



## STUDIJŲ DALYKO (MODULIO) APRAŠAS

Dalyko (modulio) pavadinimas	Kodas
Paviršiaus ir nanodarinių fizika	621F30001

Dėstytojas (-ai)	Padalinys (-iai)
Koordinuojantis: Habil. Dr. Gediminas Niaura	Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas

Studijų pakopa	Dalyko (modulio) tipas
Antroji (magistrantūra)	Privalomasis

Igyvendinimo forma	Vykdyto laikotarpis	Vykdyto kalba (-os)
Auditorinė	Rudens semestras	Lietuvių / anglų

Reikalavimai studijuojančiajam	
Išankstiniai reikalavimai: Studentas turi būti išklausęs šiuos kursus: Bendroji fizika, Termodinamika	Gretutiniai reikalavimai (jei yra):

Dalyko (modulio) apimtis kreditais	Visas studento darbo krūvis	Kontaktinio darbo valandos	Savarankiško darbo valandos
5	140	48	92

Dalyko (modulio) tikslas: studijų programos ugdomos kompetencijos
Dalyko tikslas yra ugdyti studentų gebėjimą spręsti paviršiaus mokslo ir nanotechnologijos problemas molekuliniam lygmenyje

Dalyko (modulio) studijų siekiniai	Studijų metodai	Vertinimo metodai
Gebės atlikti paviršiaus ir nanodarinių tyrimus virpesinės spektroskopijos metodais	Laboratoriniai darbai, paskaitos, seminarai, referato rašymas	Laboratorinių darbų vertinimas, seminaro ir referato vertinimas
Gebės pasirinkti ir pritaikyti tinkamus paviršiaus tyrimo metodus	Laboratoriniai darbai, seminarai, paskaitos	Baigiamojo egzamino pažymys, seminaro vertinimas, laboratorinių darbų vertinimas
Gebės interpretuoti spektrinių tyrimų rezultatus, juos aprašyti ir kritiškai vertinti	Seminarai, referato rašymas, paskaitos, savarankiškas darbas	Seminaro ir referato įvertinimas, baigiamojo egzamino pažymys
Gebės suprasti ir analizuoti molekulinis procesus vykstančius paviršiuje ir nanodariniuose	Paskaitos, seminarai, laboratoriniai darbai, referato rašymas, savarankiškas darbas	Baigiamojo egzamino pažymys, Laboratorinių darbų vertinimas, seminaro ir referato vertinimas
Gebės dirbti tarpdisciplininėje fizikų, chemikų ir technologų komandoje ir panaudoti skirtingų mokslų žinias	Paskaitos, seminarai, savarankiškas darbas	Baigiamojo egzamino pažymys, seminaro ir referato vertinimas

Temos	Kontaktinio darbo valandos	Savarankiškų studijų laikas ir užduotys
-------	----------------------------	---

	Paskaitos	Konsultacijos	Seminarai	Pratybos	Laboratoriniai	Praktika	Visas kontaktinis	Savarankiškas darbas	Užduotys
1. <b>Paviršiaus termodinamika.</b> Paviršiaus įtempis ir paviršinė tampra. Paviršiaus įtempio anizotropijos ir netvarkos atsiradimo sąlygos. Nanostruktūrų susidarymas paviršiuje.	4						4	10	Mokslinės literatūros analizė
2. <b>Paviršiaus kristalinė struktūra ir tyrimo metodai.</b> Bravės gardelės, Millerio indeksai, Paviršiaus atomų koordinacinis skaičius. Paviršiaus centruotos kubinės gardelės metalų paviršiaus struktūra [(100), (110), (111)]. Paviršiaus tyrimo metodai. Reikalavimai paviršiaus tyrimo metodams. UPS, XPS, XRD, EELS, LEELS, AFM, STM metodai, jų privalumai ir trūkumai.	6		2				8	15	Mokslinės literatūros analizė, ruošimasis seminarui, užduočių analizė.
3. <b>Elektroninė paviršiaus struktūra.</b> Elektronų tankis paviršiuje. Lokalinio tankio aproksimacija. Želė modelis ir jo tobulinimas. Efektyvios aplinkos teorija. Nutrukę cheminiai ryšiai paviršiuje.	4		2				6	14	Mokslinės literatūros analizė, ruošimasis seminarui
4. <b>Plazmonika.</b> Metalų optinės savybės. Plazmonų rūšys. Plazmoninių nanostruktūrų sugertis. Paviršiaus sustiprinta Ramano spektroskopija (angl. SERS) ir paviršiaus sustiprinta infraraudonoji spektroskopija (angl. SEIRAS). Elektromagnetinis ir cheminis stiprinimo mechanizmai. Spektrų stiprinimo priklausomybė nuo atstumo. Atrankos taisyklės.	6		2	4			12	18	Mokslinės literatūros analizė, ruošimasis seminarui, ruošimasis laboratoriniams darbams
5. <b>Adsorbcija ir heterogeninė katalizė.</b> Molekulių adsorbcija, adsorbuotų sluoksnių termodinamika. Adsorbcijos izotermos. Fizikinė ir cheminė adsorbcija. Adsorbuotų molekulių virpesinė spektrometrija. Adsorbuotų molekulių vaizdinimas. Heterogeninė katalizė. Elektroninė katalizės teorija.	6						6	17	Mokslinės literatūros analizė
6. <b>Elektrocheminė fazių riba.</b> Dvigubo elektrinio sluoksnio modeliai. Specifinė anijonų adsorbcija, organinių katijonų koadsorbcija. Neutralių organinių molekulių adsorbcija. Elektrinio lauko įtaka adsorbatų struktūrai.	2		2				4	6	Mokslinės literatūros analizė, ruošimasis seminarui, ruošimasis laboratoriniams darbams
7. <b>Oro-vandens fazių riba.</b> Vandens molekulių struktūra fazių riboje. Suminio dažnio generacijos spektroskopijos pagrindai.	2						2	6	Mokslinės literatūros analizė
8. <b>Fizikiniai procesai nanodariniuose.</b> Fononų apribojimo efektas. Nanodarinių Ramano spektroskopija, defektingumo ir kristalitių dydžio įtaka Ramano spektrams. Anglies nanodariniai (grafenas, grafeno oksidas, anglies nanovamzdeliai) ir jų struktūros tyrimas rezonansinės Ramano spektroskopijos ir infraraudonosios spektroskopijos metodais.	2			4			6	6	Mokslinės literatūros analizė, ruošimasis laboratoriniams darbams
<b>Iš viso</b>	<b>32</b>		<b>8</b>	<b>8</b>			<b>48</b>	<b>92</b>	

Vertinimo strategija	Svoris proc.	Atsiskaitymo laikas	Vertinimo kriterijai
Baigiamasis egzaminio pažymys	60	Sesijos metu	Atsakymai į 3 klausimus raštu. Vertinamas paviršiaus reiškinių supratimas molekuliniam lygmenyje, gebėjimas pritaikyti teorines žinias analizuojant konkrečius paviršiaus reiškinius, paviršiaus tyrimo metodų privalumų ir trūkumų supratimas.
Seminaro ir referato pažymys	20	Semestro metu	Pranešimo pasirinkta tema lygis ir mokslinio straipsnio formos referato (10-15 psl.) lygis, vertinamas analizuojamos temos kritiškumo lygis, temos pristatymo aiškumas ir suprantamumas.
Laboratorinių darbų pažymys	20	Semestro metu	Laboratorinių darbų atlikimo lygis, išvados, darbų gynimas, atsakymai į laboratorinių darbų klausimus.

Autorius	Leidimo metai	Pavadinimas	Periodinio leidinio Nr. ar leidinio tomas	Leidimo vieta ir leidykla ar internetinė nuoroda
<b>Privaloma literatūra</b>				
1) A. Zangwill	1988	Physics at Surfaces		Cambridge University Press, Cambridge, 448 p.
2) P. Hofmann	2013	Surface Physics. An Introduction		P. Hofmann, 293 p.
3) E.L. Wolf	2004	Nanophysics and Nanotechnology. An Introduction to Modern Concepts in Nanoscience		Wiley-VCH, Weinheim, 277 p.
4) F. Bechstedt	2003	Principles of Surface Physics (Advanced Texts in Physics)		Springer, Heidelberg, 342 p.
5) G.S. Somorjai	2010	Introduction to Surface Chemistry and Catalysis		John Wiley & Sons, New Jersey, 763 p.
<b>Papildoma literatūra</b>				
1) E.C. Le Ru and P.G. Etchegoin	2009	Principles of Surface-enhanced Raman Spectroscopy and Related Plasmonic Effects		Elsevier, Amsterdam, 663 p.
2) M.W. Urban	1993	Vibrational Spectroscopy of Molecules and Macromolecules on Surfaces		Wiley, New York, 384 p.
3) S. Srinivasan	2006	Fuel Cells. From Fundamentals to Applications		Springer, New York, 691 p.
4) D.M. Kolb	2002	An Atomistic View of Electrochemistry	Surface Science, Vol. 500, pp. 722-740.	Elsevier
5) S. Nihonyanagi, J.A. Mondal, S. Yamaguchi, T. Tahara	2013	Structure and dynamics of interfacial water studied by heterodyne-detected vibrational sum-frequency generation	Annual Reviews Physical Chemistry, Vol. 64, pp. 579-603.	Annual Reviews
6) S.K. Gupta, P.K. Jha	2009	Modified phonon confinement model for size dependent Raman shift and linewidth of silicon nanocrystals	Solid State Communications, Vol. 149, pp.1989-1992.	Elsevier



### COURSE UNIT (MODULE) DESCRIPTION

Course unit (module) title	Code
Physics of surface and nanocompounds	621F30001

Lecturer(s)	Department(s) where the course unit (module) is delivered
Coordinator: Habil dr. Gediminas Niaura	Vilnius university, Department of Physics

Study cycle	Type of the course unit (module)
Second (Master study)	Mandatory

Mode of delivery	Period when the course unit (module) is delivered	Language(s) of instruction
Auditorium	Autumn	Lithuanian/English

Requirements for students	
<b>Prerequisites: The students should know the courses of General physics and Thermodynamics</b>	<b>Additional requirements (if any):</b>

Course (module) volume in credits	Total student's workload	Contact hours	Self-study hours
5	140	48	92

Purpose of the course unit (module): programme competences to be developed		
The purpose of the course unit is to educate specialists able to solve surface science and nanotechnology problems at the molecular level		
Learning outcomes of the course unit (module)	Teaching and learning methods	Assessment methods
Ability to perform analysis of surfaces and nanocompounds by using vibrational spectroscopy methods	Laboratory works, lectures, seminars, and writing the paper	Assessment of laboratory works, seminar and paper
Ability to select appropriate surface analysis technique	Laboratory works, seminars, lectures	Examination evaluation, assessment of seminar and laboratory works
Ability to read results of spectral analysis, ability to describe them and critically evaluate	Seminars, writing a paper, self-study work	Assessment of seminar and paper and examination evaluation
Ability to understand and analyse the molecular processes at surfaces and nanocompounds	Lectures, seminars, laboratory works, writing a paper, and self-study work	Examination evaluation, assessment of laboratory works, seminar, and paper

Ability to work in interdisciplinary team of physicists, chemists, and technologists and ability to utilize knowledge from different science fields	Lectures, seminars, self-study work	Examination evaluation, assessment of seminar and paper
---	-------------------------------------	---

Content: breakdown of the topics	Contact hours						Self-study work: time and assignments		
	Lectures	Tutorials	Seminars	Exercises	Laboratory work	Internship/work	Contact hours	Self-study hours	Assignments
1. <b>Surface thermodynamics.</b> Surface tension and surface stress. Surface tension anisotropy appearance conditions. Formation of nanostructures at surface.	4						4	10	Analysis of scientific literature.
2. <b>Crystal structure of surfaces and analysis methods.</b> Bravais lattices, Miller indices, coordination number of surface atoms. Face centered cubic metal lattices [(100), (110), and (111)]. Methods for surface analysis. Requirements for surface analysis methods. Advantages and limitations of UPS, XPS, XRD, EELS, LEELS, AFM, and STM methods.	6		2				8	15	Analysis of scientific literature, preparations for seminar, and analysis of tasks.
3. <b>Surface electronic structure.</b> Density of electrons at surface. Local density approximation. The jellium model and its development. The effective medium theory. Broken chemical bonds at surfaces.	4		2				6	14	Analysis of scientific literature, and preparations for seminar.
4. <b>Plasmonics.</b> Optical properties of metals. Types of plasmons. Absorption by plasmonic nanostructures. Surface enhanced Raman spectroscopy (SERS) and surface enhanced infrared spectroscopy (SEIRS). Electromagnetic and chemical enhancement mechanisms. Distance dependence of Raman scattering enhancement factor. Surface selection rules.	6		2		4		12	18	Analysis of scientific literature, preparations for seminar and laboratory works.
5. <b>Adsorption and heterogeneous catalysis.</b> Adsorption of molecules, thermodynamics of adsorption layers. Adsorption isotherms. Physical and chemical adsorption. Vibrational spectroscopy of adsorbed molecules. Mapping of adsorbed molecules. Catalysis of chemical reactions at surfaces. Electronic theory of catalysis.	6						6	17	Analysis of scientific literature
6. <b>Electrochemical interface.</b> Double electric layer models. Specific adsorption of anions, coadsorption of organic cations. Adsorption of neutral organic molecules. Effect of interfacial electric field on the structure of adsorbates.	2		2				4	6	Analysis of scientific literature, preparation for seminar and laboratory works.

7. <b>Air-water interface.</b> Structure of water molecules at interface. Fundamentals of sum frequency generation spectroscopy (SFG).	2					2	6	Analysis of scientific literature.
8. <b>Physical processes at nanocompounds.</b> Phonon confinement effect. Raman spectroscopy characterization of nanocompounds, effect of defectiveness and dimensions of crystallites. Carbon nanocompounds (graphene, graphene oxide, and carbon nanotubes), characterization by resonance Raman spectroscopy and infrared spectroscopy.	2			4		6	6	Analysis of scientific literature, preparation for laboratory works.
<b>Total</b>	<b>32</b>		<b>8</b>		<b>8</b>	<b>48</b>	<b>92</b>	

Assessment strategy	Weight, %	Deadline	Assessment criteria
Examination evaluation	60	Session date	Answers to 3 questions (written-oral discussion). Assessment criteria: understanding of surface processes at molecular level, ability to apply theoretical knowledge for analysis of specific surface science problems, and understanding the advantages and limitations of main surface analysis methods.
Evaluation of seminar and written paper	20	During the semester	The scientific level, the clearness, and comprehensibility of the seminar presentation and written paper (10-15 pages).
Evaluation of laboratory work	20	During the semester	The level of laboratory work performance, how conclusions supported by the data presented, and answers to the laboratory work questions.

Author	Year of publication	Title	Issue of a periodical or volume of a publication	Publishing place and house or web link
<b>Compulsory reading</b>				
1) A. Zangwill	1988	Physics at Surfaces		Cambridge University Press, Cambridge, 448 p.
2) P. Hofmann	2013	Surface Physics. An Introduction		P. Hofmann, 293 p.
3) E.L. Wolf	2004	Nanophysics and Nanotechnology. An Introduction to Modern Concepts in Nanoscience		Wiley-VCH, Weinheim, 277 p.
4) F. Bechstedt	2003	Principles of Surface Physics (Advanced Texts in Physics)		Springer, Heidelberg, 342 p.
5) G.S. Somorjai	2010	Introduction to Surface Chemistry and Catalysis		John Wiley & Sons, New Jersey, 763 p.
<b>Optional reading</b>				
1) E.C. Le Ru and P.G. Etchegoin	2009	Principles of Surface-enhanced Raman Spectroscopy and Related Plasmonic Effects		Elsevier, Amsterdam, 663 p.
2) M.W. Urban	1993	Vibrational Spectroscopy of Molecules and Macromolecules on Surfaces		Wiley, New York, 384 p.
3) S. Srinivasan	2006	Fuel Cells. From Fundamentals to Applications		Springer, New York, 691 p.

4) D.M. Kolb	2002	An Atomistic View of Electrochemistry	Surface Science, Vol. 500, pp. 722-740.	Elsevier
5) S. Nihonyanagi, J.A. Mondal, S. Yamaguchi, T. Tahara	2013	Structure and dynamics of interfacial water studied by heterogyne-detected vibrational sum-frequency generation	Annual Reviews Physical Chemistry, Vol. 64, pp. 579-603.	Annual Reviews
6) S.K. Gupta, P.K. Jha	2009	Modified phonon confinement model for size dependent Raman shift and linewidth of silicon nanocrystals	Solid State Communications, Vol. 149, pp.1989-1992.	Elsevier