

*Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования «Российский университет дружбы народов»*

Факультет физико-математических и естественных наук

Рекомендовано МССН
по направлению 04.00.00 «Химия»

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Наименование дисциплины

ФИЗИКО-ХИМИЯ ПОВЕРХНОСТИ И ХЕМОСОРБЦИЯ

Рекомендуется для направления подготовки

04.04.01 «ХИМИЯ»

Направленность программы (профиль)

«ФУНДАМЕНТАЛЬНАЯ И ПРИКЛАДНАЯ ХИМИЯ»

1. Цели и задачи дисциплины:

Целью дисциплины является формирование у студентов-химиков второй ступени углубленных знаний о специфических свойствах поверхности и явлениях на межфазной границе (наука surface science), имеющих большое значение для нанобъектов, ознакомление с теоретическим описанием хемосорбции и современными экспериментальными методами зондирования поверхности и контактирующих с ней молекул.

Основной задачей изучения дисциплины является формирование компетенций, которые дадут возможность студентам эффективно применять в профессиональной деятельности полученные знания, умения и навыки. Эти знания используются студентами для трактовки гетерогенно-каталитических процессов, адсорбции, хроматографии, разработки новых материалов для катализа, сенсорики, медицины и нанотехнологий.

2. Место дисциплины в структуре ОП ВО:

Дисциплина «Физико-химия поверхности и хемосорбция» относится к вариативной части блока1 для модуля 3 учебного плана.

В таблице № 1 приведены предшествующие и последующие дисциплины, направленные на формирование компетенций дисциплины в соответствии с матрицей компетенций ОП ВО.

Таблица № 1

Предшествующие и последующие дисциплины, направленные на формирование компетенций

№ п/п	Шифр и наименование компетенции	Предшествующие дисциплины	Последующие дисциплины
Универсальные компетенции			
УК-6	Способен определить и реализовать приоритеты собственной деятельности и способы ее совершенствования на основе самооценки	Актуальные задачи современной химии Кинетика элементарных реакций Статистическая термодинамика Катализ Термодинамика неравновесных процессов Нанохимия Адсорбция НИР	Актуальные задачи современной химии Химия окружающей среды Современные проблемы менеджмента в химии Избранные главы квантовой химии Физические методы исследования в катализе Применение хроматографии в катализе НИР Преддипломная практика
Профессиональные компетенции			
М-ПК-1-н	Способен планировать работу и выбирать адекватные методы решения научно-исследовательских задач в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией наук	Кинетика элементарных реакций Статистическая термодинамика Катализ Термодинамика неравновесных процессов Нанохимия Адсорбция НИР	Химия окружающей среды Современные проблемы менеджмента в химии Избранные главы квантовой химии Физические методы исследования в катализе Применение хроматографии в катализе НИР Преддипломная практика
М-ПК-2-н	Способен проводить патентно-информационные исследования в выбранной области химии и/или смежных наук	Кинетика элементарных реакций Статистическая термодинамика Катализ Термодинамика неравновесных процессов	Химия окружающей среды Современные проблемы менеджмента в химии Избранные главы квантовой химии Физические методы исследования в катализе Применение хроматографии в катализе

	Нанохимия Адсорбция НИР	НИР Преддипломная практика
--	-------------------------------	-------------------------------

3. Требования к результатам освоения дисциплины:

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование следующих компетенций:

Формируемые компетенции

Компетенции	Название компетенции	Составляющие компетенции
УК-6	Способен определить и реализовать приоритеты собственной деятельности и способы ее совершенствования на основе самооценки	УК-6.1. Оценивает свои ресурсы и их пределы (личностные, ситуативные, временные), оптимально их использует для успешного выполнения порученного задания. УК-6.2. Определяет приоритеты профессионального роста и способы совершенствования собственной деятельности на основе самооценки по выбранным критериям; УК-6.3. Выстраивает гибкую профессиональную траекторию, используя инструменты непрерывного образования, с учетом накопленного опыта профессиональной деятельности и динамично изменяющихся требований рынка труда
М-ПК-1-н	Способен планировать работу и выбирать адекватные методы решения научно-исследовательских задач в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках	М-ПК-1-н-1. Составляет общий план исследования и детальные планы отдельных стадий, М-ПК-1-н-2. Выбирает экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов
М-ПК-2-н	Способен проводить патентно-информационные исследования в выбранной области химии и/или смежных наук	М-ПК-2-н-1. Проводит поиск специализированной информации в патентно-информационных базах данных М-ПК-2-н-2. Анализирует и обобщает результаты патентного поиска по тематике проекта в выбранной области химии (химической технологии)

В результате изучения дисциплины студент должен:

Знать:

- основы физикохимии поверхности твердых тел (металлов, полупроводников и изоляторов), применяемых в качестве адсорбентов и катализаторов,
- значение хемосорбционных взаимодействий и их роль в химических процессах на границе раздела фаз,
- закономерности хемосорбции, имеющие первостепенное значение для теоретической трактовки гетерогенного катализа. Характер неоднородности реальной поверхности твердого тела, спектр поверхностных комплексов и промежуточных состояний.

Уметь:

- анализировать результаты физико-химического исследования состояния поверхности адсорбентов и катализаторов и факторы, влияющие на их активность и селективность, используя знания о специфических взаимодействиях на межфазных границах;
- обсуждать полученные в магистерской диссертации результаты с учетом хемосорбционных взаимодействий;
- вести научную дискуссию по вопросам физико-химических свойств поверхности и методов их исследования;

- применять теоретические законы к решению различных прикладных задач, проводить физико-химические эксперименты, использовать современную справочную литературу, способы математической обработки результатов работы и их обобщение.

Владеть:

- знаниями о фундаментальных представлениях и закономерностях образования химических связей между молекулами газа, жидкости и поверхностью твердого тела или кластера;
- знаниями о физико-химических особенностях поверхности твердого тела и применять их в профессиональной деятельности при теоретическом и экспериментальном исследованиях адсорбентов и катализаторов, новых материалов для различных областей химии;
- методами изучения механизмов гетерогенных явлений, информацией о современной научной аппаратуре по тематике исследования поверхностных процессов.

4. Объем дисциплины и виды учебной работы

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетных единиц.

Вид учебной работы	Всего часов	Модули			
		4			
Аудиторные занятия (всего)	48	48			
В том числе:					
Лекции	24	24			
Практические занятия (ПЗ)					
Семинары (С)					
Лабораторные работы (ЛР)	24	24			
Самостоятельная работа (всего)	60	60			
Общая трудоемкость	час	108	108		
	зач. ед.	3	3		

5. Содержание дисциплины

5.1. Содержание разделов дисциплины

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела (темы)
1.	Введение	Основные черты химической адсорбции. Критерии отличия хемосорбции от физической адсорбции. Хемосорбция и гетерогенный катализ. Коррозия. Проблема дезактивации катализаторов.
2.	Хемосорбционная связь. Неоднородность поверхности	Схема диссоциативной хемосорбции и её энергетическая диаграмма. Равновесная хемосорбция. Изотермы адсорбции на неоднородной поверхности. Метод «контролирующей полосы» Рогинского. Простые теории хемосорбции. Ковалентная связь. Ионсорбция.
3	Многообразие поверхностных комплексов	Комплексы (формы адсорбции) СО и олефинов. Барьер хемосорбции. Молекулярные зонды поверхности металлов и оксидов металлов (ИК-спектры адсорбированного СО и пиридина). Интермедиаты на примере каталитического синтеза метанола из СО и Н ₂ .
4	Теории хемосорбции	Электронные состояния на поверхности кристалла.

		Задача Тамма. Анализ хемосорбционных состояний. Методы теории хемосорбции: кластерные квантово-химические расчеты, модель «желе»-металла в методе функционала плотности. Зонная теория твердого тела. Поверхность оксидов. Электронная теория адсорбции и катализа на полупроводниках Ф.Ф.Волькенштейна.
5	Особенности хемосорбции на металлах и оксидах	Хемосорбция и поверхностная диффузия. Быстрая и медленная стадии хемосорбции. Коэффициент прилипания. Энергетика хемосорбции на металлах и сплавах. Роль кристаллографии поверхности металла и хемосорбционное фасетирование. Образование упорядоченных фаз. Двумерные диаграммы. Дефекты поверхности твердого тела. Кислотные центры поверхности оксидов льюисовского и бренстедовского типа, методы тестирования. Типы поверхностных гидроксильных групп. Связь электронных свойств и кислотности поверхности оксидных катализаторов с активностью и селективностью. Формы хемосорбции кислорода и их роль в каталитических реакциях окисления олефинов.
6	Экспериментальные методы исследования поверхности твердых тел и состояния адсорбатов	Методы исследования поверхности твердых тел и адсорбированных частиц: термодесорбция, спектроскопия в ИК, УФ и видимой области, рентгенофотозлектронная и Оже-спектроскопия, спектроскопия КР, дифракция медленных электронов, масс-спектрометрия вторичных ионов, сканирующая туннельная микроскопия, AFM, EXAFS, XANES.

5.2. Разделы дисциплин и виды занятий

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Лекц.	Практ. зан.	Лаб. зан.	Семина	СРС	Всего час.
1	Введение	2				2	4
2	Хемосорбционная связь. Неоднородность поверхности.	4		2		14	20
3	Многообразие поверхностных комплексов	4		4		14	22
4	Теории хемосорбции	6		6		10	22
5	Особенности хемосорбции на металлах и оксидах	4		6		10	20
6	Экспериментальные методы исследования поверхности твердых тел и состояния адсорбатов	4		6		10	20
		24		24		60	108

6. Лабораторный практикум

№ п/п	№ раздела дисциплины	Тематика практических занятий (семинаров)	Трудоемкость (час.)
2	Хемосорбционная связь. Неоднородность поверхности.	Энергетическая диаграмма. Энергия активации адсорбции. Теплота адсорбции (хемосорбции)	2

3	Многообразие поверхностных комплексов	Адсорбция СО и олефиновые комплексы на металлах. Фотоэлектронные спектры. ИК спектры адсорбатов-зондов.	4
4	Теории хемосорбции	Электронные состояния на поверхности кристалла. Задача Тамма. Анализ хемосорбционных состояний. Зонная модель металлов, оксидов изоляторов и полупроводников. Электронная теория адсорбции и катализа на полупроводниках Ф.Ф.Волькенштейна.	6
5	Особенности хемосорбции на металлах и оксидах	Связь электронных свойств и кислотности поверхности оксидных катализаторов с активностью и селективностью.	6
6	Экспериментальные методы исследования поверхности твердых тел и состояния адсорбатов	Методы исследования поверхности твердых тел и адсорбированных частиц. Презентации студентов.	6
	Всего		24

7. Практические занятия (семинары)

Не предусмотрено учебным планом.

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины:

Наименование дисциплины (модуля), практик в соответствии с учебным планом	Наименование специальных* помещений и помещений для самостоятельной работы	Оснащенность специальных помещений и помещений для самостоятельной работы	Перечень лицензионного программного обеспечения.
Физико-химия поверхности и хемосорбция	ул. Орджоникидзе, д.3, Учебная аудитория для проведения занятий лекционного типа, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации, а также для самостоятельной работы: ауд.№ 527	Комплект специализированной мебели; технические средства: проектор, экран для проекторов, ноутбук, столы; имеется wi-fi	Microsoft Windows 7, Код продукта № 00359-ОБМ-8992687-00246

9. Информационное обеспечение дисциплины

Учебно-научный информационный библиотечный центр РУДН	http://lib.rudn.ru/
ЭБС РУДН	http://lib.rudn.ru/MegaPro/Web
ЭБС "Университетская библиотека	http://www.biblioclub.ru

ONLINE"	
Телекоммуникационная учебно-информационная система (ТУИС) РУДН	http://esystem.pfur.ru/course/view.php?id=998
Портал фундаментального химического образования России	http://www.chemnet.ru
Научная электронная библиотека eLibrary.ru	http://www.elibrary.ru/defaultx.asp
Химическая энциклопедия	http://www.chemport.ru
XuMuK: сайт о химии для химиков	www.xumuk.ru
Базы данных, информационно-справочные и поисковые системы:	www.webofscience.com http://www.scopus.com/

10. Учебно-методическое обеспечение дисциплины:

а) основная литература

1. Теория хемосорбции. Под. Ред. Дж. Смита. М. Изд. Мир. 1988. –386 с.
2. Боресков Г.К.. Гетерогенный катализ. М.Наука.1986.–304 с. (глава 5).
3. Крылов О.В.. Гетерогенный катализ. Учебное пособие для вузов. М. ИКД «Академкнига», 2004, 679 с., главы 2,4,6,7.
4. А.Я.Розовский Катализатор и реакционная среда. М.Наука.1988.–304 с.
5. Зенгуил Э. Физика поверхности. М.Мир.1990.–528 с.
6. Блейкмор Дж. Физика твердого тела. М.:Изд.Мир.1988. –608 с.
7. Хофман Р. Строение твердых тел и поверхностей. М.: Мир.1990.–215 с..
8. Дункен Х., Лыгин В.И. Квантовая химия поверхности твердых тел. М.Мир.1980.–288 с.
9. Лекция 4. Понятие о зонной теории кристаллов. Режим доступа: <https://refdb.ru/look/2951307.html> (дата обращения 03.06.17).
10. Игорь Евгеньевич Тамм, 1897-1971. Биография. (Режим доступа: http://library.brstu.ru/static/bd/istor_ing_dela/personalia/tamm.pdf, дата обращения 03.06.17, из книги Д.К. Самина «100 великих ученых». — М.: Вече, 2000. — 592 с.).

б) дополнительная литература

1. Пентин Ю.А., Вилков Л.В. Физические методы исследования в химии. М.:Мир.Изд.АСТ. 2003, (4.45 Мб вкачать бесплатно <http://padabum.com/d.php?id=37836>)
2. Томас Дж. и др. Методы исследования катализаторов. Издательство: Мир. 1983.
3. Давыдов А.А.. ИК-спектроскопия в химии поверхности оксидов. Новосибирск, Изд. Наука СО АН СССР, 1984. –242 с.
4. В.И.Нефедов, В.Т.Черепин. Физические методы исследования поверхности твердых тел. М.Наука. 1983.–296 с.
5. Обзорные статьи И.И.Михаленко и В.Д.Ягодовского. Журнал физической химии. 2002, № 2, Журнал физической химии. 2005, № 9.

11. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)

Согласно учебному плану при изучении дисциплины предполагается проведение практических занятий, подготовки презентации с выступлением (доклад в форме реферата) по разделу 6 дисциплины. В семестре проводится промежуточный контроль – рубежная аттестация. Самостоятельная работа студентов включает в себя подготовку к этим видам работ и контроля.

Методика подготовки к практическим занятиям

Практические занятия являются одной из важных форм учебного процесса, предусмотренных учебным планом. Значение этой формы занятий определяется

требованиями диалектического метода, важнейшим из которых является проверка теоретических положений на практике, неразрывная связь теории с практикой.

Практические занятия имеют целью помочь студентам глубже уяснить теоретические положения, закрепить полученные знания, привить необходимые навыки в применении теоретических знаний в своей будущей практической деятельности.

- Практические занятия проводятся в форме решения задач, их обсуждения, выступлений с докладами. При подготовке к практическому занятию студенты должны решить задачи, указанные в задании. При решении задач либо подготовке к другим формам проведения практических занятий необходимо опираться на те знания, которые получены на лекциях, в ходе самостоятельных занятий
- Для краткого письменного изложения решения задач студентам рекомендуется иметь отдельные тетради. Во время подготовки к практическому занятию надо записывать решение задач. В кратких письменных решениях нужно делать необходимые ссылки, четко формулировать ответы на поставленные в задании вопросы.
- Перед началом практического занятия преподаватель проверяет наличие у студентов письменных решений заданий. Студенты, не подготовившиеся к практическому занятию (в том числе и по уважительным причинам), а также отсутствующие на занятиях, отчитываются перед преподавателем о выполнении задания во внеурочное время.

Правила подготовки презентации по выбрано теме раздела «Экспериментальные методы исследования поверхности твердых тел и состояния адсорбатов».

Устный доклад к презентации оформляется в виде краткого реферата.

Методические рекомендации студентам по написанию рефератов

Написание реферата является одной из форм обучения студентов, направленной на организацию и повышение уровня самостоятельной работы студентов; одной из форм научной работы студентов, целью которой является расширение научного кругозора студентов, ознакомление с методологией научного поиска.

Реферат, как форма обучения студентов, - это краткий обзор максимального количества доступных публикаций по заданной теме, с элементами сопоставительного анализа данных материалов и с последующими выводами.

При проведении обзора должна проводиться и исследовательская работа, но объем ее ограничен, так как анализируются уже сделанные предыдущими исследователями выводы и в связи с небольшим объемом данной формы работы.

Темы рефератов определяются кафедрой и содержатся в программе курса. Преподаватель рекомендует литературу, которая может быть использована для написания реферата.

Целью написания рефератов является:

- привитие студентам навыков библиографического поиска необходимой литературы (на бумажных носителях, в электронном виде);
- привитие студентам навыков компактного изложения мнения авторов и своего суждения по выбранному вопросу в письменной форме, научно грамотным языком и в хорошем стиле;
- приобретение навыка грамотного оформления ссылок на используемые источники, правильного цитирования авторского текста;
- выявление и развитие у студента интереса к определенной научной и практической проблематике с тем, чтобы исследование ее в дальнейшем продолжалось в подготовке и написании курсовых и дипломной работы и дальнейших научных трудах.

Основные задачи студента при написании реферата:

- с максимальной полнотой использовать литературу по выбранной теме (как рекомендуемую, так и самостоятельно подобранную) для правильного понимания авторской позиции;

- верно (без искажения смысла) передать авторскую позицию в своей работе;
- уяснить для себя и изложить причины своего согласия (несогласия) с тем или иным автором по данной проблеме.

Требования к содержанию:

- материал, использованный в реферате, должен относиться строго к выбранной теме;
- необходимо изложить основные аспекты проблемы не только грамотно, но и в соответствии с той или иной логикой (хронологической, тематической, событийной и др.)
- при изложении следует сгруппировать идеи разных авторов по общности точек зрения или по научным школам;
- реферат должен заканчиваться подведением итогов проведенной исследовательской работы.

Структура реферата (презентации).

1. Начинается реферат с *титального листа*.
2. За титульным листом следует *Оглавление*. Оглавление - это план реферата, в котором каждому разделу должен соответствовать номер страницы, на которой он находится.
3. *Текст* реферата. Он делится на три части: *введение, основная часть и заключение*.
 - а) *Введение* - раздел реферата, посвященный постановке проблемы, которая будет рассматриваться и обоснованию выбора темы.
 - б) *Основная часть* - это звено работы, в котором последовательно раскрывается выбранная тема. Основная часть может быть представлена как цельным текстом, так и разделена на главы. При необходимости текст реферата может дополняться иллюстрациями, таблицами, графиками, но ими не следует "перегружать" текст.
 - в) *Заключение* - данный раздел реферата должен быть представлен в виде выводов, которые готовятся на основе подготовленного текста. Выводы должны быть краткими и четкими. Также в заключении можно обозначить проблемы, которые "высветились" в ходе работы над рефератом, но не были раскрыты в работе.
4. *Список источников и литературы*. В данном списке называются как те источники, на которые ссылается студент при подготовке реферата, так и все иные, изученные им в связи с его подготовкой. В работе должно быть использовано не менее 5 разных источников, из них хотя бы один – на иностранном языке (английском или французском). Работа, выполненная с использованием материала, содержащегося в одном научном источнике, является явным плагиатом и не принимается. Оформление Списка источников и литературы должно соответствовать требованиям библиографических стандартов.

Оценивая реферат, преподаватель обращает внимание на:

- соответствие содержания выбранной теме;
- отсутствие в тексте отступлений от темы;
- соблюдение структуры работы, четка ли она и обоснована;
- умение работать с научной литературой - вычленять проблему из контекста;
- умение логически мыслить;
- культуру письменной речи;
- умение оформлять научный текст (правильное применение и оформление ссылок, составление библиографии);
- умение правильно понять позицию авторов, работы которых использовались при написании реферата;
- способность верно, без искажения передать используемый авторский материал;
- соблюдение объема работы;
- аккуратность и правильность оформления, а также технического выполнения работы.
- Реферат должен быть сдан для проверки в установленный срок.

12. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине

Материалы для оценки уровня освоения учебного материала дисциплины «Физико-химия поверхности и хемосорбция» (оценочные материалы), включающие в себя перечень компетенций с указанием этапов их формирования, описание показателей и критериев оценивания компетенций на различных этапах их формирования, описание шкал оценивания, типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы, методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций, разработаны в полном объеме и доступны для обучающихся на странице дисциплины в ТУИС РУДН.

Программа составлена в соответствии с требованиями ОС ВО РУДН.

Разработчики:

профессор кафедры
физической и коллоидной химии,
д.х.н., профессор



И.И. МИХАЛЕНКО

Руководитель программы

Профессор кафедры
органической химии



А.В.ВАРЛАМОВ

Заведующий кафедрой
физической и коллоидной химии



А.Г. ЧЕРЕДНИЧЕНКО