

Міністерство освіти і науки України

Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна

Кафедра прикладної хімії
Кафедра хімічного матеріалознавства

“ЗАТВЕРДЖУЮ”

Перший проректор

“_____” _____ 20__ р.

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Теоретичні методи хімії поверхні та твердого тіла

За напрямом підготовки 040101 "хімія"

для спеціальностей 7. 04010101 "хімія" та 8. 04010101 "хімія"

Хімічного факультету

Кредитно-модульна система
організації навчального процесу

Харків – 2014

Робоча програма навчальної дисципліни „ Теоретичні методи хімії поверхні та твердого тіла ” для студентів за напрямом підготовки 040101 "хімія" для спеціальностей 7. 04010101 "хімія" та 8. 04010101 "хімія".

Розробники: **Черановський Владислав Олегович, д.фіз.-мат. н., професор кафедри прикладної хімії та Коробов Олександр Ісаакович, д.х.н., професор кафедри хімічного матеріалознавства.**

Робоча програма затверджена на засіданні кафедри хімічного матеріалознавства

Протокол № від “ ” серпня 2014 р.

Завідувач кафедри _____ Ю.В. Холін

“ _____ ” _____ 2014 р.

Робоча програма затверджена на засіданні кафедри прикладної хімії

Протокол № 8 від “ 24 ” 04 _____ 2014 р.

Завідувач кафедри _____ В.А. Чебанов

“ 24 ” 04 _____ 2014 р

Схвалено методичною комісією хімічного факультету

Протокол № 10 від “ 14 ” 05 _____ 2014 р.

“ 14 ” _____ 05 _____ 2014 р.

Голова _____

Юрченко О.І.

1. Опис навчальної дисципліни

Найменування показників	Галузь знань, напрям підготовки, освітньо-кваліфікаційний рівень	Характеристика навчальної дисципліни
Кількість кредитів 3,0	Галузь знань 0401 «Природничі науки»	денна форма навчання дисципліна вільного вибору студента
Модулів – 1	Напрямок підготовки 040101 "хімія" Спеціальність 7. 04010101 "хімія" та 8. 04010101 "хімія"	Рік підготовки: V -й
Загальна кількість годин 100		Семестр 9 -й
		Лекції 36 год.
Тижневих годин для денної форми навчання: аудиторних – 2 самостійної роботи студента – 2.8		Освітньо-кваліфікаційний рівень: магістр, спеціаліст
		Самостійна робота 64 год.
		Вид контролю: залік

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. Цей курс є одним з замикаючих курсів блоку "Комп'ютерна хімія і молекулярний дизайн" і зорієнтований на використання знань, які студенти отримали раніше, в цій досить складній галузі теоретичної хімії..

У результаті вивчення даного курсу 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; особливості термодинамічних характеристик низькорозмірних квантових систем; традиційні і нові напрямки в хімії поверхні; 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; метод Монте-Карло; геометрико-ймовірносні моделі; наноструктуровані поверхні.

вміти: 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.

3. Програма навчальної дисципліни

Модуль 1. Лекції

Тема 1. Одноелектронне наближення та зонна теорія кристалів.

Тема 2. Електричні і магнітні властивості з точки зору зонної теорії. Використання трансляційної симетрії для отримання точного одноелектронного спектру поверхні графіта.

Тема 3. Багатоелектронні моделі в фізичній хімії твердого тіла. Проблема електронної кореляції.

Тема 4. Гамільтоніани Гейзенберга та Хабарда. Решіткова модель Кондо та металоорганічні ферімагнетики

Тема 5. Теорія збурень виродженого рівня. Ефективні низькоенергетичні спінові гамільтоніани у методі валентних зв'язків.

Тема 6. Відображення Йордана-Вігнера. Гамільтоніан Хабарда з нескінченним відштовхуванням. Теорема Нагаокі.

Тема 7. Застосування методів групи перенормировки для опису електронної будови наноструктурних матеріалів.

Тема 8. Квантові фазові переходи в наноструктурованих матеріалах.

Тема 9. Теоретичні методи моделювання температурних і польових залежностей теплоємності та намагніченості наноструктурних матеріалів. Ефект Шотткі. Перехід Пайерлса. Метод трансфер-матриці для класичних і квантових систем.

Тема 10. Хімія та поверхня.

Тема 11. Експериментальні методи хімії поверхні очима хіміка-теоретика.

Тема 12. Теоретичні підходи в хімії поверхні.

Тема 13. Взаємодії з поверхнею та на поверхні.

Тема 14. Поверхнева дифузія.

Тема 15. Реакції на поверхні.

Тема 16. Метод Монте-Карло.

Тема 17. Наноструктуровані поверхні.

Тема 18. Геометрико-ймовірнісні моделі.

4. Структура навчальної дисципліни

Модулі і теми	Кількість годин					
	Денна форма					
	Усього	у тому числі				
л		п	лаб	інд	ср	
1	2	3	4	5	6	7
Модуль 1 – лекції						
Тема 1	5	2			1	2
Тема 2	5	2			1	2
Тема 3	5	2			1	2
Тема 4	5	2			1	2
Тема 5	5	2			1	2
Тема 6	6	2			1	3
Тема 7	6	2			1	3
Тема 8	6	2			1	3
Тема 9	7	2			2	3
Тема 10	5	2			1	2
Тема 11	5	2			1	2
Тема 12	5	2			1	2

Тема 13	5	2			1	2
Тема 14	5	2			1	2
Тема 15	6	2			1	3
Тема 16	6	2			1	3
Тема 17	6	2			1	3
Тема 18	7	2			2	3
Разом за модулем 1	100	36			20	44

5. Самостійна робота

Назва теми	Кількість годин	
	ср	пір
Тема 1. Одноелектронне наближення та зонна теорія кристалів.	2	1
Тема 2. Електричні і магнітні властивості з точки зору зонної теорії. Використання трансляційної симетрії для отримання точного одноелектронного спектру поверхні графіта.	2	1
Тема 3. Багатоелектронні моделі в фізичній хімії твердого тіла. Проблема електронної кореляції.	2	1
Тема 4. Гамільтоніани Гейзенберга та Хабарда. Решіткова модель Кондо та металоорганічні ферімагнетики	2	1
Тема 5. Теорія збурень виродженого рівня. Ефективні низькоенергетичні спінові гамільтоніани у методі валентних зв'язків	2	1
Тема 6. Відображення Йордана-Вігнера. Гамільтоніан Хабарда з нескінченним відштовхуванням. Теорема Нагаокі	3	1
Тема 7. Застосування методів групи перенормировки для опису електронної будови наноструктурних матеріалів	3	1
Тема 8. Квантові фазові переходи в наноструктурованих матеріалах.	3	1
Тема 9. Теоретичні методи моделювання температурних і польових залежностей теплоємності та намагніченості наноструктурних матеріалів. Ефект Шоттки. Перехід Пайерлса. Метод трансфер-матриці для класичних і квантових систем.	3	2
Тема 10. Хімія та поверхня.	2	1
Тема 11. Експериментальні методи хімії поверхні очами хіміка-теоретика.	2	1
Тема 12. Теоретичні підходи в хімії поверхні.	2	1
Тема 13. Взаємодії з поверхнею та на поверхні.	2	1
Тема 14. Поверхнева дифузія.	2	1
Тема 15. Реакції на поверхні.	3	1
Тема 16. Метод Монте-Карло.	3	1
Тема 17. Наноструктуровані поверхні.	3	1
Тема 18. Геометрико-ймовірнісні моделі.	3	2

7. Методи навчання

Лекції, самостійна робота.

8. Методи контролю

Письмовий залік.

9. Розподіл балів, які отримують студенти

Поточне тестування та самостійна робота	Підсумковий семестровий контроль (залік)	Сума
Модуль 1	50	50
Теми 1-9		
Теми 10-18		

Шкала оцінювання

Сума балів за всі види навчальної діяльності протягом семестру	Оцінка ECTS	Оцінка за національною шкалою
90 – 100	A	відмінно
80-89	B	добре
70-79	C	
60-69	D	задовільно
50-59	E	
1-49	FX	незадовільно

Критерії оцінювання.

Знання студентів оцінюється за наступними критеріями:

– «А» – залікова робота свідчить про те, що студент міцно засвоїв теоретичний матеріал, всебічно орієнтується в усіх основних темах курсу: відповідь побудовано логічно; дано переконливі відповіді на запитання, які потребують висловити своє ставлення до тієї чи іншої проблеми;

– «В» – залікова робота свідчить про те, що студент добре засвоїв теоретичний матеріал та орієнтується в усіх основних темах курсу: відповідь побудовано логічно; дано відповіді на запитання, які потребують висловити своє ставлення до тієї чи іншої проблеми, при цьому можуть бути похибки у логіці викладу;

– «С» – залікова робота свідчить про те, що студент засвоїв теоретичний матеріал та орієнтується в усіх основних темах курсу: відповідь побудовано логічно; дано відповіді на запитання, які потребують висловити своє ставлення до тієї чи іншої проблеми, при цьому були похибки стосовно матеріалу предмету;

– «D» – залікова робота свідчить про те, що студент засвоїв базові основи хімії поверхні і твердого тіла, але орієнтується не в усіх основних темах курсу: робота побудована не досить логічно; не дано відповіді на запитання, які потребують висловити своє ставлення до тієї чи іншої проблеми;

– «Е» – залікова робота свідчить про мінімальне розуміння основ хімії поверхні і твердого тіла та не досить впевнену орієнтацію в усіх основних темах курсу: робота побудована з великою кількістю похибок; не дано відповіді на запитання, які потребують висловити своє ставлення до тієї чи іншої проблеми;

Відповідність діючій державній системі: **А**– “відмінно”, **В, С** – “добре”, **Д, Е** – “задовільно”.

10. Методичне забезпечення

1. Робоча програма навчальної дисципліни.
2. Навчальні посібники, монографії, наукові статті.
3. Мультимедійні матеріали.

11. Рекомендована література

1. Иванов В.В. Слета Л.А. Квантовая химия. – Харьков Фолио, 2007.– 443 с.
2. Маттис Д. Теория магнетизма. – М.: Мир, 1965. – 407 с.
3. Черановский В.О., Иванова Е.Ф. Лекции по теме "Строение вещества" для студентов 3 курса химического факультета. (.PDF-file 564kB)
4. Дьячков П.Н. Углеродные нанотрубки: строение, свойства, применения. – М.: издательство БИНОМ/Лаборатория знаний, 2006. – 290 с.
5. Черановский В.О. Эффективные спиновые гамильтонианы в теории низкоразмерных магнетиков. Вісник ХНУ. – 2004, №626. Хімія. Вип.11(34). С.367-382.
6. Gross A. Theoretical Surface Science; Microscopic Perspective. Springer, Berlin, 2002.
7. Desjonqueres M. C., D. Spanjaard D. Concepts in Surface Physics. Springer, Berlin, 2000.
8. Davison S. G., Steslicka M. Basic Theory of Surface States. Oxford University Press, USA, 1996.
9. Masel R. Principles of Adsorption and Reaction on Solid Surfaces. Wiley, New York, 1996.
10. Хофман Р. Строение твердых тел и поверхностей. М.: Мир, 1990.
11. Моррисон С. Химическая физика поверхности твердого тела. М.: Мир, 1980.
12. Зенгуил Э. Физика поверхности. М.: Мир. 1990.
13. Бехштедт Ф., Эндерлайн Р. Поверхности и границы раздела полупроводников. М.: Мир. 1990.
14. Вудраф Д., Делчар Т. Современные методы исследования поверхности. М.: Мир. 1989.
15. Адамсон А. Физическая химия поверхностей. М.: Мир. 1979
16. Radeke M. R., Carter E.A. Ab initio dynamics of surface chemistry // Annu. Rev. Phys. Chem. – 1997. – V. 48. – P. 243–70.
17. BonnM., Kleyn A.W., Kroes G. J. Real time chemical dynamics at surfaces // Surf. Sci. – 2001. – V. 500. – P. 475-499.
18. Rosei F., Rosei R. Atomic description of elementary surface processes: diffusion and dynamics // Surf. Sci. – 2001. – V. 500. – P. 395-413.
19. Жидомиров Г.М., Михайкин И.Д. Кластерное приближение в квантово-химических исследованиях адсорбции и поверхностных структур // Итоги науки и техники. Строение и химическая связь. 1984. Т. 9. 163 с.
20. Impact of Surface Science on Catalysis. Gates B. C., Knoezinger H. (eds.). Academic Press, 2001.