

**МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ**

**ФГАОУ ВО "Новосибирский национальный
исследовательский государственный университет"**

Факультет естественных наук

УТВЕРЖДАЮ



Декан ФЕН НГУ, профессор

Резников В.А.

«29» августа 2014 г.

Химия поверхности

Модульная программа лекционного курса и самостоятельной работы студентов

Курс 4–й, VII семестр

Учебно-методический комплекс

Новосибирск 2014

Учебно-методический комплекс предназначен для студентов IV курса факультета естественных наук, направление подготовки 020100 «Химия (бакалавр)». В пособии приведены программа курса лекций, а также список вопросов для самостоятельной работы студентов с использованием учебной литературы и персонального компьютера, а также список вопросов, предлагаемых на экзаменах.

Составитель

Нартова А.В., доц.

© Новосибирский государственный университет, 2014

Содержание

Аннотация рабочей программы	4
1. Цели освоения дисциплины	5
2. Место дисциплины в структуре ООП	5
3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины «Химия поверхности твердых тел»	6
4. Структура и содержание дисциплины	8
Рабочий план (по неделям семестра)	10
Программа курса лекций	11
5. Образовательные технологии	16
6. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины	16
Перечень примерных контрольных вопросов и заданий для самостоятельной работы	17
Примерный перечень вопросов к экзамену по всему курсу	21
7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины	24
8. Материально-техническое обеспечение дисциплины	25

Аннотация рабочей программы

Дисциплина «Химия поверхности» относится к вариативной части профессионального (специального) цикла ООП по направлению подготовки «020100 ХИМИЯ» (квалификация (степень) бакалавр). Дисциплина реализуется на Факультете естественных наук Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования "Новосибирский национальный исследовательский государственный университет" (НГУ) кафедрой химии твердого тела.

Содержание дисциплины охватывает круг вопросов, связанных с общими положениями науки о поверхности твердых тел и наноразмерных объектах и последними достижениям в данных областях, в том числе, полученными в НИУ НГУ и Институтах Сибирского отделения РАН.

Дисциплина нацелена на формирование общекультурных компетенций ОК-6, ОК-7, ОК-9, ОК-10, ОК-15, профессиональных компетенций ПК-2, ПК-5 выпускника.

Преподавание дисциплины предусматривает следующие формы организации учебного процесса: лекции, самостоятельная работа студента.

Программой дисциплины предусмотрены следующие виды контроля: текущий контроль в форме контроля посещаемости. Формы рубежного контроля определяются решениями Ученого совета, действующими в течение текущего учебного года.

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 зачетные единицы. Программой дисциплины предусмотрены 36 часов лекционных занятий, а также 30 часов самостоятельной работы студентов, 2 часа консультаций, 1 час коллоквиум и 3 часа экзамен.

1. Цели освоения дисциплины

Дисциплина «Химия поверхности» имеет своей целью формирование у слушателей целостного представления об объектах и методах исследования в области науки о поверхности и наноразмерных объектах. Знакомство слушателей с основами термодинамики и кристаллографии поверхности твердых тел и наноразмерных объектов, а также с процессами, протекающими на поверхности, как-то: адсорбция, гетерогенные реакции, катализ и т.д. Знакомство с современными методами исследования поверхности, такими как: сканирующая зондовая микроскопия, электронная микроскопия, *in situ* электронная спектроскопия и т.д. Данное знакомство не ограничивается теоретическими основами методов. Проведение экскурсий в соответствующие лаборатории и мастер-классов позволяет слушателям составить целостное представление об экспериментальных возможностях науки о поверхности. Интерактивная часть курса позволяет студентам применить теоретические знания, полученные на лекционных занятиях, и приобрести полезные навыки на практике в ходе анализа задач, представляющих для них интерес, с использованием современного программного обеспечения. Лекционная часть курса также подразумевает презентацию последних мировых достижений в области науки о поверхности и нанотехнологии.

Основной целью освоения дисциплины является усвоение студентами основных положений химии поверхности твердых тел, умение пользоваться ими и на этой основе – понимания студентами сложных химических и физических процессов, происходящих на поверхности твердого тела.

2. Место дисциплины в структуре ООП

Дисциплина «Химия поверхности» относится к вариативной части профессионального (специального) цикла ООП по направлению подготовки «020100 ХИМИЯ», уровень подготовки – «бакалавр».

Дисциплина «Химия поверхности» опирается на следующие дисциплины данной ООП:

- Физическая химия;
- Физика;
- Химическая термодинамика;
- Химическая кинетика;

- Строение вещества;
- Химия твердого тела;
- Атомный практикум.

Результаты освоения дисциплины «Химия поверхности» используются в следующих дисциплинах данной ООП:

- Научно-исследовательская практика;
- Итоговая государственная аттестация.

3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины «Химия поверхности»:

- **общекультурные компетенции:**
 - *использует основные законы естественнонаучных дисциплин в профессиональной деятельности, применяет методы математического анализа и моделирования, теоретического и экспериментального исследования (ОК-6);*
 - *владеет основными методами, способами и средствами получения, хранения, переработки информации, имеет навыки работы с компьютером как средством управления информацией (ОК-9);*
 - *умеет работать с информацией в глобальных компьютерных сетях (ОК-10);*
 - *обладает способностью в условиях развития науки и техники к критической переоценке накопленного опыта и творческому анализу своих возможностей (ОК-15);*
- **профессиональные компетенции:**
 - *владеет основами теории фундаментальных разделов химии (неорганической, аналитической, органической, физической, химии высокомолекулярных соединений, биохимии, химической технологии) (ПК-2);*
 - *представляет основные химические, физические и технические аспекты химического промышленного производства с учетом сырьевых и энергетических затрат (ПК-5);*

В результате освоения дисциплины обучающийся должен:

- иметь представление об объектах и методах исследования в химии поверхности твердого тела, а также о современном положении дел в данной области знаний;
- знать основные теоретические положения из области термодинамики и кристаллографии поверхности твердых тел и наноразмерных объектов, а также адсорбции, кинетики гетерогенных реакций и основ гетерогенного катализа;
- уметь свободно оперировать базовыми понятиями предложенной области знаний, как-то: уметь расшифровывать принятые в литературе обозначения поверхностных структур, извлекать полезную информацию из данных физических методов исследования поверхности и т.д.;
- обращаться с доступным программным обеспечением и базами данных, представляющими интерес для науки о поверхности.

4. Структура и содержание дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 зачетные единицы. Программой дисциплины предусмотрены 36 часов лекционных занятий, а также 30 часов самостоятельной работы студентов, 2 часа консультаций, 1 час коллоквиум и 3 часа экзамен.

№ п/п	Раздел дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу студентов и трудоемкость (в часах)					Формы текущего контроля успеваемости (по неделям семестра) Форма промежуточной аттестации (по семестрам)
				Лекция	Лаб. работа	Самост. раб.	Консультация	Коллоквиум, экзамен	
1.1	Введение. Общие понятия «науки о поверхности»	7	1	2					
1.2	Методы приготовления: чистых поверхностей монокристаллов; нанокластеров; адсорбентов	7	2	2		1			
1.3	Методы исследования поверхности твердых тел - 1	7	3	2					
1.4	Методы исследования поверхности твердых тел - 2	7	4	2		1			
1.5	Методы исследования адсорбционных процессов	7	5	2		1			
1.6	Кристаллография поверхности твердых тел	7	6	2		1			
1.7	Нанокластеры: кристаллическая структура и электронное строение	7	7	2		1			
1.8	Основы термодинамики поверхности и дисперсных систем - 1	7	8	2					
1.9	Основы термодинамики	7	9	2		1			

	поверхности и дисперсных систем - 2								
2.1	Поверхностная диффузия	7	10	2		1		1	Коллоквиум
2.2	Элементы теории роста кристаллов: гомогенный рост	7	11	2					
2.3	Элементы теории роста кристаллов: гетерогенное зародышеобразование	7	12	2		1			
2.4	Адсорбция	7	13	2		1			
2.5	Кинетика реакций на поверхности твердых тел	7	14	2		1			
2.6	Закономерности процесса окисления металлов	7	15	2					
2.7	Закономерности процессов испарения твердых тел	7	16	2					
2.8	Закономерности процессов растворения твердых тел	7	17	2		1			
2.9	Основы гетерогенного катализа	7	18	2		1			
		7					2		Консультация
		7				18		3	Экзамен
				36		30	2	4	

Рабочий план (по неделям семестра)

Осенний семестр

Неделя	Темы занятий
СЕНТЯБРЬ 1-я неделя	Лекция 1. Введение. Общие понятия «науки о поверхности»
2-я неделя	Лекция 2. Методы приготовления: чистых поверхностей монокристаллов; нанокластеров; адсорбентов
3-я неделя	Лекция 3. Методы исследования поверхности твердых тел - 1
4-я неделя	Лекция 4. Методы исследования поверхности твердых тел - 2
5-я неделя	Лекция 5. Методы исследования адсорбционных процессов
ОКТАБРЬ 1-я неделя	Лекция 6. Кристаллография поверхности твердых тел
2-я неделя	Лекция 7. Нанокластеры: кристаллическая структура и электронное строение
3-я неделя	Лекция 8. Основы термодинамики поверхности и дисперсных систем - 1
4-я неделя	Лекция 9. Основы термодинамики поверхности и дисперсных систем - 2
НОЯБРЬ 1-я неделя	Лекция 10. Поверхностная диффузия. Коллоквиум.
2-я неделя	Лекция 11. Элементы теории роста кристаллов: гомогенный рост
3-я неделя	Лекция 12. Элементы теории роста кристаллов: гетерогенное зародышеобразование
4-я неделя	Лекция 13. Адсорбция
ДЕКАБРЬ 1-я неделя	Лекция 14. Кинетика реакций на поверхности твердых тел
2-я неделя	Лекция 15. Закономерности процесса окисления металлов
3-я неделя	Лекция 16. Закономерности процессов испарения твердых тел
4-я неделя	Лекция 17. Закономерности процессов растворения твердых тел
5-я неделя	Лекция 18. Основы гетерогенного катализа

Программа курса лекций

1. Введение. Общие понятия «науки о поверхности».

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 нанобъектов.

2. Методы приготовления: чистых поверхностей монокристаллов; нанокластеров; адсорбентов.

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.

3. Методы исследования поверхности твердых тел.

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.

4. Методы исследования адсорбционных процессов.

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.

5. Кристаллография поверхности твердых тел.

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.

6. Нанокластеры: кристаллическая структура и электронное строение

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.

7. Основы термодинамики поверхности и дисперсных систем.

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 из-

бытков 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.

8. Поверхностная диффузия.

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.

9. Элементы теории роста кристаллов: гомогенный рост

Рассмотрены процессы формирования зародышей новой фазы. Изложены основные положения классической теории роста кристаллов Косселя - Странского: рассмотрены механизмы образования зародышей на поверхности и послыного роста кристалла.

10. Элементы теории роста кристаллов: гетерогенное зародышеобразование

С термодинамической точки зрения рассмотрены особенности формирования гетерогенных зародышей (система «гость-хозяин»). Рассмотрены механизмы и необходимые условия формирования полислоенных пленок и островков в гетерогенных системах. Рассмотрены термодинамические предпосылки, определяющие морфологию системы «гость-хозяин», а также проявление «сильного взаимодействия» «гость-хозяин». Обобщены процессы, обуславливающие особенности финальное распределение частиц гостя по размерам.

11. Адсорбция.

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.

12. Кинетика реакций на поверхности твердых тел.

Введены основные понятия и термины. Рассмотрены реакции типа «твердое тело – газ» и топохимические реакции, а также кинетика адсорбции и десорбции.

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.

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.

13. Закономерности процесса окисления металлов.

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.

14. Закономерности процессов испарения твердых тел.

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.

15. Закономерности процессов растворения твердых тел.

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.

16. Основы гетерогенного катализа.

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 чувствительные 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 подчиняющимся 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. Образовательные технологии

Виды/формы образовательных технологий. Основные образовательные технологии: лекционная система обучения, а также обучение на основе опыта. В дополнение к традиционным лекционным формам студентам предоставляется возможность разобрать научные задачи, находящиеся в рамках тематики курса, и представляющие интерес для слушателей. Слушатели имеют возможность анализа спектроскопических и микроскопических данных, полученных, например, в ходе выполнения дипломной практики, с применением современного программного обеспечения. Использование последнего подразумевает мастер-классы экспертов по данному обеспечению. В распоряжении студентов все пакеты программ, рассматриваемые в ходе проведения курса. Это позволяет слушателям использовать данное обеспечение в ходе самостоятельной работы. В распоряжении слушателей полный доступ к необходимым базам данных, представляющих интерес для науки о поверхности. Кроме того, в рамках курса проводятся экскурсии в лаборатории исследования поверхности Институтов Сибирского отделения РАН и Новосибирского государственного университета, подразумевающее знакомство и общение с ведущими специалистами в данной области знаний.

Удельный вес интерактивных форм обучения определяется составом аудитории и близостью их научных интересов тематике курса, и составляет не менее 30% аудиторных занятий.

6. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины.

Рекомендуемый режим работы: лекционные занятия – 2 часа в неделю; самостоятельные занятия с обязательной и дополнительной литературой, а также программным обеспечением – 1-2 часа в неделю.

Система промежуточной аттестации: выставление оценок в контрольные недели по итогам проверки, которая проводится в два этапа: 1) письменная самостоятельная работа (коллоквиум) – ответы на контрольные вопросы и 2) устное собеседование со слушателем на основе вопросов письменной работы, позволяющее выставить

окончательную оценку. Кроме того, учет посещаемости лекционных занятий в ходе семестра.

Итоговая оценка выставляется по итогам устного экзамена с использованием экзаменационных билетов. Перед экзаменом проводится консультация.

Перечень примерных контрольных вопросов и заданий для самостоятельной работы

1. Перечислить основные этапы приготовления чистой поверхности монокристаллов.
2. Описать способы создания нанокластеров: «вакуумные методы».
3. Описать способы создания нанокластеров: «химические методы».
4. Перечислить критерии, используемые при классификации адсорбентов.
5. Описать методику формирования углеродного пористого материала «Сибунит» с точки зрения формирования текстуры адсорбента.
6. Описать методику формирования углеродного пористого материала КВУ (каталитический волокнистый углерод) с точки зрения формирования текстуры адсорбента.
7. Описать основные этапы формирования текстуры оксидного адсорбента в методе осаждения на примере силикагеля.
8. На чем основан спектроскопический метод исследования поверхности твердых тел: рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия (РФЭС)?
9. На чем основан спектроскопический метод исследования поверхности твердых тел: Оже-электронная спектроскопия (ОжеЭС)?
10. На чем основан спектроскопический метод исследования поверхности твердых тел: инфракрасная спектроскопия (ИКС)?
11. На чем основан спектроскопический метод исследования поверхности твердых тел: масс-спектрометрия вторичных ионов (МСВИ)?

12. В чем физическая суть структурного метода исследования поверхности: дифракция медленных электронов (ДМЭ)?
13. В чем суть текстурного метода исследования поверхности: ртутная порометрия?
14. На чем основан микроскопический метод исследования поверхности твердых тел: электронная микроскопия (ЭМ)?
15. На чем основан микроскопический метод исследования поверхности твердых тел: сканирующая туннельная микроскопия (СТМ)?
16. На чем основан микроскопический метод исследования поверхности твердых тел: атомно-силовая микроскопия (АСМ)?
17. В чем состоит волюмометрический метод исследования изотермы адсорбции?
18. В чем состоит гравиметрический метод исследования изотермы адсорбции?
19. В чем состоит проточный метод исследования изотермы адсорбции?
20. Что такое «примитивная двумерная ячейка»?
21. Какие двумерные решетки Браве используются для описания поверхностных кристаллических структур?
22. В чем состоит суть «модели жестких сфер» в описании кристаллической структуры поверхности металлов?
23. Что такое «реконструкция» поверхности? Что является «движущей силой» реконструкции? Приведите примеры подобной реконструкции.
24. Перечислите основные особенности кристаллической структуры поверхности ковалентных кристаллов.
25. Перечислите основные особенности кристаллической структуры поверхности ионных кристаллов.
26. Объекты какого размера принято относить к наночастицам?
27. Что такое «дисперсность»?
28. В чем состоит суть модели «желе», позволяющей предсказывать стабильность малых кластеров?

29. Каковы принципиальные отличия электронной структуры нанокластеров от массивных тел?
30. Каковы особенности кристаллической структуры нанокластеров?
31. В чем суть метода «слоя конечной толщины» при описании термодинамики поверхности?
32. В чем суть метода Гиббса при описании термодинамики поверхности?
33. В чем суть понятия «поверхностные избытки по Гиббсу»?
34. Как описывается изотерма адсорбции Гиббса?
35. Что такое поверхностное натяжение? В чем его физический смысл?
36. Запишите уравнение Вульфа? Какое практическое значение имеет это уравнение?
37. Как давление насыщенного пара зависит от кривизны поверхности?
38. Как растворимость зависит от кривизны поверхности?
39. Как температура плавления зависит от кривизны поверхности?
40. Что такое «работа адгезии» и «работа когезии»?
41. Сравните самодиффузию и гетеродиффузию на поверхности твердых тел.
42. Что такое «коэффициент диффузии»?
43. Сравните диффузию невзаимодействующих и взаимодействующих частиц.
44. Перечислите основные виды диффузии на поверхности твердых тел?
45. Перечислите основные механизмы диффузии нанокластеров по поверхности твердых тел.
46. Перечислите основные механизмы изменения дисперсности нанесенных нанокластеров на поверхности твердых тел.

47. Каким соотношением определяется величина контактного угла при соприкосновении капли жидкости с поверхностью твердого тела?
48. В чем суть классической теории роста кристаллов Косселя - Странского?
49. Перечислите основные механизмы формирования частиц или пленок «гостя», нанесенного на поверхность «хозяина».
50. Перечислите основные силы, принимающие участие в адсорбционном процессе.
51. Сравните хемосорбцию и физадсорбцию.
52. Как может изменяться экспериментально получаемая величина теплоты адсорбции при изменении степени покрытия поверхности адсорбатом? И почему?
53. Что такое «термическое уравнение сорбции»?
54. Приведите схематический вид изотермы, изобары и изостеры адсорбции.
55. Перечислите основные типы изотерм адсорбции.
56. Сравните основные типы изотерм адсорбции.
57. Приведите выражение для изотермы адсорбции Генри.
58. Приведите выражение для изотермы адсорбции Ленгмюра.
59. Приведите выражение для изотермы адсорбции БЭТ.
60. Что такое «капиллярная конденсация»?
61. Чем обратимая капиллярная конденсация отличается от необратимой капиллярной конденсации?
62. Перечислите основные стадии гетерогенных реакций.
63. Приведите кинетическое описание процесса адсорбции?
64. Приведите кинетическое описание процесса десорбции?
65. В чем суть «закона действующих поверхностей»?
66. Выведите выражение для скорости мономолекулярной реакции на поверхности твердого тела.
67. Выведите выражение для скорости бимолекулярной реакции на поверхности твердого тела.

68. Сравните с точки зрения кинетики механизм Ленгмюра - Хиншельвуда и механизм Или - Ридила для каталитической гетерогенной реакции.
69. В чем суть метода Тёмкина при описании кинетики сложных реакций?
70. Какие модели и приближения используются при описании формальной кинетики топохимических реакций?
71. Сравните травление металлов и оксидирование металлов с точки зрения кинетики?
72. Сравните различные случаи испарения твердых тел: равновесие, испарение в вакуум, ячейка Кнудсена.
73. В чем суть модели «терраса – ступень – излом» в процессе испарения кристаллов?
74. Сравните особенности растворения твердых тел: молекулярные кристаллы, металлы, полупроводники.
75. Какова основная особенность поверхности полупроводников с точки зрения зонной теории?
76. Какие типы гетерогенных катализаторов вам известны?
77. Что такое «активный центр» гетерогенного катализатора?
78. Что такое «удельная каталитическая активность»?
79. В чем суть правила постоянства удельной каталитической активности Г.К. Борескова?
80. В чем суть принципа геометрического соответствия реагента и катализатора?

Примерный перечень вопросов к экзамену по всему курсу

1. Общая методика приготовления чистой поверхности монокристаллов.
2. Способы создания нанокластеров.
3. Адсорбенты. Базовые классификации.
4. Методики формирования углеродных пористых материалов.
5. Метод осаждения для приготовления оксидных адсорбентов.

6. Методы исследования поверхности: спектроскопия.
7. Методы исследования поверхности: микроскопия.
8. Методы исследования поверхности: структурные и текстурные методы.
9. Методы исследования адсорбции на пористых телах.
10. Кристаллография поверхности (общие положения).
11. Кристаллическая структура поверхности металлов.
12. Особенности кристаллической структуры ковалентных кристаллов.
13. Особенности кристаллической структуры поверхности ионных кристаллов.
14. Особенности кристаллического строения нанокластеров.
15. Особенности электронного строения нанокластеров.
16. Основные подходы к термодинамике поверхности.
17. Метод Гиббса. Понятие «поверхностные избытки».
18. Изотерма адсорбции Гиббса.
19. Поверхностное натяжение.
20. Термодинамика поверхности по Гиббсу.
21. Особенности термодинамики дисперсных систем.
22. Работа когезии и работа адгезии.
23. Особенности самодиффузии.
24. Особенности гетеродиффузии.
25. Коэффициент диффузии.
26. Диффузия невзаимодействующих и взаимодействующих частиц.
27. Частные случаи поверхностной диффузии: направленная, восходящая, аномальная.
28. Механизмы поверхностной диффузии.
29. Механизмы диффузии нанокластеров по поверхности твердых тел.

30. Механизмы изменения дисперсности нанесенных нанокластеров на поверхности твердых тел.
31. Особенности взаимодействия капли с поверхностью твердого тела.
32. Рост кристаллов.
33. Механизмы формирования частиц или пленок «гостя», нанесенного на поверхность «хозяина».
34. Хемосорбция и физадсорбция.
35. Термическое уравнение адсорбции: Изотерма, Изобара, Изостера.
36. Изотермы адсорбции: Генри, Ленгмюра, Фаулера - Гугенгейма, ФХХ, БЭТ.
37. Капиллярная конденсация: обратимая.
38. Капиллярная конденсация: необратимая.
39. Кинетика адсорбции / десорбции.
40. Закон действующих поверхностей.
41. Моно- и бимолекулярные реакции на поверхности твердых тел.
42. Каталитические гетерогенные реакции. Механизм «Ленгмюра – Хиншельвуда».
43. Каталитические гетерогенные реакции. Механизм «Или - Ридила».
44. Кинетика сложных реакций по Тёмкину.
45. Формальная кинетика топохимических реакций.
46. Основные кинетические закономерности окисления металлов: травление.
47. Основные кинетические закономерности окисления металлов: оксидирование.
48. Испарение твердых тел: равновесие, испарение в вакуум, ячейка Кнудсена.
49. Морфология поверхности в процессе испарения монокристаллов.
50. Особенности растворения твердых тел различного строения.

51. Особенности электронного строения поверхности полупроводников.
52. Основы гетерогенного катализа.
53. Современные взгляды на природу каталитической активности.

7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

а) основная литература:

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

б) дополнительная литература:

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.

в) *программное обеспечение и Интернет-ресурсы:*

1. Нартова А.В. Химия поверхности твердых тел. Материалы лекции. Режим доступа: [<http://fen.nsu.ru/posob/htt/surface.pdf>]
2. Нартова А.В., Бурмасов В.С., Квон Р.И. Исследование поверхности твердых тел методами туннельной и атомно-силовой микроскопии. Методическое пособие по выполнению лабораторных работ. Выпуск 6. Режим доступа: [http://www.phys.nsu.ru/innovation/2008/Met_STM_Nartova.pdf]
3. Using XPS PEAK Version 4.1. (November 2000). Пакет обработки спектров. Режим доступа: [<http://sun.phy.cuhk.edu.hk/~surface/XPSPEAK/XPSPEAKUsersguide.doc>]
4. Quases-Tougaard. Software Package. Ver. 5.0. Пакет обработки спектроскопической информации. Режим доступа: [www.quases.com]
5. Scan master (Professional scanning & analysis program for SPM). Пакет программ обработки микроскопического изображения.
1. Базы данных NIST Database. Режим доступа: [<http://srdata.nist.gov/>] [<http://www.nist.gov/cstl>]

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины

- Ноутбук, медиа-проектор, экран.
- Программное обеспечение для демонстрации слайд-презентаций.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО и с ОС ВПО, принятым в ФГАОУ ВО Новосибирский национальный исследовательский государственный университет, с учетом рекомендаций ООП ВПО по направлению «020100 ХИМИЯ».

Автор: Нартова Анна Владимировна, к.х.н., доцент кафедры химии твердого тела ФЕН, н.с. ИК СО РАН

Программа одобрена на заседании кафедры химии твердого тела
29 августа 2014 г.

Секретарь кафедры, к.х.н.  Т. Н. Дребушак