсных систем выведены основные уравнения, представляющие практический интерес: уравнение Вульфа, уравнение Лапласа, уравнение зависимости химического потенциала от кривизны поверхности, уравнение Кельвина и т.д.</p> | 2 |
| <p><i>Тема 8 Поверхностная диффузия.</i> Введены основные диффузионные понятия: массоперенос, внутренняя диффузия, самодиффузия и гетеродиффузия, взаимная диффузия, вынужденная диффузия, восходящая диффузия, диффузия с «барьерами», поверхностная туннельная диффузия, направленная и бесцельная диффузия, химическая поверхностная диффузия и т.д. Рассмотрены основные диффузионные механизмы и уравнения диффузии, диффузия невзаимодействующих атомов за счет градиента концентраций и поверхностная диффузия атомных нанокластеров и островков, а также механизмы изменения дисперсности нанесенных систем.</p> | 2 |
| <p><i>Тема 9. Элементы теории роста кристаллов: гомогенный рост</i> Рассмотрены процессы формирования зародышей новой фазы. Изложены основные положения классической теории роста кристаллов Косселя - Странского: рассмотрены механизмы образования зародышей на поверхности и послойного роста кристалла.</p> | 2 |
| <p><i>Тема 10. Элементы теории роста кристаллов: гетерогенное зародышеобразование</i> С термодинамической точки зрения рассмотрены особенности формирования гетерогенных зародышей (система «гость-хозяин»). Рассмотрены механизмы и необходимые условия формирования полислоистых пленок и островков в гетерогенных системах. Рассмотрены термодинамические предпосылки, определяющие морфологию системы «гость-хозяин», а также проявление «сильного</p> | 2 |

| | |
|--|---|
| взаимодействия» «гость-хозяин». Обобщены процессы, обуславливающие особенности финальное распределение частиц гостя по размерам. | |
| <p><i>Тема 11. Адсорбция.</i></p> <p>Рассмотрены основные типы взаимодействий в ходе адсорбции в системе адсорбтив – адсорбат – адсорбент. Проведено комплексное сравнение физадсорбции и хемосорбции. Введено понятие «термическое уравнение сорбции», приведены основные типы изотерм, изобар и изостер. Рассмотрены основные уравнения изотерм адсорбции: изотерма Генри; изотерма Ленгмюра; изотерма Фаулера - Гугенгейма; изотерма Френкеля - Хелси - Хилла (ФХХ); уравнение Брунауэра - Эмметта - Теллера (метод БЭТ). Проведено сравнение различных типов изотерм, а также приведены примеры их практического использования. Изложены основы капиллярной конденсации. Проведено сравнение обратимой капиллярной конденсации и необратимой капиллярной конденсации.</p> | 2 |
| <p><i>Тема 12. Кинетика реакций на поверхности твердых тел.</i></p> <p>Введены основные понятия и термины. Рассмотрены реакции типа «твердое тело – газ» и топохимические реакции, а также кинетика адсорбции и десорбции.</p> <p>Обсуждается природа лимитирующей стадии гетерогенной химической реакции. Основное внимание уделено особенностям применения закона «действующих поверхностей» в кинетике гетерогенных реакций. Детально рассмотрено кинетическое описание механизмов Ленгмюра - Хиншельвуда (адсорбционный механизм) и Или - Ридила (ударный механизм), используемых для описания гетерогенных каталитических реакций. Проведено знакомство с методом Тёмкина, используемым для описания кинетики сложных реакций.</p> <p>Для топохимических реакций представлены основные модели и приближения, традиционно используемые для описания формальной кинетики данных процессов. Рассмотрены понятия «степень превращения» исходного вещества и «зародышеобразование». Выведены кинетические уравнения для топохимических реакций на основе экспоненциального и степенного законов зародышеобразования. В качестве частного случая рассмотрено кинетическое описание топохимической реакции, протекающей на нанокластерах вещества.</p> | 2 |
| <p><i>Тема 13. Закономерности процесса окисления металлов.</i></p> <p>Детально рассмотрены особенности окисления металлов в режиме травления и оксидирования (нитридации, сульфидирования и т.д.). Особое внимание уделено кинетическому описанию процессов, а также критическим условиям перехода окисления из режима травления в режим оксидирования. Изложен диффузионные процессы при оксидировании металлов и приведена зависимость константы параболического окисления от давления окислителя.</p> | 2 |
| <p><i>Тема 14. Закономерности процессов испарения твердых тел.</i></p> <p>Проведено сравнение различных режимов испарения твердых тел: в условиях равновесия; испарение в вакуум; в условиях квазиравновесия в ячейке Кнудсена. Введено уравнения Герца - Кнудсена - Ленгмюра, а также понятия «нормального» и «замедленного» испарения. Рассмотрены основные подходы к описанию кинетики испарения, а также особенности изменения морфологии твердых тел в ходе испарения.</p> | 2 |
| <p><i>Тема 15. Закономерности процессов растворения твердых тел.</i></p> <p>Рассмотрены особенности растворения твердых тел в зависимости от их природы: молекулярные кристаллы, ионные кристаллы, металлы и полупроводники. Для полупроводников введено понятие области пространственного заряда. Особенности поверхности полупроводниковых материалов рассмотрены с точки зрения зонной теории.</p> | 2 |
| <p><i>Тема 16. Основы гетерогенного катализа.</i></p> <p>Даны общие представления о явлении «катализ» и природе каталитической активности, а также об особенностях гетерогенного катализа. Рассмотрены основные классы гетерогенных катализаторов: массивные и нанесенные системы. Введены основные понятия, как-то: активный компонент катализатора, поверхностный активный центр, удельная каталитическая активность, структурно чув-</p> | 2 |

| | |
|---|--|
| ствительные и нечувствительные реакции, принцип геометрического соответствия реагента и катализатора и т.д. Проведено знакомство с правилом постоянства удельной каталитической активности Г.К. Борескова и случаями, не подчиняющимися этому правилу. Приведены современные подходы к рассмотрению природы каталитического действия, как-то: коллективный и локальный. Возможности данных подходов продемонстрированы на примере работ ведущих исследовательских групп мира и России, работающих в области гетерогенного катализа. | |
|---|--|

5. Перечень учебной литературы

1. А.В. Нартова, Химия поверхности твердых тел: Учебное пособие. Новосиб. Гос. Ун-т. Новосибирск: ИПЦ НГУ, 2018, 144 с.
2. Лифшиц В.Г., Репинский С.М. Процессы на поверхности твердых тел. Владивосток: Дальнаука. 2003. – 704 с.
3. Пул Ч., Оуэнс Ф., Нанотехнологии. М.: Техносфера. 2005. – 334 с.
4. Крылов О.В. Гетерогенный катализ: Учебное пособие. В 4-х частях. – Новосибирск: НГУ. 2002.
5. Фенелонов В.Б. Введение в физическую химию формирования супрамолекулярной структуры адсорбентов и катализаторов. – Новосибирск: Из-во СО РАН. 2002.–414с.
6. Стронберг А.Г. Физическая химия: Учеб. для хим. спец. Вузов. 5-е издание. – М.: Высш. Шк. 2003. – 527 с.

6. Перечень учебно-методических материалов по самостоятельной работе обучающихся

1. Неволин В.К. Зондовые нанотехнологии в электронике. – М.: Техносфера. 2005. – 152 с.
2. Миронов В.Л. Основы сканирующей зондовой микроскопии. -М: Техносфера. 2004. – 144 с.
3. Круглов А.В., Филатов Д.О. Сканирующая зондовая микроскопия. Спектроскопия и литография. Учебное пособие. Москва-Нижний Новгород-Санкт-Петербург. – 2004. – 159 с.
4. Бажин Н.М., Иванченко В.А., Пармон В.Н. Термодинамика для химиков: Учебник для вузов. - М.: Химия. 2001. – 408 с.
5. Блейкмор Дж. Физика твердого тела: пер. с англ. – М.: Мир. 1988. – 608 с.
6. Ляхов Н.З. Химия твердого тела: Учеб. пособие. НГУ. Новосибирск. 1991. – 148 с.
7. Карнаухов А.П. Адсорбция. Текстура дисперсных и пористых материалов. Новосибирск: Наука, Сиб. Отд. 1999.
8. Боресков Г.К. Гетерогенный катализ. - М.: Наука. 1986. – 304 с.
9. Замараев К.И. Химическая кинетика: курс лекций. Учеб. пособие в 3-х частях. НГУ. Новосибирск. 1994.
10. Фельдман Л., Майер Д. Основы анализа поверхности и тонких пленок: пер. с англ. - М.: Мир. 1989. – 344 с.
11. Анализ поверхности методом Оже- и рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии. Под редакцией Д. Бриггса и М.П. Сиха. - М.: Мир. 1987. – 600 с.
12. Вест А. Химия твердого тела. Теория и приложения: В 2-х частях. Пер. с англ. – М.: Мир. 1988.

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

7.1 Ресурсы сети Интернет

Освоение дисциплины используются следующие ресурсы:

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

Взаимодействие обучающегося с преподавателем (синхронное и (или) асинхронное) осуществляется через личный кабинет студента в ЭИОС и электронную почту.

7.2 Современные профессиональные базы данных:

- Реферативно-поисковая база данных Reaxys (Elsevier)
- Реферативно-библиографическая база данных Scopus (Elsevier)
- Реферативно-библиографическая база данных Scifinder (Chemical Abstracts Service)
- Библиометрическая база данных Web of Science Core Collection (Thomson Reuters Scientific LLC.)
- База данных полнотекстовых научных журналов JSTOR.
- Электронная библиотека диссертаций Российской государственной библиотеки (ЭБД РГБ)
- Электронные ресурсы российской научной библиотеки eLibrary.ru
- Электронные ресурсы издательства American Chemical Society (ACS)
- Электронные ресурсы издательства Annual Reviews
- Электронные ресурсы Freedom Collection издательства Elsevier
- Электронные ресурсы издательства The Royal Society of Chemistry (RSC)
- Электронные ресурсы издательства Wiley

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

8.1 Перечень программного обеспечения

Для обеспечения реализации дисциплины используется стандартный комплект программного обеспечения (ПО), включающий регулярно обновляемое лицензионное ПО Windows и MS Office.

Использование специализированного программного обеспечения для прохождения практики не требуется.

8.2 Информационные справочные системы

A. V. Naumkin, A. Kraut-Vass, S. W. Gaarenstroom and C. J. Powell, NIST X-ray Photoelectron Spectroscopy Database, 2012, <http://srdata.nist.gov/xps/>.

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

Для реализации дисциплины *Физика и химия поверхности* используются специальные помещения:

1. Учебные аудитории для проведения групповых и индивидуальных консультаций, текущей и промежуточной аттестации;
2. Помещения для самостоятельной работы обучающихся;

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

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

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 об-

разовательным 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

Перечень результатов обучения по дисциплине *Физика и химия поверхности* и индикаторов их достижения представлен в разделе 1.

10.1 Порядок проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине

По итогам прохождения курса слушатели сдают устный экзамен, на котором получают билет с тремя вопросами из списка, который выдается в начале курса.

Описание критериев и шкал оценивания индикаторов достижения результатов обучения по дисциплине *Физика и химия поверхности*

Таблица 10.1

| Индикатор компетенции | Результаты обучения по дисциплине |
|--|--|
| С-ОПК-1. Способен анализировать, интерпретировать и обобщать результаты экспериментальных («в стекле» и « <i>in silico</i> ») работ химической направленности | |
| С-ОПК-1.2. Предлагает интерпретацию результатов собственных экспериментов, в том числе и компьютерных с использованием теоретических основ химии | - <i>умеет выбирать</i> методы исследования и базы данных для анализа результатов эксперимента для получения необходимой информации о процессах, протекающих на поверхности. |
| С-ОПК-1.3. Формулирует заключения и выводы по результатам анализа литературных данных и собственных экспериментальных работ химической направленности | - <i>анализирует</i> литературные данные в области исследований, связанных с процессами, протекающими на поверхности. |

Таблица 10.2

| Критерии оценивания результатов обучения | Шкала оценивания |
|--|------------------|
| Экзамен: – наличие полных ответов на все вопросы из билета с непринципиальными неточностями, – осмысленность, структурированность, логичность и аргументированность ответов, – точность и корректность применения терминов и понятий, - полные ответы на дополнительные вопросы по теме вопросов из билета и в смежных темах. | <i>отлично</i> |

| | |
|--|-----------------------------------|
| <p><u>Экзамен:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> – наличие полных ответов на все вопросы из билета с несущественными ошибками, – осмысленность, структурированность, логичность и аргументированность ответов, наличие затруднений в объяснении отдельных моментов, – точность и корректность применения терминов и понятий при наличии незначительных ошибок – неполные или с незначительными неточностями ответы на дополнительные вопросы по теме вопросов из билета и в смежных темах. | <p><i>Хорошо</i></p> |
| <p><u>Экзамен:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> – наличие ответов на все вопросы из билетов, часть из которых неполные и/или с существенными ошибками, – осмысленность и структурированность в изложении материала, наличие ошибок в логике, аргументации и объяснении отдельных процессов и явлений, – корректность применения терминов и понятий при наличии незначительных ошибок. | <p><i>Удовлетворительно</i></p> |
| <p><u>Экзамен:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> – наличие ответов не на все вопросы из билета, часть из которых неполные и/или с существенными ошибками, – отсутствие осмысленности, структурированности, логичности и аргументированности в изложении материала, – грубые ошибки в применении терминов и понятий. | <p><i>Неудовлетворительно</i></p> |

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

Примеры вопросов для самостоятельной работы:

1. На чем основан спектроскопический метод исследования поверхности твердых тел: рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия (РФЭС)?
2. Что такое «реконструкция» поверхности? Что является «движущей силой» реконструкции? Приведите примеры подобной реконструкции.
3. В чем суть метода Гиббса при описании термодинамики поверхности?

Пример билета для экзамена:

БИЛЕТ № 1.

1. Методы исследования поверхности: спектроскопия.
2. Основные подходы к термодинамике поверхности.
3. Диффузия невзаимодействующих и взаимодействующих частиц.

Лист актуализации рабочей программы дисциплины
Физика и химия поверхности

| № | Характеристика внесенных изменений (с указанием пунктов документа) | Дата и № протокола Ученого совета ФЕН | Подпись ответственного |
|---|--|---------------------------------------|------------------------|
| | | | |
| | | | |
| | | | |
| | | | |
| | | | |