

Табела 5.2. Спецификација предмета

Студијски програм: Мастер академске студије Физичка хемија			
Назив предмета: Теоријски аспекти науке о површинама			
Наставници: Пашти Игор, Доброта Ана			
Статус предмета: Изборни			
Број ЕСПБ: 7			
Услов: Нема			
Циљ предмета			
Циљ предмета је да студенти стекну потребна знања за теоријску анализу процеса на површинама под разлитим условима.			
Исход предмета			
Студенти добијају нова теоријска знања и практичне вештине, као и укључење у научно-истраживачки рад у области испитивања процеса на површинама и њихове примене у решавању проблема у различитим областима савремене науке о материјалима. По завршетку курса студенти су способни за теоријску анализу структуре и електронских својстава површина метала, јонских и угљеничних материјала, као и једноставнијих процеса на овим површинама.			
Садржај предмета			
<i>Теоријска настава</i>			
Основни појмови науке о површинама. Структура површина. Термодинамика површина. Хемијска веза на површинама. Хамилтонијан. Теоријске методе засноване на електронској структури и израчунавање укупне енергије система (Харти-Фокова теорија, Теорија Функционала Густине, псеудопотенцијал). Електронска структура површина (металне површине, површине полупроводника, површине јонских једињења). Адсорпција на површина (концепт реактивности, атомска адсорпција, молекулска адсорпција, реакције на површинама). Адсорпција на ниско-индексним површинама. Експерименталне методе за испитивање површина и веза са теоријом. Динамика на површина и моделирање кинетике процеса на површинама. 2D материјали.			
<i>Практична настава</i>			
Постављење модела површина. Основе рада у програмском пакету Quantum ESPRESSO. Основе рада у пакетима XCrysDen и VESTA. Моделирање процеса релаксације и реконструкције површина платине. Моделирање реконструкције површине Si(001); димер реконструкција. Површине јонских једињења: MgO(001) и MgO(111), моделирање поларних површина. Рачунање густине стања. Атомска адсорпција на прелазним металима. Молекулска адсорпција на прелазним металима и оксидима. DFT и DFT+U. Површинска дифузија. Дисоцијација воде на површини TiO ₂ . Реактивност графена и угљеничних материјала.			
Литература			
1. Gabor A. Somorjai, Yimin Li, Introduction to Surface Chemistry and Catalysis, 2nd Edition Wiley, ISBN: 978-0-470-50823-7			
2. Axel Groß, Theoretical Surface Science - A Microscopic Perspective, Springer, ISBN 978-3-540-68969-0			
Број часова активне наставе	Теоријска настава: 2		Практична настава: 4
Методе извођења наставе			
Предавања, презентације, теоријске вежбе, семинари, студијски истраживачки рад			
Оцена знања (максимални број поена 100)			
Предиспитне обавезе	поена	Завршни испит	поена
активност у току предавања	10	писмени испит	
практична настава	20	усмени испит	50
колоквијум-и			
семинар-и	20		