

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина»

УТВЕРЖДАЮ
Директор по образовательной
деятельности

_____ С.Т. Князев
«__» _____

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА МОДУЛЯ

Код модуля	Модуль
1143566	Дефектная структура и свойства функциональных материалов

Екатеринбург

Перечень сведений о рабочей программе модуля	Учетные данные
Образовательная программа 1. Химия	Код ОП 1. 04.04.01/33.02
Направление подготовки 1. Химия	Код направления и уровня подготовки 1. 04.04.01

Программа модуля составлена авторами:

№ п/п	Фамилия Имя Отчество	Ученая степень, ученое звание	Должность	Подразделение
1	Зуев Андрей Юрьевич	доктор химических наук, профессор	Профессор	физической и неорганической химии

Согласовано:

Управление образовательных программ

Е.С. Комарова

1. ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА МОДУЛЯ Дефектная структура и свойства функциональных материалов

1.1. Аннотация содержания модуля

Задачей модуля и одноименной дисциплины является приобретение студентами углубленных знаний по физической химии твердых тел. Изучение модуля способствует пониманию закономерностей, присущих реальному строению кристаллических веществ с учетом разупорядочения структуры; позволяет применять современные методы исследования и моделирования для установления дефектной структуры твердых тел

1.2. Структура и объем модуля

Таблица 1

№ п/п	Перечень дисциплин модуля в последовательности их освоения	Объем дисциплин модуля и всего модуля в зачетных единицах
1	Дефектная структура и свойства функциональных материалов	6
ИТОГО по модулю:		6

1.3. Последовательность освоения модуля в образовательной программе

Пререквизиты модуля	1. Современная рентгенография и нейтронография
Постреквизиты и кореквизиты модуля	1. Функциональные неорганические материалы

1.4. Распределение компетенций по дисциплинам модуля, планируемые результаты обучения (индикаторы) по модулю

Таблица 2

Перечень дисциплин модуля	Код и наименование компетенции	Планируемые результаты обучения (индикаторы)
1	2	3
Дефектная структура и свойства функциональных материалов	ОПК-2 - Способен выполнять исследования при решении фундаментальных и прикладных задач, планировать и осуществлять сложные	З-1 - Демонстрировать понимание принципов, особенностей и задач проведения фундаментальных и прикладных исследований, планирования модельных или реальных экспериментов

	<p>реальные или модельные эксперименты</p>	<p>У-1 - Соотнести цель и задачи исследования с набором методов исследования, выбирать необходимое сочетание цели и средств при планировании исследований</p> <p>П-1 - Иметь опыт проведения фундаментальных и прикладных исследований, модельных или реальных экспериментов с использованием современной методологии, методов, оборудования и техники</p> <p>Д-1 - Демонстрировать аналитические умения и креативное мышление</p> <p>Д-2 - Проявлять ответственность и настойчивость в достижении цели</p>
	<p>ОПК-3 - Способен анализировать, интерпретировать и обобщать результаты исследований в профессиональной области</p>	<p>З-1 - Демонстрировать понимание принципов и методов анализа и обобщения результатов теоретических и экспериментальных исследований, применяемых в профессиональной области</p> <p>У-1 - Анализировать результаты наблюдений и экспериментов, корректно интерпретировать их для формулирования заключений и выводов</p> <p>П-1 - Формулировать обоснованные заключения и выводы по результатам анализа научной литературы, собственных экспериментальных данных и расчетно-теоретических работ</p> <p>Д-1 - Демонстрировать умения анализировать и обобщать информацию, делать логические умозаключения</p>
	<p>ПК-1 - Способен планировать работу и выбирать адекватные методы решения научно-исследовательских задач в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках</p>	<p>З-1 - Сформулировать теоретические принципы и описать техническое исполнение методов решения научно-исследовательских задач в выбранной области профессиональной деятельности</p> <p>З-2 - Демонстрировать понимание принципов планирования научно-исследовательской работы</p> <p>У-1 - Выбирать экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи, исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов</p>

		<p>У-2 - Составлять общий план научно-исследовательской работы и детальные планы ее отдельных стадий</p> <p>П-1 - Иметь опыт выбора методов решения поставленных задач и прогнозирования результатов исследования, исходя из наличия материальных и временных ресурсов</p> <p>П-2 - Иметь опыт планирования НИР в целом и отдельных стадий НИР</p>
	<p>ПК-2 - Способен проводить патентно-информационные исследования в выбранной области химии и/или смежных наук</p>	<p>З-1 - Представлять возможности существующих поисковых систем и электронных библиотек, используемые для поиска химической, в том числе патентной информации</p> <p>У-1 - Анализировать и обобщать результаты информационного/патентного поиска по тематике проекта в выбранной области химии и/или смежных наук</p> <p>П-1 - Иметь опыт работы с поисковыми системами, электронными библиотеками, базами данных по химии и смежным областям</p>
	<p>ПК-3 - Способен на основе критического анализа результатов НИР и НИОКР оценивать перспективы их практического применения и продолжения работ в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках</p>	<p>З-1 - Представлять актуальные направления теоретических и экспериментальных исследований и областей практического применения результатов в выбранной области химии или смежных науках</p> <p>З-2 - Демонстрировать понимание принципов анализа и систематизации результатов НИР и НИОКР</p> <p>У-1 - Определять возможные направления развития теоретических и экспериментальных работ и перспективы практического применения полученных результатов в своей профессиональной области</p> <p>У-2 - Систематизировать информацию, полученную в ходе НИР и НИОКР, анализировать ее и сопоставлять с литературными данными</p> <p>П-1 - Иметь опыт прогнозирования направления собственных исследований с</p>

		<p>учетом практического применения результатов</p> <p>П-2 - Иметь опыт анализа полученных экспериментальных и/или теоретических результатов собственного исследования в сравнении с литературными данными</p>
	<p>ПК-4 - Способен определять способы, методы и средства решения технологических задач в рамках прикладных НИР и НИОКР</p>	<p>З-1 - Сформулировать теоретические принципы и описать техническое исполнение методов исследования, необходимых для решения технологических задач</p> <p>З-2 - Демонстрировать понимание принципов организации и планирования материально-технического сопровождения НИР и НИОКР</p> <p>У-1 - Предлагать технические средства и методы испытаний (из набора имеющихся) для решения поставленных задач в рамках прикладных НИР и НИОКР</p> <p>У-2 - Планировать отдельные стадии и работу в целом, организовать материально-техническое сопровождение прикладных НИР и НИОКР</p> <p>П-1 - Иметь опыт выбора методов решения технологических задач в рамках прикладных НИР и НИОКР с учетом глобальных вызовов и неопределенностей</p> <p>П-2 - Иметь опыт планирования отдельных стадий НИР и НИОКР и работы в целом, материально-технического сопровождения прикладных НИР и НИОКР</p>
	<p>ПК-5 - Способен осуществлять документальное сопровождение прикладных НИР и НИОКР</p>	<p>З-1 - Привести примеры нормативных документов по системам стандартизации, разработки и производства химической продукции, проведения прикладных НИР и НИОКР</p> <p>У-1 - Готовить документацию по подготовке, проведению и результатам прикладных НИР и НИОКР, анализировать имеющиеся нормативные документы по системам стандартизации, разработки и производства химической продукции</p> <p>П-1 - Иметь навыки работы с нормативной документацией по разработке и</p>

		стандартизации химической продукции, проведению и результатам прикладных НИР и НИОКР
--	--	--

1.5. Форма обучения

Обучение по дисциплинам модуля может осуществляться в очной формах.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
Дефектная структура и свойства
функциональных материалов

Рабочая программа дисциплины составлена авторами:

№ п/п	Фамилия Имя Отчество	Ученая степень, ученое звание	Должность	Подразделение
1	Зуев Андрей Юрьевич	доктор химических наук, профессор	Профессор	Кафедра физической химии

Рекомендовано учебно-методическим советом института Естественных наук и математики

Протокол № 6 от 15.10.2021 г.

1. СОДЕРЖАНИЕ И ОСОБЕННОСТИ РЕАЛИЗАЦИИ ДИСЦИПЛИНЫ

Авторы:

- Зуев Андрей Юрьевич, Профессор, физической и неорганической химии

1.1. Технологии реализации, используемые при изучении дисциплины модуля

- Традиционная (репродуктивная) технология
- Разноуровневое (дифференцированное) обучение
 - Базовый уровень

**Базовый I уровень – сохраняет логику самой науки и позволяет получить упрощенное, но верное и полное представление о предмете дисциплины, требует знание системы понятий, умение решать проблемные ситуации. Освоение данного уровня результатов обучения должно обеспечить формирование запланированных компетенций и позволит обучающемуся на минимальном уровне самостоятельности и ответственности выполнять задания;*

Продвинутый II уровень – углубляет и обогащает базовый уровень как по содержанию, так и по глубине проработки материала дисциплины. Это происходит за счет включения дополнительной информации. Данный уровень требует умения решать проблемы в рамках курса и смежных курсов посредством самостоятельной постановки цели и выбора программы действий. Освоение данного уровня результатов обучения позволит обучающемуся повысить уровень самостоятельности и ответственности до творческого применения знаний и умений.

1.2. Содержание дисциплины

Таблица 1.1

Код раздела, темы	Раздел, тема дисциплины*	Содержание
1.	Введение	Кристаллические твердые простые и сложные оксиды являются незаменимыми материалами. В частности перовскитоподобные оксиды $ABO_{3\pm\delta}$, где $A=Ln$ и $B=3d$ -переходный металл являются основой для современных материалов, широко применяемых в современных системах преобразования энергии и получения, как высокочистых газов, так и их смесей в точном соотношении, катализаторов, датчиков и много другого. Высокая востребованность этих материалов объясняется уникальностью их свойств. Вообще свойства вещества определяются его составом и структурой. Твердое кристаллическое вещество всегда имеет реальную структуру, под которой понимают совокупность кристаллической и дефектной структуры. Поэтому свойства оксидных материалов напрямую определяются их дефектной структурой. Дефектная структура достаточно просто, но эффективно, может быть описана в рамках так называемого термодинамического подхода, который основывается на записи условий равновесия в гетерогенной системе. С математической точки зрения эти условия представляют собой сложные системы нелинейных уравнений, точное решение которых является невозможным без применения современных вычислительных систем. Применение же систем компьютерной математики позволяет провести компьютерное моделирование дефектной структуры оксидных

		материалов, так и рассчитать их важнейшие свойств на ее основе.
2.	Феноменология разупорядочения кристаллов	<p>Понятие дефекта кристаллической решетки. Дефекты точечные, линейные и протяженные. Типы точечных дефектов. Дефекты атомной подсистемы кристалла как его структурные элементы. Дефекты электронной подсистемы кристалла. Особенности описания электронных дефектов. Заряды атомных и электронных дефектов. Системы записи точечных дефектов. Дефекты стехиометрические и нестехиометрические.</p> <p>Феноменология равновесия дефектов в кристаллических оксидах. Равновесие реакций с участием дефектов. Анализ дефектной структуры перовскитоподобных оксидов $ABO_{3\pm\delta}$, где $A=Ln$ и $B=3d$-переходный металл. Упрощенный анализ во всей области кислородной нестехиометрии. Метод Броуэра. Диаграммы Броуэра. Анализ дефектной структуры ABO_3: точное решение для области доминирования металлических вакансий. Анализ дефектной структуры ABO_3: точное решение для области доминирования вакансий кислорода.</p> <p>Изотермический модельный анализ дефектной структуры $ABO_{3+\delta}$. Верификация моделей дефектной структуры $ABO_{3+\delta}$. Расчет изотермических диаграмм дефектов. Трехмерный модельный анализ дефектной структуры $ABO_{3+\delta}$. Верификация трехмерных моделей дефектной структуры $ABO_{3+\delta}$. Трехмерный модельный анализ дефектной структуры $ABO_{3-\delta}$ в области дефицита кислорода. Верификация трехмерных моделей дефектной структуры $ABO_{3-\delta}$. Расчет трехмерных диаграмм дефектов.</p>
3.	Взаимосвязь дефектной структуры со свойствами оксидных материалов	<p>Электропроводность оксидных материалов. Понятие о проводниках, полупроводниках и изоляторах. Электронные проводники. Ионные проводники. Твердые электролиты. Оксиды со смешанной проводимостью. Подвижность электронных и ионных дефектов. Зависимость подвижности от температуры. Квазисвободные и локализованные электронные дефекты. Различные механизмы проводимости. Туннельный механизм проводимости. Прыжковый механизм проводимости. Малые и большие поляроны. Методы определения механизма проводимости. Моделирование коэффициента термо-эдс перовскитоподобных оксидов. Верификация моделей коэффициента терм-эдс перовскитоподобных оксидов.</p> <p>Термическое расширение кристаллов. Коэффициент термического расширения (КТР). Объемный и линейный КТР. Изотропное и анизотропное расширение кристаллической решетки. Расширение кристаллов с дефектами. Химическое расширение оксидов, вызванное образованием кислородных вакансий. Возможные причины и механизмы химического расширения. Размерная модель химического расширения оксидных материалов с кубической структурой. Измерение химического расширения. Сравнение предсказанных и измеренных значений химического расширения оксидов со структурой перовскита.</p>

1.3. Направление, виды воспитательной деятельности и используемые технологии

Направления воспитательной деятельности сопрягаются со всеми результатами обучения компетенций по образовательной программе, их освоение обеспечивается содержанием всех дисциплин модулей.

1.4. Программа дисциплины реализуется на государственном языке Российской Федерации .

2. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Дефектная структура и свойства функциональных материалов

Электронные ресурсы (издания)

1. 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)

Печатные издания

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., Куценко, И. Б., Третьяков, Ю. Д.; Ч. 1 : теория и приложения.; Мир, Москва; 1988 (7 экз.)

5. Вест, А., Антони Р., Кауль, А. Р., Куценко, И. Б., Третьяков, Ю. Д.; Ч. 2 : теория и приложения.; Мир, Москва; 1988 (5 экз.)

Профессиональные базы данных, информационно-справочные системы

1. Зуев, Андрей Юрьевич. Учебно-методический комплекс дисциплины "Моделирование реальной структуры и свойств материалов в среде Maple" [Электронный ресурс] / А. Ю. Зуев ; Федер. агентство по образованию, Урал. гос. ун-т им. А. М. Горького, ИОНЦ "Нанотехнологии и перспективные материалы" [и др.]. — Электрон. дан. (2,51 Мб). — Екатеринбург : [б. и.], 2007. <http://elar.urfu.ru/handle/10995/1322>

2. American Chemical Society

3. eLibrary

4. ООО Научная электронная библиотека

5. Elsevier

6. ScienceDirect Freedom Collection

7. Scopus

8. SpringerLink

9. Springer Nature

10. Web of Science Core Collection

11. Web of Science

Материалы для лиц с ОВЗ

Весь контент ЭБС представлен в виде файлов специального формата для воспроизведения синтезатором речи, а также в тестовом виде, пригодном для прочтения с использованием экранной лупы и настройкой контрастности.

Базы данных, информационно-справочные и поисковые системы

3. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Дефектная структура и свойства функциональных материалов

Сведения об оснащённости дисциплины специализированным и лабораторным оборудованием и программным обеспечением

Таблица 3.1

№ п/п	Виды занятий	Оснащённость специальных помещений и помещений для самостоятельной работы	Перечень лицензионного программного обеспечения
1	Лекции	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная Подключение к сети Интернет	OriginPro Microsoft Windows 8.1 Pro 64-bit RUS OLP NL Acdmc Office 365 EDUA5 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES Maple 11
2	Практические занятия	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Доска аудиторная Персональные компьютеры по количеству обучающихся Подключение к сети Интернет	OriginPro Microsoft Windows 8.1 Pro 64-bit RUS OLP NL Acdmc Office 365 EDUA5 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES Maple 11
3	Консультации	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя	OriginPro Microsoft Windows 8.1 Pro 64-bit RUS OLP NL Acdmc

		Персональные компьютеры по количеству обучающихся Подключение к сети Интернет	Office 365 EDUA5 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES Maple 11
4	Текущий контроль и промежуточная аттестация	Мебель аудиторная с количеством рабочих мест в соответствии с количеством студентов Рабочее место преподавателя Персональные компьютеры по количеству обучающихся Подключение к сети Интернет	OriginPro Microsoft Windows 8.1 Pro 64-bit RUS OLP NL Acdmc Office 365 EDUA5 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES Maple 11
5	Самостоятельная работа студентов	Персональные компьютеры по количеству обучающихся Подключение к сети Интернет	OriginPro Microsoft Windows 8.1 Pro 64-bit RUS OLP NL Acdmc Office 365 EDUA5 ShrdSvr ALNG SubsVL MVL PerUsr B Faculty EES Maple 11