

**Федеральное государственное автономное образовательное
учреждение высшего образования
«Московский физико-технический институт
(национальный исследовательский университет)»**

УТВЕРЖДЕНО

**Директор физтех-школы
электроники, фотоники и
молекулярной физики**

В.В. Иванов

	Рабочая программа дисциплины (модуля)
по дисциплине:	Методы молекулярного моделирования в электрохимии
по направлению:	Прикладные математика и физика
профиль подготовки:	Физика перспективных технологий: альтернативная энергетика, научное программирование и функциональные материалы Физтех-школа Электроники, Фотоники и Молекулярной Физики кафедра физики высокотемпературных процессов
курс:	4
квалификация:	бакалавр

Семестр, формы промежуточной аттестации: 8 (весенний) - Экзамен

Аудиторных часов: 30 всего, в том числе:

лекции: 15 час.

семинары: 15 час.

лабораторные занятия: 0 час.

Самостоятельная работа: 30 час.

Подготовка к экзамену: 30 час.

Всего часов: 90, всего зач. ед.: 2

Программу составил: С.А. Кисленко, канд. физ.-мат. наук

Программа обсуждена на заседании кафедры физики высокотемпературных процессов 27.05.2021

Аннотация

Курс «Методы молекулярного моделирования в электрохимии» предназначен для изучения основных явлений и процессов в электролитах и на границе фаз электрод/электролит, принципов работы электрохимических источников тока, методов и подходом атомистического моделирования электрохимических систем

Задачи курса:

- Введение основных понятий, явлений и процессов, изучаемых в электрохимии.
- Ознакомление с физическими принципами преобразования энергии в химических источниках тока и существующими ограничениями.
- Изучение теоретических подходов исследования электрохимических систем в рамках различных методов атомистического моделирования.
- формирование у студентов способности использовать полученные знания для моделирования новых функциональных материалов для электрохимических приложений.

По результатам освоения курса студент должен:

знать:

- Основные процессы, протекающие на границе фаз электрод/электролит;
- Теорию двойного слоя Гуи-Чапмена и Штерна;
- Теорию электронного переноса Маркуса;
- Методы расчета свободной энергии ионных/молекулярных компонент в растворе и на границе фаз.
- Метод Норскова для расчета профиля свободной энергии многостадийных электрохимических реакций;
- Физические основы преобразования химической энергии в электрическую в различных химических источниках тока.

уметь:

- Применять различные методы моделирования для анализа термодинамики и кинетики электронного переноса, интеркаляции, многостадийных электрохимических реакций на поверхности катализаторов.

владеть:

- навыками работы с литературой по электрохимии и атомистическому моделированию;
- навыками самостоятельной работы на суперкомпьютерах;
- навыками выбора методов молекулярного моделирования электрохимических систем;
- практикой исследования и решения теоретических и прикладных задач.

Основное содержание курса изложено в следующих разделах:

- 1 Электролиты. Сольватация. Соотношение Борна для свободной энергии сольватации. Методы расчета свободной энергии сольватации в рамках атомистического моделирования. Влияние сольватации на диффузию ионов по результатам молекулярного моделирования.
- 2 Межфазная граница электрод/электролит. Двойной слой в разбавленных электролитах. Модель Гельмгольца, Гуи-Чапмена, Штерна. Структура двойного слоя в концентрированных электролитах и ионных жидкостях: результаты молекулярно-динамического моделирования.
- 3 Суперконденсаторы. Влияние пористости на удельные характеристики суперконденсаторов: результаты моделирования и эксперимента. Квантовая емкость на поверхности полупроводников и двумерных материалов. Расчет квантовой емкости на основе данных DFT моделирования.
- 4 Гетерогенный перенос электрона. Адиабатический и неадиабатический перенос. Теория Маркуса. Энергия реорганизации растворителя. Формализм Геришера. Метод расчета профиля свободной энергии внешнесферного электронного переноса в рамках МД моделирования.

- 5 Методы расчета свободной энергии компонент электролита на границе фаз электрод/электролит. Влияние электронных свойств поверхности на кинетику неадиабатического электронного переноса.
- 6 Интеркаляция. Принцип работы металл-ионных аккумуляторов. Фазовые переходы при интеркаляции; связь с разрядными характеристиками. Метод расчета напряжения холостого хода металл-ионных аккумуляторов с помощью метода теории функционала плотности. Примеры.
- 7 Водородный топливный элемент. Механизмы реакции восстановления кислорода и окисления водорода. Электрокатализ.
- 8 Метод Норскова для расчета профиля свободной энергии многостадийных электрокаталитических реакций. Примеры расчетов; механизмы электрокаталитического действия. Ограничения метода Норскова.
- 9 Перспективные химические источники тока. Литий-серные аккумуляторы, литий-воздушные аккумуляторы, пост-литиевые аккумуляторы.

1. Цели и задачи

Цель дисциплины

Изучение основных явлений и процессов в электролитах и на границе фаз электрод/электролит, принципов работы электрохимических источников тока, методов и подходов атомистического моделирования электрохимических систем.

Задачи дисциплины

- Введение основных понятий, явлений и процессов, изучаемых в электрохимии.
- Ознакомление с физическими принципами преобразования энергии в химических источниках тока и существующими ограничениями.
- Изучение теоретических подходов исследования электрохимических систем в рамках различных методов атомистического моделирования.
- Формирование у студентов способности использовать полученные знания для моделирования новых функциональных материалов для электрохимических приложений.

2. Перечень формируемых компетенций

Освоение дисциплины направлено на формирование следующих компетенций:

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
УК-1 Способен осуществлять поиск, критический анализ и синтез информации, применять системный подход для решения поставленных задач	УК-1.1 Анализирует задачу, выделяя этапы ее решения, действия по решению задачи
	УК-1.4 Грамотно, логично, аргументированно формирует собственные суждения и оценки
	УК-1.2 Находит, критически анализирует и выбирает информацию, необходимую для решения поставленной задачи
ПК-1 Способен планировать и проводить научные эксперименты (в избранной предметной области) и (или) теоретические (аналитические и имитационные) исследования	ПК-1.1 Владеет фундаментальными понятиями, законами и теориями современной физики

3. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю)

В результате освоения дисциплины обучающиеся должны знать:

- Основные процессы, протекающие на границе фаз электрод/электролит.
- Теорию двойного слоя Гуи-Чапмена и Штерна.
- Теорию электронного переноса Маркуса.
- Методы расчета свободной энергии ионных/молекулярных компонент в растворе и на границе фаз.
- Метод Норскова для расчета профиля свободной энергии многостадийных электрохимических реакций.
- Физические основы преобразования химической энергии в электрическую в различных химических источниках тока.

уметь:

- Применять различные методы моделирования для анализа термодинамики и кинетики электронного переноса, интеркаляции, многостадийных электрохимических реакций на поверхности катализаторов.

владеть:

- навыками работы с литературой по электрохимии и атомистическому моделированию;
- навыками самостоятельной работы на суперкомпьютерах;
- навыками выбора методов молекулярного моделирования электрохимических систем;
- практикой исследования и решения теоретических и прикладных задач.

4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий

4.1. Разделы дисциплины (модуля) и трудоемкости по видам учебных занятий

№	Тема (раздел) дисциплины	Трудоемкость по видам учебных занятий, включая самостоятельную работу, час.			
		Лекции	Семинары	Лаборат. работы	Самост. работа
1	Электролиты	2	2		
2	Межфазная граница углерод-электролит	2	2		2
3	Гетерогенный перенос электрона	2	2		6
4	Интеркаляция	2	2		6
5	Водородный топливный элемент	2	2		6
6	Метод Норскова	3	3		4
7	Перспективные химические источники тока	2	2		6
Итого часов		15	15		30
Подготовка к экзамену		30 час.			
Общая трудоёмкость		90 час., 2 зач.ед.			

4.2. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам)

Семестр: 8 (Весенний)

1. Электролиты

Взаимодействие между ионами и растворителем, сольватация. Соотношение Борна для свободной энергии сольватации. Методы расчета свободной энергии сольватации в рамках атомистического моделирования. Влияние сольватации на диффузию ионов по результатам молекулярного моделирования.

2. Межфазная граница углерод-электролит

Межфазная граница электрод/электролит на поверхности идеально поляризуемого электрода. Двойной слой в разбавленных электролитах. Модель Гельмгольца, Гуи-Чапмена, Штерна. Структура двойного слоя в концентрированных электролитах и ионных жидкостях: результаты молекулярно-динамического моделирования. Электрохимические суперконденсаторы. Влияние пористости на удельные характеристики суперконденсаторов: результаты моделирования и эксперимента. Квантовая емкость на поверхности полупроводников и двумерных материалов. Расчет квантовой емкости на основе данных DFT моделирования.

3. Гетерогенный перенос электрона

Гетерогенный перенос электрона. Адиабатический и неадиабатический перенос. Теория Маркуса. Понятие энергии реорганизации растворителя. Формализм Геришера. Метод расчета профиля свободной энергии реакции внешнесферного электронного переноса в рамках МД моделирования. Методы расчета свободной энергии компонент электролита на границе фаз электрод/электролит (метод зонтичной выборки, метод термодинамического интегрирования). Влияние электронных свойств поверхности на кинетику неадиабатического электронного переноса.

4. Интеркаляция

Принцип работы металл-ионных аккумуляторов. Фазовые переходы при интеркаляции; связь с разрядными характеристиками. Метод расчета напряжения холостого хода металл-ионных аккумуляторов с помощью теории функционала плотности; примеры.

5. Водородный топливный элемент

Водородный топливный элемент. Электрокатализ. Механизмы реакции восстановления кислорода и окисления водорода. Метод Норскова для расчета профиля свободной энергии многостадийных электрокаталитических реакций. Примеры расчетов. Механизмы электрокаталитического действия. Ограничения метода Норскова.

6. Метод Норскова

Метод Норскова для расчета профиля свободной энергии многостадийных электрокаталитических реакций. Примеры расчетов; механизмы электрокаталитического действия. Ограничения метода Норскова.

7. Перспективные химические источники тока

Перспективные химические источники тока. Литий-серные аккумуляторы, литий-воздушные аккумуляторы, пост-литиевые аккумуляторы.

5. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)

учебная аудитория, оснащенная компьютером и мультимедийным оборудованием (проектор, звуковая система).

6. Перечень рекомендуемой литературы

Основная литература

1. Феттер К. Электрохимическая кинетика. – Издательство «ХИМИЯ». Москва. 1967.
2. Догондзе Р.Р., Кузнецов А.М. Кинетика и катализ. Том 5. Кинетика гетерогенных химических реакций в растворах. ВИНТИ. 1978.

Дополнительная литература

1. Memming R. Semiconductor electrochemistry. Wiley-VCH Verlag GmbH. 2001.
2. Schmickler W. Interfacial electrochemistry. Oxford University Press. 1996.
3. Frenkel D., Berend S. Understanding molecular simulation. Academic press. 2002.

7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)

Не используются

8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень необходимого программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)

не предусмотрены.

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

Студент, изучающий дисциплину, должен с одной стороны, овладеть общим понятийным аппаратом, а с другой стороны, должен научиться применять теоретические знания на практике. В результате изучения дисциплины студент должен знать основные определения и понятия, уметь применять полученные знания для решения различных задач.

Успешное освоение курса требует:

- посещения всех занятий, предусмотренных учебным планом по дисциплине;
- ведения конспекта занятий;
- напряжённой самостоятельной работы студента.

Самостоятельная работа включает в себя:

- чтение рекомендованной литературы;
- проработку учебного материала, подготовку ответов на вопросы, предназначенных для самостоятельного изучения;
- решение задач, предлагаемых студентам на занятиях;
- подготовку к выполнению заданий текущей и промежуточной аттестации.

Показателем владения материалом служит умение без конспекта отвечать на вопросы по темам дисциплины.

Важно добиться понимания изучаемого материала, а не механического его запоминания. При затруднении изучения отдельных тем, вопросов, следует обращаться за консультациями к преподавателю.

Возможен промежуточный контроль знаний студентов в виде решения задач в соответствии с тематикой занятий.

ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ПО ДИСЦИПЛИНЕ (МОДУЛЮ)

по направлению:	Прикладные математика и физика
профиль подготовки:	Физика перспективных технологий: альтернативная энергетика, научное программирование и функциональные материалы Физтех-школа Электроники, Фотоники и Молекулярной Физики кафедра физики высокотемпературных процессов
курс:	<u>4</u>
квалификация:	бакалавр
Семестр, формы промежуточной аттестации: 8 (весенний) - Экзамен	
Разработчик:	С.А. Кисленко, канд. физ.-мат. наук

1. Компетенции, формируемые в процессе изучения дисциплины

Код и наименование компетенции	Индикаторы достижения компетенции
УК-1 Способен осуществлять поиск, критический анализ и синтез информации, применять системный подход для решения поставленных задач	УК-1.1 Анализирует задачу, выделяя этапы ее решения, действия по решению задачи
	УК-1.4 Грамотно, логично, аргументированно формирует собственные суждения и оценки
	УК-1.2 Находит, критически анализирует и выбирает информацию, необходимую для решения поставленной задачи
ПК-1 Способен планировать и проводить научные эксперименты (в избранной предметной области) и (или) теоретические (аналитические и имитационные) исследования	ПК-1.1 Владеет фундаментальными понятиями, законами и теориями современной физики

2. Показатели оценивания компетенций

В результате изучения дисциплины «Методы молекулярного моделирования в электрохимии» обучающийся должен:

знать:

- Основные процессы, протекающие на границе фаз электрод/электролит.
- Теорию двойного слоя Гуи-Чапмена и Штерна.
- Теорию электронного переноса Маркуса.
- Методы расчета свободной энергии ионных/молекулярных компонент в растворе и на границе фаз.
- Метод Норскова для расчета профиля свободной энергии многостадийных электрохимических реакций.
- Физические основы преобразования химической энергии в электрическую в различных химических источниках тока.

уметь:

- Применять различные методы моделирования для анализа термодинамики и кинетики электронного переноса, интеркаляции, многостадийных электрохимических реакций на поверхности катализаторов.

владеть:

- навыками работы с литературой по электрохимии и атомистическому моделированию;
- навыками самостоятельной работы на суперкомпьютерах;
- навыками выбора методов молекулярного моделирования электрохимических систем;
- практикой исследования и решения теоретических и прикладных задач.

3. Перечень типовых (примерных) вопросов, заданий, тем для подготовки к текущему контролю

С целью контроля освоения обучающимися учебного материала проводится устный опрос в начале занятия по теме прошлой лекции или в конце занятия по пройденной теме.

4. Перечень типовых (примерных) вопросов и тем для проведения промежуточной аттестации обучающихся

Вопросы к экзамену:

1. Взаимодействие между ионами и растворителем, сольватация. Соотношение Борна для свободной энергии сольватации.
2. Методы расчета свободной энергии сольватации в рамках атомистического моделирования.
3. Двойной слой в разбавленных электролитах. Модель Гельмгольца, Гуи-Чапмена, Штерна.
4. Структура двойного слоя в концентрированных электролитах и ионных жидкостях.

5. Принцип работы электрохимического суперконденсатора. Влияние пористости на удельные характеристики суперконденсаторов.
6. Понятие квантовой емкости. Взаимосвязи с плотностью электронных состояний.
7. Гетерогенный перенос электрона. Адиабатический и неадиабатический перенос. Теория Маркуса. Понятие энергии реорганизации растворителя. Формализм Геришера.
8. Метод расчета профиля свободной энергии реакции внешнесферного электронного переноса в рамках МД моделирования. Методы расчета свободной энергии компонент электролита на границе фаз электрод/электролит (метод зонтичной выборки, метод термодинамического интегрирования).
9. Явление интеркаляции. Принцип работы металл-ионных аккумуляторов. Фазовые переходы при интеркаляции; связь с разрядными характеристиками.
10. Метод расчета напряжения холостого хода металл-ионных аккумуляторов с помощью теории функционала плотности.
11. Водородный топливный элемент. Механизмы реакции восстановления кислорода и окисления водорода.
12. Явление электрокатализа. Метод Норскова для расчета профиля свободной энергии многостадийных электрокаталитических реакций. Ограничения метода.

Примеры экзаменационных билетов:

Пример 1:

1. Метод расчета напряжения холостого хода металл-ионных аккумуляторов с помощью теории функционала плотности.
2. Водородный топливный элемент. Механизмы реакции восстановления кислорода и окисления водорода.

Пример 2:

1. Структура двойного слоя в концентрированных электролитах и ионных жидкостях.
2. Принцип работы электрохимического суперконденсатора. Влияние пористости на удельные характеристики суперконденсаторов.

Критерии оценивания

Оценка отлично 10 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины, проявляющему интерес к данной предметной области, продемонстрировавшему умение уверенно и творчески применять их на практике при решении конкретных задач, свободное и правильное обоснование принятых решений.

Оценка отлично 9 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины и умение уверенно применять их на практике при решении конкретных задач, свободное и правильное обоснование принятых решений.

Оценка отлично 8 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины и умение уверенно применять их на практике при решении конкретных задач, правильное обоснование принятых решений, с некоторыми недочетами.

Оценка хорошо 7 баллов - выставляется студенту, если он твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но недостаточно грамотно обосновывает полученные результаты.

Оценка хорошо 6 баллов - выставляется студенту, если он твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но допускает в ответе или в решении задач некоторые неточности.

Оценка хорошо 5 баллов - выставляется студенту, если он в основном знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но допускает в ответе или в решении задач достаточно большое количество неточностей.

Оценка удовлетворительно 4 балла - выставляется студенту, показавшему фрагментарный, разрозненный характер знаний, недостаточно правильные формулировки базовых понятий, нарушения логической последовательности в изложении программного материала, но при этом он освоил основные разделы учебной программы, необходимые для дальнейшего обучения, и может применять полученные знания по образцу в стандартной ситуации.

Оценка удовлетворительно 3 балла - выставляется студенту, показавшему фрагментарный, разрозненный характер знаний, допускающему ошибки в формулировках базовых понятий, нарушения логической последовательности в изложении программного материала, слабо владеет основными разделами учебной программы, необходимыми для дальнейшего обучения и с трудом применяет полученные знания даже в стандартной ситуации.

Оценка неудовлетворительно 2 балла - выставляется студенту, который не знает большей части основного содержания учебной программы дисциплины, допускает грубые ошибки в формулировках основных принципов и не умеет использовать полученные знания при решении типовых задач.

Оценка неудовлетворительно 1 балл - выставляется студенту, который не знает основного содержания учебной программы дисциплины, допускает грубейшие ошибки в формулировках базовых понятий дисциплины и вообще не имеет навыков решения типовых практических задач.

5. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности

Прием экзамена проводится по билетам. В каждом билете представлено два теоретических вопроса и одна задача. При проведении устного экзамена обучающемуся предоставляется 40 минут на подготовку. Опрос обучающегося не должен превышать одного астрономического часа.