

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина»

Институт естественных наук и математики



УТВЕРЖДАЮ
Проректор по науке
А.В. Германенко
20__ г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
ХИМИЯ ТВЕРДОГО ТЕЛА

Перечень сведений о рабочей программе дисциплины	Учетные данные
Программа аспирантуры Химия твердого тела	Код ПА 1.4.15.
Группа специальностей Химические науки	Код 1.4.
Федеральные государственные требования (ФГТ)	Приказ Министерства науки и высшего образования Российской Федерации от 20 октября 2021 г. № 951
Самостоятельно утвержденные требования (СУТ)	Приказ «О введении в действие «Требований к разработке и реализации программ подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре УрФУ» №315/03 от 31.03.2022

Екатеринбург
2022 г.

Рабочая программа дисциплины составлена авторами:

№ п/п	ФИО	Ученая степень, ученое звание	Должность	Структурное подразделение
1	Буянова Елена Станиславовна	К.х.н., доцент	доцент	Кафедра аналитической химии и химии окружающей среды Института естественных наук и математики
2	Черепанов Владимир Александрович	Д.х.н., профессор	Зав. каф.	Кафедра физической и неорганической химии Института естественных наук и математики
3	Зуев Андрей Юрьевич	Д.х.н., профессор	профессор	Кафедра физической и неорганической химии Института естественных наук и математики
4	Анимица Ирина Евгеньевна	Д.х.н., доцент	профессор	Кафедра физической и неорганической химии Института естественных наук и математики

Рекомендовано учебно-методическим советом института естественных наук и математики

Председатель учебно-методического совета ИЕНиМ
Протокол № 5 от 17.05.2022 г.


Е.С. Буянова

Согласовано:

Начальник ОПНПК


Е.А. Бутрина

1. ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА ДИСЦИПЛИНЫ ХИМИЯ ТВЕРДОГО ТЕЛА

1.1. Аннотация содержания дисциплины

Специальная дисциплина «Химия твердого тела» способствует освоению основных профессиональных компетенций и их компонентов и направлена на углубленное изучение базовых разделов химии твердого тела: основ кристаллического и электронного строения твердых веществ, их реакционной способности, методов синтеза и исследования.

1.2. Язык реализации дисциплины - русский

1.3. Планируемые результаты обучения по дисциплине

Дисциплина «Химия твердого тела» относится к базовой части программы аспирантуры, направлена на подготовку к сдаче кандидатского минимума.

В результате освоения дисциплины аспирант должен:

Знать:

- особенности кристаллического состояния вещества;
- основы электронного строения твердых веществ
- принципы получения материалов с заданным набором функциональных характеристик;
- взаимосвязь кристаллической и дефектной структуры твердых тел;
- термодинамические аспекты твердого состояния вещества
- особенности методов синтеза твердых веществ;
- основные электрохимические методы исследования функциональных свойств твердофазных неорганических материалов

Уметь:

- давать рекомендации на основании проведенных исследований;
- разработать оптимальную схему получения кристаллических материалов или тонких пленок с учетом требуемых функциональных характеристик, структурных и термодинамических особенностей материала;
- выбирать и анализировать научную литературу для избранного направления исследований, формулировать задачи работы на основе анализа литературы;
- выбрать или самостоятельно составить методику исследования нового материала;
- использовать специализированное программное обеспечение и современные информационные технологии;
- систематизировать полученные теоретические и опытные данные, обобщать полученные знания и представлять полученные результаты в форме научных публикаций;

Владеть (демонстрировать навыки и опыт деятельности):

- системой фундаментальных химических понятий;
- термодинамическим подходом к описанию и исследованию твердого состояния вещества,
- методологией исследования структурных и термодинамических особенностей материала;
- навыками моделирования основных процессов исследования;
- навыками работы с научной литературой и базами данных с целью определения направления исследования и решения специализированных задач;
- навыками научной коммуникации;
- навыками выбора методов исследования, в том числе исследования электротранспортных свойств веществ в кристаллическом состоянии;
- принципами организации эксперимента по получению и изучению функциональных свойств простых и сложных оксидов;

1.4.Объем дисциплины

№ п/п	Виды учебной работы	Объем дисциплины		Распределение объема дисциплины по семестрам (час.)
		Всего часов	В т.ч. контактная работа (час.)*	6
1.	Аудиторные занятия	4	4	4
2.	Лекции	4	4	4
3.	Практические занятия	0	0	0
4.	Самостоятельная работа аспирантов, включая все виды текущей аттестации	104	1	104
5.	Промежуточная аттестация	Экзамен	1	Экзамен, 18
6.	Общий объем по учебному плану, час.	108	5	108
7.	Общий объем по учебному плану, з.е.	3		3

2. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Код раздела, темы	Раздел, тема дисциплины*	Содержание
1	Введение. <i>Лекции 1 час;</i> <i>самостоятельная работа аспиранта, 1 час.</i>	Специфика химии твердого состояния как раздела химической науки. Общие отличия строения и свойств твердых веществ от газов и жидкостей. Классификация твердых веществ. Кристаллические твердые тела. Монокристаллическое, поликристаллическое и нанокристаллическое состояния твердых веществ. Однофазные и гетерофазные кристаллические тела.
2	Строение твердых веществ. <i>Лекции 1 час;</i> <i>самостоятельная работа аспиранта, 18 часов.</i>	Тема 1. Строение кристаллических твердых веществ. Понятие о симметрии кристаллической решетки. Кристаллографические пространственные группы симметрии. Категории симметрии. Сингонии. Выбор и типы элементарных ячеек. Молекулярные кристаллы. Кристаллы с ионными и ковалентными решетками. Правила Полинга. Размеры атомов или ионов. Координационные числа. Тема 2. Способы организации структур. Структуры с гексагональной и кубической плотнейшей упаковкой. Тетрагональная упаковка. Дефекты упаковок, политипизм. Полиэдрическое описание кристаллических структур. Изоморфизм. Тема 3. Твердые растворы замещения, внедрения и вычитания. Изовалентное и гетеровалентное замещение. Нестехиометричные соединения. Тема 4. Типы химической связи в твердом теле. Ван-дер-ваальсово взаимодействие в молекулярных кристаллах, клатраты. Ионная модель строения кристаллов, константа Моделунга, энергия ионной

		<p>решетки. Цикл Борна—Габера и термодимические расчеты.</p> <p>Тема 5. Основы теорий кристаллического поля и поля лигандов применительно к твердым телам. Влияние d-электронов. Энергия стабилизации кристаллическим полем и катионное распределение. Эффект Яна—Теллера. Сравнение тетраэдрического и октаэдрического окружений. Эффект неподеленных электронных пар. Зонная структура кристаллов. Образование зон в результате перекрывания орбиталей. Уровень Ферми. Химический потенциал. Общие представления о методах расчета зонной структуры кристаллов. Границы применимости зонной модели</p>
3	<p>Реальная структура кристаллов. <i>Лекции 1 час; самостоятельная работа аспиранта, 24 часа.</i></p>	<p>Тема 1. Совершенные и несовершенные кристаллы. Типы дефектов. Электронные дефекты. Собственные точечные дефекты. Термодинамические причины образования точечных дефектов. Дефектообразование и нестехиометрия кристаллов. Квазихимическая модель описания равновесия точечных дефектов. Взаимодействие точечных дефектов.</p> <p>Тема 2. Твердые тела со структурной разупорядоченностью. Протяженные дефекты. Поверхность как дефект строения твердого тела. Поверхностная энергия кристалла. Роль поверхности в химических реакциях твердых тел.</p> <p>Тема 3. Подвижность точечных дефектов. Диффузия и самодиффузия в твердых телах. Основные механизмы самодиффузии. Коэффициент диффузии, энергия активации диффузии. Диффузия, обусловленная градиентом концентраций, законы Фика. Диффузия точечных дефектов в электрическом поле. Уравнение Нернста—Эйнштейна. Методы исследования диффузии. Основное уравнение переноса. Ионная и электронная проводимость в твёрдых телах. Зависимость от температуры и парциального давления летучего компонента. Подвижность, числа переноса. Температурная зависимость ионной проводимости. Собственная и примесная проводимость. Суперионные проводники (твердые электролиты). Твердые тела со структурной разупорядоченностью.</p> <p>Тема 4. Измерение проводимости на постоянном и переменном токе с привлечением импедансметрии в зависимости от температуры, активностей кислорода и паров воды в газовой фазе. Определение чисел переноса носителей методом ЭДС (кислородный или пароводяной гальванический элементы). Определение чисел переноса по методу Тубандта. Кислородопроницаемость в оксидных материалах со смешанной электронно-ионной проводимостью. Измерение коэффициентов термо-ЭДС как функции температуры и давления кислорода.</p> <p>Тема 5. Протяженные дефекты. Структуры</p>

		кристаллографического сдвига. Дефекты упаковки. Границы блоков и антифазные домены (границы). Гетерогенные включения. Нейтральные и заряженные протяженные дефекты. Дислокации в кристаллах, основные виды. Причины возникновения дислокаций.
4	Фазовые переходы в твердых веществах. <i>Лекции 1 час; самостоятельная работа аспиранта, 1 час.</i>	Термодинамическая классификация фазовых переходов. Стабильные и метастабильные фазы. Представление фазовых переходов на диаграммах состояния. Структурные изменения при фазовых переходах. Изменения структуры с ростом температуры и давления.
5	Химические реакции твердых веществ. Методы получения твердых веществ. <i>Самостоятельная работа аспиранта, 22 часа.</i>	<p>Тема 1. Общие закономерности скорости гетерогенных химических процессов с участием твердых тел. Элементарные кинетические стадии процессов. Роль массопереноса. Процессы, лимитируемые диффузионными и кинетическими стадиями. Роль зародышеобразования в процессах, сопровождающихся образованием твердых продуктов. Основные факторы, влияющие на реакционную способность твердых тел. Роль примесей и дефектов. Химические реакции на поверхности. Методы управления развитием процессов с участием твердых тел. Нетермические способы повышения реакционной способности твердых тел: фотохимические, радиационно-химические, механические и др.</p> <p>Тема 2. Твердофазный синтез. Термодинамические основы синтеза твердых веществ. Р-Т-х фазовые диаграммы двухкомпонентных систем как геометрическое представление термодинамических данных. Правило фаз Гиббса. Работа с проекциями и сечениями Р-Т-х диаграмм. Основные типы конденсированных фазовых диаграмм двухкомпонентных систем: с простой эвтектикой, с образованием конгруэнтно и инконгруэнтно плавящихся промежуточных соединений, с расслаиванием в жидкой фазе, с неограниченными и ограниченными твердыми растворами, с полиморфизмом компонентов и соединений. Конденсированные диаграммы трехкомпонентных систем. Фазовые равновесия в субсолидусной области. Использование фазовых диаграмм для выбора условий синтеза.</p> <p>Тема 3. Синтез путем твердофазных реакций. Основные термодинамические и кинетические закономерности. Экспериментальное осуществление, роль температуры. Методы интенсификации твердофазных процессов: диспергирование исходных веществ, методы химической гомогенизации. Совместное соосаждение компонентов из растворов. Криохимический синтез и распылительная сушка. Кристаллизация из гелей. Золь-гель-процесс. Механохимическое стимулирование твердофазных процессов. Основные закономерности и возможности механохимических процессов.</p>

		Саморазвивающийся высокотемпературный синтез. Твердофазный синтез при высоких давлениях.
6	Твердофазные материалы. <i>Самостоятельная работа аспиранта, 20 часов.</i>	Тема 1. Классификация твердофазных материалов по функциональным свойствам. Ионная проводимость и твердые электролиты. Тема 2. Магнитные материалы. Тема 3. Оптические материалы. Люминесцентные материалы и люминофоры. Тема 4. Сверхпроводящие материалы. Области и перспективы применения.

3. ОРГАНИЗАЦИЯ ПРАКТИЧЕСКИХ ЗАНЯТИЙ, САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

3.1. Практические занятия

не предусмотрено

3.2. Примерная тематика самостоятельной работы

3.2.1. Примерный перечень тем рефератов (эссе, творческих работ)

не предусмотрено

3.2.2. Примерная тематика *индивидуальных* или групповых проектов

не предусмотрено

4. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ТЕКУЩЕЙ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

4.1. КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ КОНТРОЛЬНО-ОЦЕНОЧНЫХ МЕРОПРИЯТИЙ ТЕКУЩЕЙ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

Применяются утвержденные на кафедре критерии оценивания достижений аспирантов по каждому контрольно-оценочному мероприятию. Система критериев оценивания опирается на три уровня освоения компонентов компетенций: пороговый, повышенный, высокий.

Компоненты компетенций	Признаки уровня освоения компонентов компетенций		
	пороговый	повышенный	высокий
Знания	Аспирант демонстрирует знание-знакомство, знание-копию: узнает объекты, явления и понятия, находит в них различия, проявляет знание источников получения информации, может осуществлять самостоятельно репродуктивные действия над знаниями путем	Аспирант демонстрирует аналитические знания: уверенно воспроизводит и понимает полученные знания, относит их к той или иной классификационной группе, самостоятельно систематизирует их, устанавливает взаимосвязи между	Аспирант может самостоятельно извлекать новые знания из окружающего мира, творчески их использовать для принятия решений в новых и нестандартных ситуациях.

	самостоятельного воспроизведения и применения информации.	ними, продуктивно применяет в знакомых ситуациях.	
Умения	Аспирант умеет корректно выполнять предписанные действия по инструкции, алгоритму в известной ситуации, самостоятельно выполняет действия по решению типовых задач, требующих выбора из числа известных методов, в предсказуемо изменяющейся ситуации	Аспирант умеет самостоятельно выполнять действия (приемы, операции) по решению нестандартных задач, требующих выбора на основе комбинации известных методов, в непредсказуемо изменяющейся ситуации	Аспирант умеет самостоятельно выполнять действия, связанные с решением исследовательских задач, демонстрирует творческое использование умений (технологий)
Личностные качества	Аспирант имеет низкую мотивацию учебной деятельности, проявляет безразличное, безответственное отношение к учебе, порученному делу	Аспирант имеет выраженную мотивацию учебной деятельности, демонстрирует позитивное отношение к обучению и будущей трудовой деятельности, проявляет активность.	Аспирант имеет развитую мотивацию учебной и трудовой деятельности, проявляет настойчивость и увлеченность, трудолюбие, самостоятельность, творческий подход.

4.2. ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ТЕКУЩЕЙ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

[Выбрать из списка, либо дополнить наименования оценочных средств]

4.2.1. Перечень примерных вопросов для зачета

не предусмотрено

4.2.2. Перечень примерных вопросов для экзамена

1. Классификация твердофазных материалов – по составу, структуре, функциональным свойствам.
2. Строение кристаллических твердых веществ. Способы организации структур.
3. Типы химической связи в твердом теле. Термохимические расчеты.
4. Термодинамическая классификация фазовых переходов. Стабильные и метастабильные фазы.
5. Дефекты в кристаллах: классификация, типы, примеры.
6. Квазихимическая модель описания равновесия точечных дефектов. Взаимодействие точечных дефектов. Построение диаграмм Броуэра.
7. Диффузия и самодиффузия в твердых телах. Уравнение Нернста—Эйнштейна. Методы исследования диффузии.
8. Экспериментальные методы определения природы и направления массопереноса в твердом теле (электрохимический метод, моделирование взаимодействия на плоской поверхности, метод радиоактивных индикаторов).
9. Ионная проводимость твердых веществ и материалов.
10. Протяженные дефекты. Дислокации в кристаллах, основные виды. Причины возникновения дислокаций.
11. Основные факторы, влияющие на реакционную способность твердых тел. Роль примесей и

дефектов.

12. Общие закономерности скорости гетерогенных химических процессов с участием твердых тел. Элементарные кинетические стадии процессов.
13. Методы управления развитием процессов с участием твердых тел.
14. Ионная проводимость и твердые электролиты. Суперионные проводники.
15. Магнитные материалы. Функциональные параметры. Материалы с эффектом гигантского (ГМС) и колоссального (КМС) магнитного сопротивления.
16. Оптические материалы. Люминесцентные материалы и люминофоры.
17. Сверхпроводящие материалы. Области и перспективы применения.
18. Тугоплавкие материалы. Композиционные материалы, их классификация и методология создания.

5. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

5.1.Рекомендуемая литература

5.1.1. Основная литература

1. Иванов-Шиц, А. К., Мурин, И. В.; Ионика твердого тела : В 2 т. Т. 1. ; Издательство Санкт-Петербургского университета, Санкт-Петербург; 2000 (3 экз.)
2. Иванов-Шиц, А. К., Мурин, И. В.; Ионика твердого тела : в 2 т. Т. 2. ; Издательство Санкт-Петербургского университета, Санкт-Петербург; 2010 (5 экз.)
3. Чеботин, В. Н.; Электрохимия твердых электролитов; Химия, Москва; 1978 (5 экз.)
4. Коровин, Н. В.; Топливные элементы и электрохимические энергоустановки; Издательство МЭИ, Москва; 2005 (9 экз.)
5. Кнотько, А. В.; Химия твердого тела : учеб. пособие для вузов.; Academia, Москва; 2006 (12 экз.)
6. Чеботин, В. Н., Козлова, В. И., Михайлов, А. Я.; Физическая химия твердого тела; Химия, Москва; 1982 (23 экз.)
7. Уваров, Н. Ф.; Химия твердого тела : учебное пособие.; Новосибирский государственный технический университет, Новосибирск; 2019;
<https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=575292> (Электронное издание)

5.1.2. Дополнительная литература

1. Кофстад, П., Каширенинов, О. Е., Семенов, Н. Н.; Отклонение от стехиометрии, диффузия и электропроводность в простых окислах металлов; Мир, Москва; 1975 (4 экз.)
2. Жуковский, В. М., Конев, В. Н.; Введение в химию твердого тела : учеб. пособие.; Изд-во Урал. гос. ун-та, Свердловск; 1978 (40 экз.)
3. Петров, А. Н.; Твердые материалы. Химия дефектов. Структура и свойства твердых тел : [учеб. пособие для вузов].; Изд-во Урал. ун-та, Екатеринбург; 2008 (98 экз.)
4. Вест, А., Антони Р., Кауль, А. Р., Куценок, И. Б., Третьяков, Ю. Д.; Химия твердого тела Ч. 1 : теория и приложения.; Мир, Москва; 1988 (7 экз.)
5. Вест, А., Антони Р., Кауль, А. Р., Куценок, И. Б., Третьяков, Ю. Д.; Химия твердого тела Ч. 2 : теория и приложения.; Мир, Москва; 1988 (5 экз.)

5.2. Методические разработки

1. Зуев, А.Ю. Учебно-методический комплекс дисциплины "Дефекты и свойства перспективных оксидных материалов" [Электронный ресурс] / Урал. гос. ун-т Екатеринбург: 2008. URL: <http://elar.urfu.ru/handle/10995/1543>
2. А.Н. Петров. Учебно-методический комплекс дисциплины "Твердые материалы. Химия

дефектов, структура, свойства" [Электронный ресурс] / Урал. гос. ун-т, Екатеринбург: 2007.
URL: <http://elar.urfu.ru/handle/10995/1314>

5.3. Программное обеспечение

1. Microsoft office (Word, Excel, Power point);
2. Adobe Reader X
3. ChemOffice 2010
4. Isis Draw (Version 2.5)
5. Mercury (Version 2.4.5)
6. AutoDock (Version 1.5)
7. MestReNova (Version 6.0.2)
8. Open Babel (Version 2.3.1)
9. Avogadro (Version 1.0.3)
10. RasMol (Version 2.7.5.2)
11. Jmol (Version 12.0.45)

5.4. Базы данных, информационно-справочные и поисковые системы

1. ScienceDirect: <http://www.sciencedirect.com>;
2. Web of Science: <http://apps.webofknowledge.com>;
3. Scopus: <http://www.scopus.com>;
4. Reaxys: <http://reaxys.com>;
5. SciFinder <https://scifinder.cas.org>
6. Espacenet <https://ru.espacenet.com>
7. РИНЦ <https://www.elibrary.ru>
8. Поисковая система EBSCO Discovery Service <http://lib.urfu.ru/course/view.php?id=141>;
9. Федеральный институт промышленной собственности <http://www1.fips.ru>;

5.5. Электронные образовательные ресурсы

1. Зональная научная библиотека <http://lib.urfu.ru>;
2. Каталоги библиотеки <http://lib.urfu.ru/course/view.php?id=76>;
3. Электронный каталог <http://opac.urfu.ru>;
4. Электронно-библиотечные системы <http://lib.urfu.ru/mod/resource/view.php?id=2330>;
5. Электронные ресурсы свободного доступа <http://lib.urfu.ru/course/view.php?id=75>;
6. Электронные ресурсы по подписке <http://lib.urfu.ru/mod/data/view.php?id=1379>.

6. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Сведения об оснащённости дисциплины специализированным и лабораторным оборудованием

Уральский федеральный университет имеет специальные помещения для проведения занятий лекционного типа, занятий семинарского типа, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации, а также помещения для самостоятельной работы и помещения для хранения и профилактического обслуживания оборудования. Специальные помещения укомплектованы специализированной мебелью и техническими средствами обучения, служащими для представления информации большой аудитории.

Уральский федеральный университет имеет материально-техническое обеспечение, необходимое для реализации программы аспирантуры, обеспечения дисциплин (модулей), научно-исследовательской работы и практик, в соответствии с требованиями к материально-техническому и учебно-методическому обеспечению направленности программы.