

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

Химический факультет

УТВЕРЖДЕНО:  
И.о. декана  
А. С. Князев

Рабочая программа дисциплины

**Физико-химия поверхности нанокompозитных систем**

по направлению подготовки

**04.04.01 Химия**

Направленность (профиль) подготовки:  
**Химия современных материалов и технологий**

Форма обучения  
**Очная**

Квалификация  
**Химик-исследователь**

Год приема  
**2024**

СОГЛАСОВАНО:  
Руководитель ОП  
А.С. Князев

Председатель УМК  
В.В. Шелковников

Томск – 2024

## **1. Цель и планируемые результаты освоения дисциплины**

Целью освоения дисциплины является формирование следующих компетенций:

ОПК-1 Способен выполнять комплексные экспериментальные и расчетно-теоретические исследования в избранной области химии или смежных наук с использованием современных научных приборов.

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

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

ПК-2 Способен к решению профессиональных производственных задач.

Результатами освоения дисциплины являются следующие индикаторы достижения компетенций:

РООПК 1.1 Знает основные теоретические положения, экспериментальные и расчетные методы, применяемые в выбранной области химии

РООПК 1.2 Знает теоретические основы инструментальных методов исследования веществ для грамотного планирования научного исследования

РООПК 1.3 Умеет применять существующие и разрабатывать новые методики получения и характеристики веществ и материалов

РООПК 1.4 Умеет использовать современное научное оборудование, расчетно-теоретические методы и профессиональное программное обеспечение для решения задач в избранной области химии или смежных наук

РООПК 2.1 Знает основные требования к методам обработки и представления результатов экспериментальных и расчетно-теоретических работ в избранной области химии или смежных наук

РООПК 2.2 Умеет анализировать, интерпретировать и обобщать данные, представленные в литературе и полученные в результате проведенных исследований в избранной области химии или смежных наук

РОПК 1.1 Умеет разрабатывать стратегию научных исследований, составлять общий план и детальные планы отдельных стадий

РОПК 1.2 Умеет выбирать экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи, используя достижения современной химической науки, и исходя из имеющихся, материальных, информационных и временных ресурсов

РОПК 2.2 Умеет производить 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 Блоку 1 «Дисциплины (модули)».

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

### **4. Семестр(ы) освоения и форма(ы) промежуточной аттестации по дисциплине**

Первый семестр, экзамен

### **5. Входные требования для освоения дисциплины**

Для успешного освоения дисциплины требуются компетенции, сформированные в ходе освоения образовательных программ предшествующего уровня образования.

### **6. Язык реализации**

Русский

### **7. Объем дисциплины**

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**

#### **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**

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.

Оценочные материалы текущего контроля размещены на сайте ТГУ в разделе «Информация об образовательной программе» - <https://www.tsu.ru/sveden/education/eduop/>.

### **10. Порядок проведения и критерии оценивания промежуточной аттестации**

Экзамен в первом семестре проводится в устной форме путем защиты устного доклада по теме выбранного студентом индивидуального задания, оформленного в виде презентации и аналитической записки.

Оценочные материалы для проведения промежуточной аттестации размещены на сайте ТГУ в разделе «Информация об образовательной программе» - <https://www.tsu.ru/sveden/education/eduop/>.

### **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 практических занятий по дисциплине.

### **12. Перечень учебной литературы и ресурсов сети Интернет**

а) основная литература:

– С.-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:

– ScienceDirect [Electronic resource] / Elsevier B.V. – Electronic data. – Amsterdam, Netherlands, 2016. – URL: <http://www.sciencedirect.com/>

– Scopus [Electronic resource] / Elsevier B.V. – Electronic data. – Elsevier, 2016. – URL: <https://www.scopus.com/>

– 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 OneNote, 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.