Державний вищий навчальний заклад

«Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника»

Кафедра теоретичної і прикладної хімії

“**ЗАТВЕРДЖУЮ**”

Проректор \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

“\_\_\_\_”\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ 2017 р.

## РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

**Хімія поверхні твердих тіл** \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

(шифр і назва навчальної дисципліни)

спеціальність \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_**102 Хімія\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_**\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

(шифр і назва спеціальності)

спеціалізація\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

(назва спеціалізації)

інститут, факультет Факультет природничих наук\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

(назва інституту, факультету)

Івано-Франківськ – 2017 рік

Робоча програма навчальної дисципліни **«Хімія поверхні твердих тіл»** для студентів спеціальності 102 Хімія.

„\_\_\_” \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_, 2017 р. – \_\_\_\_ с.

Розробники:

**Миронюк І.Ф.**, професор, д.х.н., професор кафедри теоретичної і прикладної хімії.

Робоча програма затверджена на засіданні кафедри теоретичної і прикладної хімії

протокол від “\_\_\_\_”\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_2017 р. № \_\_\_

Завідувач кафедри \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ (\_\_\_\_\_\_\_\_\_Миронюк І.Ф.\_\_\_\_\_\_\_)

(підпис) (прізвище та ініціали)

“\_\_\_\_”\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ 2017 р.

Схвалено методичною комісією факультету, інституту.

Протокол від “\_\_\_\_”\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_2017 р. № \_\_\_

“\_\_\_”\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_2017 р.

Голова \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ (\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_)

(підпис) (прізвище та ініціали)

© Татарчук Т.Р., 2017 рік

1. **Опис навчальної дисципліни**

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| Найменування показників | Галузь знань, напрям підготовки, освітньо-кваліфікаційний рівень | Характеристика навчальної дисципліни | |
| **денна форма навчання** | **заочна форма навчання** |
| Кількість кредитів – 3 | Галузь знань  10 – природничі науки | вибіркова | |
| спеціальність  102 - хімія |
| Модулів – 3 |  | **Рік підготовки:** | |
| Змістових модулів – 3 | 2-й | - |
| Індивідуальне науково-дослідне завдання  \_\_реферат\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_  (назва) | **Семестр** | |
| Загальна кількість годин – 90 | 3-й | - |
| **Лекції** | |
| Тижневих годин  для денної форми навчання:  аудиторних – 2  самостійної роботи студента – 2.74 | Освітньо-кваліфікаційний рівень:  доктор філософії | 28 год. | - |
| **Практичні, семінарські** | |
| 10 год. | - |
| **Лабораторні** | |
| - | - |
| **Самостійна робота** | |
| 52 год. | - |
| Вид контролю:  екзамен | |

Співвідношення кількості годин аудиторних занять до самостійної і індивідуальної роботи становить: 38 / 52 = 0,73

**2. Мета та завдання навчальної дисципліни**

**Мета**: надати студентам уявлення про сучасний стан квантової хімії твердого тіла з наголосом на теорію наноструктурованих матеріалів, а також низки фундаментальних проблем, які пов'язані з теоретичними дослідженнями в галузі хімії поверхні.

**Завдання**: мотивація студентів до вивчення сучасних проблем і результатів хімії поверхні, зокрема експериментальних та теоретичних підходів до дослідження модельних та

реальних поверхонь різного типу, а також особливостей перебігу реакцій на різних поверхнях. Формування уявлень про основні варіанти та особливості взаємодії молекули з поверхнею, а також основні стадії хімічної реакції на поверхні..

У результаті вивчення навчальної дисципліни студент повинен

**знати:**

- традиційні і нові напрямки в квантовій хімії твердого тіла, такі як метод Хюкеля,

зонна теорія твердого тіла, гамільтоніан Хабарда та метод валентних зв’язків;

- модельні уявлення про границі розділу твердого тіла і поверхні; особливості кристалографії та кристалохімії поверхні;;

- основні теоретичні підходи до моделювання структурних та електронних властивостей чистої поверхні;

- моделі фізичної та хімічної адсорбції;

- основні вимоги до хімічної поверхні твердих тіл на сучасному рівні розвитку науки.

**вміти:**

* використовувати отриманні знання для розв’язання сучасних задач;
* проводити аналітичні розрахунки електронної будови простих одновимірних і двовимірних кристалічних структур у рамках метода Хюкеля та інтерпретувати результати розрахунків.;
* орієнтуватися в сучасній літературі з хімії поверхні та сучасних засобах моделювання. Грамотно інтерпретувати результати сучасних досліджень (незрідка комбінованих, теоретичних та експериментальних) перебігу хімічних реакцій на поверхнях різного типу.

**3. Програма навчальної дисципліни**

**Одноелектронне наближення та зонна теорія твердого тіла.** Метод Хюкеля та наближення Хартрі-Фока у теорії електронної будови кристалів. Енергетичний спектр одновимірного ланцюжка атомів з простою елементарною коміркою у π-електронному наближенні. Опис домішкових станів у методі Хюкеля..

**Електричні і магнітні властивості з точки зору зонної теорії.** Використання трансляційної симетрії для отримання точного одноелектронногоспектру двох та тривимірних решіткових систем у методі Хюкеля. Одноелектроннийенергетичний спектр графена. Електрична провідність з точки зору зонної теорії. Описмолекулярних магнетиків в рамках методу Хюкеля

**Хімія та поверхня.** Традиційні і нові напрямки в науці про поверхні. Сучасні тенденції використання теоретичних методів в науці про поверхні. Мотивація докладного експериментального і теоретичного вивчення поверхонь і меж розділу фаз. Реальна поверхня: основні типи недосконалостей. Ретельно підготовлена поверхня як об'єкт дослідження.

**Експериментальні методи хімії поверхні очами хіміка-теоретика.** Теоретичний мінімум основних експериментальних методів дослідження поверхні; суть методів та інформація, яку вони дозволяють отримати. Ультрафіолетова фотоелектронна спектроскопія, рентгенівська фотоелектронна спектроскопія, Оже- електронна спектроскопія, EXAFS (Extended X-ray absorption fine structure), дифракція повільних електронів, автоіонна мікроскопія, автоелектронна мікроскопія, скануюча тунельна мікроскопія, атомна силова мікроскопія.

**Теоретичні підходи в хімії поверхні.** Ідеальна поверхня як дефект нескінченного тривимірного періодичного кристала: релаксація, реконструкція, поверхневі електронні стани. Двовимірна кристалографія поверхні: решітки Браве, Федоровські групи, елементарний кристалічний шар, незвідна кристалічна пластина. Планігони, особливість опису поверхні в термінах планігонів. Проблема локалізації / делокалізації при теоретичному описі процесів на поверхні. Основні типи мікроскопічних моделей. Неперіодичні: вільний кластер, насичений кластер, занурений кластер; періодичні: суперкомірки, циклічний кластер. «За» і «проти» використання цих моделей у випадку різних іонних, ковалентних і металевих структур.

**Взаємодії з поверхнею та на поверхні.** Основні варіанти взаємодії молекули з поверхнею: адсорбція, розсіювання, утворення квазичастинок, утворення резонансів. Приклади адсорбції: СO / Pt, H2 / Pd (001), O2 / Pt (111), Н2 / Si (100). Коефіцієнт прилипання. Проблема неадіабатичності при вивченні адсорбції.

**Поверхнева дифузія.** Закономірності поверхневої дифузії. Основна відмінність дифузії на поверхні від дифузії в газовій фазі. Найпростіший варіант: дифузія одного атома по щільній упаковці таких же атомів. Можливі варіанти дифузії на поверхні з каналами. Що з цього може бути застосовано для атомно гладких поверхонь. Особливості дифузії великих молекул на поверхні.

**Реакції на поверхні.** Основні стадії хімічної реакції на поверхні. Послідовність побудови моделей: рівноважна адсорбція, дифузія реагентів, хімічні взаємодії. Залежність коефіцієнтів дифузії від ступеня і геометрії покриття поверхні, кореляція (взаємозалежність) дифузійних потоків. Ускладнення моделі: підповерхневі атоми, поверхневі оксиди, реконструкція поверхні. Основні типи просторово-часових структур, що утворюються в ході хімічної реакції на поверхні.

**Метод Монте-Карло.** Прості приклади: обчислення числа π,обчислення інтеграла. Взаємозв'язок випадкових процесів і диференціальних рівнянь. Методи генерування (псевдо) випадкових чисел. Кінетичні методи Монте-Карло. Застосування методів Монте-Карло. Основні уявлення по метод ab initio KMC.

**Наноструктуровані поверхні.** Тонкі і товсті плівки на поверхні твердого тіла. Механізми зростання плівок. Орієнтаційні співвідношення. Утворення і зростання зародків. Підходи до моделювання росту плівок. Геометрично-ймовірнісні моделі. Формалізм випадкових мозаїк. Поверхня як підкладка для наночастинок і наноансамблей. Наноструктуровані поверхні. Квантові точки. Chemical vapour deposition (CVD). Самоорганізація поверхневих наноструктур. Фасетовані поверхні.

**3.1. Програма навчальної дисципліни**

**Змістовий модуль 1.**

Тема 1. Одноелектронне наближення та зонна теорія твердого тіла.

Тема 2. Електричні і магнітні властивості з точки зору зонної теорії.

Тема 3. Хімія та поверхня.

Тема 4. Експериментальні методи хімії поверхні очами хіміка-теоретика.

Тема 5. Теоретичні підходи в хімії поверхні.

**Змістовий модуль 2.**

Тема 6. Взаємодії з поверхнею та на поверхні.

Тема 7. Поверхнева дифузія.

Тема 8. Реакції на поверхні.

Тема 9. Метод Монте-Карло.

Тема 10. Наноструктуровані поверхні.

**4. Структура навчальної дисципліни**

|  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| Назви змістових модулів і тем | Кількість годин | | | | | |
| денна форма | | | | | |
| усього | у тому числі | | | | |
| л | п | лаб | інд | с.р. |
| 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 |
| **Змістовий модуль 1.** | | | | | | |
| Тема 1. Одноелектронне наближення та зонна теорія твердого тіла. | 12 | 2 |  |  |  | 10 |
| Тема 2. Електричні і магнітні властивості з точки зору зонної теорії. | 12 | 2 |  |  |  | 10 |
| Тема 3. Хімія та поверхня. | 8 | 2 | 2 |  |  | 4 |
| Тема 4. Експериментальні методи хімії поверхні очами хіміка-теоретика. | 12 | 4 | 4 |  |  | 4 |
| Тема 5. Теоретичні підходи в хімії поверхні. . | 12 | 4 | 4 |  |  | 4 |
| **Разом за змістовим модулем 1** | **56** | **14** | **10** |  |  | **32** |
| **Змістовий модуль 2.** | | | | | | |
| Тема 6. Взаємодії з поверхнею та на поверхні. | 6 | 2 |  |  |  | 4 |
| Тема 7. Поверхнева дифузія.. | 8 | 4 |  |  |  | 4 |
| Тема 8. Реакції на поверхні. | 8 | 4 |  |  |  | 4 |
| Тема 9. Метод Монте-Карло. | 6 | 2 |  |  |  | 4 |
| Тема 10. Наноструктуровані поверхні. | 6 | 2 |  |  |  | 4 |
| **Разом за змістовим модулем 2** | **34** | **14** |  |  |  | **20** |
| **Змістовий модуль 3. Індивідуально-наукове завдання (перевірка самостійної роботи)** | | | | | | |
| Реферат | - |  |  |  |  | - |
| **Разом за змістовим модулем 3** | **-** |  |  |  |  | **-** |
| **Усього годин** | **90** | **28** | **10** |  |  | **52** |

**6. Теми практичних та семінарських занять**

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| №  з/п | Назва теми | Кількість  годин |
| 1. | Тема 1. Хімія та поверхня | 2 |
| 2. | Тема 2. Експериментальні методи хімії поверхні очами хіміка-теоретика | 4 |
| 3. | Тема 3. Теоретичні підходи в хімії поверхн. | 4 |
|  | **Разом** | **10** |

**7. Самостійна робота**

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| №  з/п | Назва теми | Кількість  годин |
|  | Тема 1. Одноелектронне наближення та зонна теорія твердого тіла. | 10 |
|  | Тема 2. Електричні і магнітні властивості з точки зору зонної теорії. | 10 |
|  | Тема 3. Хімія та поверхня. | 4 |
|  | Тема 4. Експериментальні методи хімії поверхні очами хіміка-теоретика | 4 |
|  | Тема 5. Теоретичні підходи в хімії поверхні. | 4 |
|  | Тема 6. Взаємодії з поверхнею та на поверхні | 4 |
|  | Тема 7. Поверхнева дифузія. | 4 |
|  | Тема 8. Реакції на поверхні. | 4 |
|  | Тема 9. Метод Монте-Карло. | 4 |
|  | Тема 10. Наноструктуровані поверхні. | 4 |
|  | **Разом** | **52** |

**9. Індивідуальні завдання**

Передбачено виконання індивідуального завдання – реферату, присвяченого певній тематиці самостйної роботи. Кожен студент оформляє реферат відповідно до вимог і здає викладачу вкінці семестру. Максимальна кількість балів, яку може отримати студент – **20 балів**.

**10. Методи навчання**

Лекції, практичні заняття, самостійна робота (написання реферату), виконання розрахункових задач (домашні завдання).

**11. Методи контролю**

Опитування та контрольна робота за темами практичних занять, написання реферату, екзамен.

**12. Розподіл балів, які отримують студенти**

Матеріал курсу «Хімія поверхні твердих тіл» відповідно до навчальної програми містить 10 тем. Оцінка роботи студентів проводиться за модульно-рейтинговою системою і включає такі види роботи над курсом: засвоєння теоретичного матеріалу, домашні завдання, контрольна робота, написання реферату.

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| Поточне тестування та самостійна робота | | | | Підсумко-вий тест (екзамен) | Сума |
| Змістовий модуль 1 (практичні заняття) | Змістовий  модуль 2  (контрольна робота) | Змістовий  модуль 3 (реферат) | 50 | | 100 |
| Теми 1-3 | Теми 1 - 10 | 20 балів |
| 15 балів | 15 балів |

Для зарахування модуля студент повинен набрати не менше 50 % балів за кожний модуль.

**Шкала оцінювання: національна та ECTS**

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| Сума балів за всі види навчальної діяльності | ОцінкаECTS | Оцінка за національною шкалою | |
| для екзамену, курсового проекту (роботи), практики | для заліку |
| 90 – 100 | **А** | відмінно | зараховано |
| 80 – 89 | **В** | добре |
| 70 – 79 | **С** |
| 60 – 69 | **D** | задовільно |
| 50 – 59 | **Е** |
| 26 – 49 | **FX** | незадовільно з можливістю повторного складання | не зараховано з можливістю повторного складання |
| 0-25 | **F** | незадовільно з обов’язковим повторним вивченням дисципліни | не зараховано з обов’язковим повторним вивченням дисципліни |

**13. Методичне забезпечення**

1. Навчальна програма дисципліни.

2. Робоча програма навчальної дисципліни.

3. Плани практичних занять.

4. Методичні вказівки до практичних занять та самостійної роботи студентів.

**14. Рекомендована література**

**Базова**

1. Иванов В.В. Слета Л.А. Квантовая химия. –Харьков Фолио, 2007.– 443 с.

2. Дьячков П.Н. Углеродные нанотрубки: строение, свойства, применения. - М.: издательство БИНОМ ∕ Лаборатория знаний, 2006. - 290 с.

3. Черановский В.О. Эффективные спиновые гамильтонианы в теории низкоразмерных магнетиков. Вісник ХНУ. – 2004, №626. Хімія. Вип.11(34). С.367-382.

4. Gross A. Theoretical Surface Science; Microscopic Perspective. Springer, Berlin, 2002.

5. Desjonqueres M. C., D. Spanjaard D. Concepts in Surface Physics. Springer, Berlin, 2000.

6. Davison S. G., Steslicka M. Basic Theory of Surface States. Oxford University Press, USA, 1996.

**Допоміжна**

Релевантні оглядові публікації у наступних періодичних виданнях

1. Surface Science Reports

2. Surface Science

3. Applied Surface Science

4. Topics in Catalysis