ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ
ИНСТИТУТ ХИМИИ ТВЕРДОГО ТЕЛА И МЕХАНОХИМИИ
СИБИРСКОГО ОТДЕЛЕНИЯ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК
(ИХТТМ СО РАН)

УТВЕРДЖАЮ
Директор ИХТТМ СО РАН
д.х.н. _____ А.П. Немудрый
«25» июня 2018 г.

Рабочая программа дисциплины

МЕХАНИЗМЫ ПРОСТЕЙШИХ ТВЕРДОФАЗНЫХ РЕАКЦИЙ

основной образовательной программы высшего образования –
программы подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре

Направление подготовки:
04.06.01 Химические науки

Направленность (профиль) подготовки:
«Химия твердого тела»

Присваиваемая квалификация:
Исследователь. Преподаватель-исследователь

Новосибирск 2018

Рабочая программа дисциплины «Механизмы простейших твердофазных реакций» составлена в соответствии с требованиями федерального государственного образовательного стандарта высшего образования (ФГОС ВО) по направлению подготовки 04.06.01 Химические науки (уровень подготовки кадров высшей квалификации).

ФГОС ВО введен в действие приказом Минобрнауки России от 30.07.2014 N 869.

Программа утверждена на заседании Ученого совета ИХТТМ СО РАН, протокол № 6 от 25 июня 2018 г.

Программу разработал:

доцент ИХТТМ СО РАН, д-р хим. наук, ст. науч. сотр. Сидельников А.А.

Ответственный за образовательную программу

д.х.н., профессор О.И. Ломовский

1. Цели и задачи дисциплины.

Целью освоения дисциплины является получение аспирантами фундаментальных знаний в области химии твердого тела, приобретение умения анализировать наблюдения и экспериментальные данные, которые связаны с превращениями твердых тел.

Задачи дисциплины:

- ознакомление аспирантов с основами химии твердого тела, с базовыми представлениями о механизмах простейших химических реакций в твердом теле;
- формирование у аспирантов представлений об элементарных стадиях и методах их математического описания, как составных частей механизма твердофазных реакций, строении и свойствах твердых тел, влиянии дефектов на протекание твердофазных реакций;
- ознакомление аспирантов с экспериментальными методами исследования механизма химических реакций в твердых телах.

Данный курс знакомит аспирантов с основами современных представлений о механизмах и описании кинетики простейших твердофазных реакций. Рассматриваются такие процессы как испарение, конденсация, сублимация, плавление, рост и растворение кристаллов, рекристаллизация, полиморфные превращения, реакции термического разложения и дегидратация кристаллогидратов. Особое внимание уделяется общности и различиям элементарных процессов, происходящих при протекании простейших твердофазных реакций.

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы.

Дисциплина «Механизмы простейших твердофазных реакций» относится к вариативной части Блока 1 основной образовательной программы аспирантуры по направлению подготовки 04.06.01 «Химические науки», реализуемой в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институте химии твердого тела и механохимии Сибирского отделения Российской академии наук (ИХТТМ СО РАН).

Дисциплина «Механизмы простейших твердофазных реакций» является составной частью модуля «Химия твердого тела», является дисциплиной по выбору для освоения в 1-й – 2-й годы обучения.

Дисциплина «Механизмы простейших твердофазных реакций» опирается на следующие дисциплины:

- Химия твердого тела;
- Кинетика гетерогенных реакций;
- Реакционная способность твердых тел;
- Физические методы исследования твердых тел;
- Дефекты в кристаллах.

Результаты освоения дисциплины «Механизмы простейших твердофазных реакций» используются в следующих разделах программы аспирантуры:

- Научно-производственная практика.
- Научные исследования.
- Государственная итоговая аттестация.

3. Планируемые результаты обучения по дисциплине «Механизмы простейших твердофазных реакций»:

Таблица 3.1

Код компе-тенции	Содержание компетенции	Планируемые результаты обучения по дисциплине
Универсальные компетенции		
УК-1	Способность к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях.	**Знать** основные теоретические работы и результаты экспериментальных исследований в области изучения механизма твердофазных реакций.
УК-3	Готовность участвовать в работе российских и международных исследовательских коллективов по решению научных и научно-образовательных задач.	**Уметь** представлять результаты исследований механизмов твердофазных реакций в виде докладов и научных статей.
УК-5	Способность планировать и решать задачи собственного профессионального и личностного развития.	**Уметь** выбирать необходимые методы исследования, модифицировать существующие и разрабатывать новые методы исходя из задач конкретного исследования по выбранной теме, связанной с изучением механизма твердофазных реакций.
Общепрофессиональные компетенции		
ОПК-1	Способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий.	**Знать** основные методы проведения физико-химических экспериментов, направленные на изучение механизма твердофазных реакций.
ОПК-2	Готовность организовать работу исследовательского коллектива в области химии и смежных наук.	**Уметь** формулировать и ставить задачи, возникающие в ходе научно-исследовательской деятельности по изучению механизма твердофазных реакций.
Профессиональные компетенции		
ПК-1	Владение методологией теоретических и экспериментальных исследований в области химии твердого тела, владение культурой научного исследования в области химии твердого тела, в том числе с использованием новейших информационно-коммуникационных технологий.	**Владеть** основами физико-химических методов изучения механизма твердофазных реакций.
ПК-3	Способность к самостоятельной (в том числе руководящей)	**Владеть** навыками современных методов исследования механизма твердофазных

	научно-исследовательской деятельности, требующей широкой фундаментальной подготовки в современных направлениях развития химии твердого тела, глубокой специализированной подготовки в выбранном направлении, владения навыками современных методов исследования.	реакций.
ПК-4	Владение фундаментальными знаниями в основных разделах химии твердого тела, включая проблемы строения и реакционной способности твердых веществ, методы синтеза различных классов твердофазных соединений, методы исследования свойств твердофазных веществ и материалов; владение техникой экспериментальных исследований; умение использовать информационно-поисковые системы в области химии твердого тела.	**Знать** базовые представления о механизмах простейших химических реакций в твердом теле; иметь представления об элементарных стадиях и методах их математического описания, как составных частях механизма твердофазных реакций, о влиянии дефектов на протекание твердофазных реакций. **Владеть** техникой экспериментальных исследований механизма химических реакций в твердых телах.
ПК-5	Наличие опыта профессионального участия в научных дискуссиях, умение представлять полученные в исследованиях результаты в виде докладов, отчетов и научных публикаций в рецензируемых российских и международных изданиях.	**Владеть** навыками грамотной интерпретации результатов изучения механизма твердофазных реакций.

4. Объем, структура и содержание дисциплины.

Объем дисциплины составляет 2 зачетные единицы, всего 72 академических часа, из которых 30 часов составляет контактная работа аспиранта с преподавателем (18 часов – лекции, 10 часов - групповые консультации, 2 часа - мероприятия промежуточной аттестации), 42 часа составляет самостоятельная работа аспиранта.

4.1. Объем и структура дисциплины:

Таблица 4.1

Показатель объема дисциплины и вид деятельности		Семестр
		2
	Объем дисциплины в зачетных единицах	2

	Объем дисциплины в часах	72
	Всего занятий в контактной форме, час	30
	Лекции, час.	18
	Практические занятия, час.	-
	Лабораторные занятия, час	-
	из них в активной и интерактивной форме, час.	-
	Аттестация, час	2
	Консультации, час.	10
	Самостоятельная работа, час.	42
	Вид аттестации	Зачет

4.2. Содержание дисциплины:

Таблица 4.2

Наименование разделов (тем) дисциплины	Количество часов				Контроль
	Лекции	**Сам. работа**	**Консульт.**	**Аттестацтя**	
Классическая теория зародышеобразования. Рост кристаллов. Модель Джексона. Плавление кристаллов. Растворение кристаллов. Рекристаллизация. Структура межфазных и большеугловых границ.	4	10	2		Опрос
Превращение кристалл I ↔ кристалл II. Диффузионные превращения. Распад твердых растворов. Бездиффузионные превращения. Кинетика полиморфных превращений.	4	10	2		Опрос
Концепция обратной связи между твердофазным превращением и релаксацией порождаемых им механических напряжений. Механизмы релаксации механических напряжений. Карта областей действия различных механизмов пластической деформации.	4	10	2		Опрос
Классические топохимические реакции. Термическое разложение. Дегидратация кристаллогидратов. Кинетика твердофазных реакций с положительной обратной связью между реакцией и разрушением.	6	12	2		Опрос
			2	**2**	**Зачет**
Итого	**18**	**42**	**10**	**2**	**72 часа**

Программа курса.

1. Переход отдельных молекул через межфазную границу: газ ↔ жидкость, кристалл; жидкость ↔ кристалл; кристалл I ↔ кристалл II. Испарение, сублимация, кристаллизация, полиморфные превращения. Общность процессов.
2. Классическая теория зародышеобразования. Образование капли из пересыщенного пара.

3. Зародышеобразование в растворах и расплавах. Рост кристаллов. Модель Джексона. Нормальный и послойный механизм роста кристаллов. Влияние примесей на рост кристаллов.
4. Плавление кристаллов. Растворение кристаллов. Влияние примесей на растворение.
5. Рекристаллизация. Структура межфазных и большеугловых границ. Миграция большеугловых границ зерен. Влияние примесей на скорость миграции. Теория примесного торможения.
6. Превращение кристалл I ↔ кристалл II. Диффузионные превращения. Распад твердых растворов. Бездиффузионные превращения: нормальный и мартенситный типы. Механизмы превращений: по-атомный и кооперативный. Зародышеобразование при полиморфных превращениях. Форма зародышей при по-атомном и кооперативном механизме превращения. Модель Коэна-Олсона мартенситного превращения. Смена кинетико-морфологического типа превращения от мартенситного к нормальному.
7. Конденсация «мягкой моды» как первопричина фазовых переходов второго рода.
8. Кинетика полиморфных превращений. Скорость движения большеугловой межфазной границы полиморфного превращения. Примесное торможение. Влияние механических напряжений на скорость движения межфазной границы.
9. Концепция обратной связи между твердофазным превращением и релаксацией порождаемых им механических напряжений. Релаксация механических напряжений как фактор, определяющий кинетику твердофазных превращений. Механизмы релаксации механических напряжений. Карта областей действия различных механизмов пластической деформации. Способы изменения механических свойств твердых тел. Примеры полиморфных превращений, в которых реализованы способы управления кинетикой и пространственным протеканием через изменение скорости релаксации механических напряжений.
10. Классические топохимические реакции. Термическое разложение. Дегидратация кристаллогидратов. Свойства твердого раствора, образующегося на начальных стадиях дегидратации. Кинетика твердофазных реакций с положительной обратной связью между реакцией и разрушением. Морфология твердого продукта. Возможности управления размером и формой частиц продукта образующихся при дегидратации.
11. Дислокационно-цепной механизм разложения перхлората аммония.

5. Самостоятельная работа обучающихся.

Темы для самостоятельного изучения	***Количество часов***	***Формы самостоятельной работы***	***Методическое обеспечение***	***Формы отчетности***
Растворение кристаллов. Рекристаллизация.	10	Поиск и чтение оригинальных статей на русском и английском языках.	Наличие доступа к поисковым базам данных.	Научное сообщение
Распад твердых растворов. Бездиффузионные превращения.	10	Поиск и чтение оригинальных статей на русском и английском языках.	Наличие доступа к поисковым базам данных.	Научное сообщение
Механизмы релаксации механических напряжений.	10	Поиск и чтение оригинальных статей на русском и английском языках.	Наличие доступа к поисковым базам данных.	Научное сообщение
Дегидратация кристаллогидратов.	12	Поиск и чтение оригинальных статей на русском и английском языках.	Наличие доступа к поисковым базам данных.	Научное сообщение

6. Образовательные технологии.

Преподавание дисциплины предусматривает следующие формы организации учебного процесса:

- Лекции;
- Демонстрационные опыты;
- Разбор и обсуждение оригинальных статей на русском и английском языках;
- Самостоятельная работа аспиранта.

Лекции – это основная форма обучения. Часть каждой лекции проводится в интерактивной форме, что позволяет осуществлять постоянный контроль за качеством усвоения лекционного материала и успеваемостью аспирантов.

Демонстрационные опыты – вспомогательная форма обучения. Такие опыты, как конгруентное плавление и спонтанное зародышеобразование переохлажденного расплава, рост кристаллов, наблюдение протекания полиморфных превращений и реакций термического разложения позволяют запоминать лекционный материал, расширяют кругозор аспиранта и способствуют пониманию специфики изучаемой дисциплины.

Разбор и обсуждение оригинальных статей на русском и английском языках по лекционному курсу проводится в течение семестра индивидуально с каждым аспирантом. Приветствуются статьи, принесенные аспирантами, которые относятся, с одной стороны, к лекционному материалу, а с другой - к диссертационной работе.

7. Фонд оценочных средств для текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины.

7.1. Формы текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине.

Программой дисциплины предусмотрены следующие виды контроля:

Текущий контроль. В течение семестра по мере ознакомления с лекционным материалом аспирантам предлагаются вопросы, относящиеся к применению полученных конкретных знаний для задач химии твердого тела. В результате преподаватель предварительно оценивает уровень подготовки аспиранта.

Промежуточная аттестация. Промежуточная аттестация по итогам освоения дисциплины проводится в форме зачета. Зачет проводится в виде конференции. Аспиранту предлагается детально обсудить заранее выданную для предварительного ознакомления научную статью, предложить механизм рассматриваемого в статье твердофазного процесса, а также методы, позволяющие управлять его скоростью и пространственным протеканием. Оценка «зачет» - «незачет» ставится в соответствии с уровнем понимания аспирантом сути работы.

7.2. Критерии оценивания.

Таблица 7.2

Оценка	Критерии оценки
«Зачет»	Аспирант строит ответ логично. Ответ может содержать ряд несущественных неточностей, но основные понятия раскрываются правильно. Аспирант в целом уверенно отвечает на дополнительные вопросы, хотя может наблюдаться некоторая неуверенность или неточность при ответе на дополнительные вопросы. Аспирант при ответе грамотно использует научную лексику.
«Незачет»	Аспирант не может раскрыть содержание основных понятий и

	теорий. Проявляет стремление подменить научное обоснование проблемы рассуждением бытового плана. Ответ содержит ряд серьезных неточностей. Преобладает бытовая лексика.

8. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины.

8.1. Основная литература:

1. Хирс Д., Паунд Г. Испарение и конденсация. − М.: Металлургия, 1966. Режим доступа: https://www.twirpx.com/file/2340694/
2. Фольмер М. Кинетика образования новой фазы. – М.: Наука, 1986. – 208 с. Режим доступа: https://www.twirpx.com/file/1156566/
3. Чернов А.А., Гиваргизов Е.И., Багдасаров Х.С. и др. Образование кристаллов. // Современная кристаллография. − Т.3 / Вайнштейн (гл. ред.). − М.: Кристаллография, 1980.
4. Уббелоде А.Р. Расплавленное состояние вещества. – М.: Металлургия, 1982.
5. Сангвал К. Травление кристаллов: теория, эксперимент, применение. − М.: Мир, 1990. https://www.twirpx.com/file/1098455/
6. Хейман Р.Б. Растворение кристаллов: теория и практика. – Л.: Недра, 1979.
7. Хачатурян А.Г. Теория фазовых превращений и структура твердых растворов. М.: Наука, 1974.
8. Рекристаллизация металлических материалов / Под ред. Ф. Хесснера. - М.: Металлургия, 1982.
9. Бокштейн Б.С., Копецкий Ч.В., Швиндлерман Л.С. и др. Структура и свойства внутренних поверхностей раздела в металлах. - М: Наука, 1988.
10. Кайбышев О.А., Валиев Р.З. Границы зерен и свойства металлов. − М.: Металлургия, 1987.
11. Косевич В.М., Иевлев В.М., Палатник Л.С., Федоренко А.И. Структура межкристаллитных и межфазных границ. − М: Металлургия, 1980.
12. Физическое металловедение. Т.2. / Под ред. Р.У. Кана и П. Хаазена. – М.: Металлургия. − 1987. – С. 365-406.
13. Физическое металловедение. Т.3. / Под ред. Р.У. Кана и П. Хаазена. − М: Металлургия, − 1987. − С. 305-370.
12. Раевский А.В. Топографические особенности термического разложения перхлората аммония // Механизм термического разложения перхлората аммония. – Черноголовка, АН СССР, ИХФ. – 1981. − С. 30-100.

8.2. Дополнительная литература:

1. Raghavan V., Cohen M. Growth path of a martensitic particle // Acta Metall. – 1972. – Vol.20. – P. 779-786.
2. Olson G.B., Cohen M. A general mechanism of martensitic nucleation: Part I. General concepts and the f.c.c. ↔ h.c.p. transformation. // Met. Trans. – 1976. – Vol.7A. – P.1897-1904.
3. Olson G.B., Cohen M. A general mechanism of martensitic nucleation: Part II. f.c.c. ↔ b.c.c. and other martensitic transformation. // Met. Trans. – 1976. – Vol.7A. – P.1905-1914.
4. Olson G.B., Cohen M. A general mechanism of martensitic nucleation: Part III. Kinetics of martensitic nucleation. // Met. Trans. – 1976. – Vol.7A. – P. 1915-1923.

8.3. Программное обеспечение и Интернет-ресурсы:

Программное обеспечение

1. MS Windows 7.

2. Офисный пакет LibreOffice.
3. Антивирусная программа Dr.Web.
4. Программа просмотра файлов PDF Acrobat Reader.
5. Интернет–браузеры Mozilla Firefox, Google Chrome, Opera.

Профессиональные базы данных и информационные справочные системы

- Научная электронная библиотека elibrary.ru (http://elibrary.ru);
- Реферативно-библиографическая и наукометрическая (библиометрическая) база данных Web of Science http://apps.webofknowledge.com/UA_GeneralSearch_input.do?product=UA&search_mode=GeneralSearch&SID=N1ueGpOv8ndHm2xXVE2&preferencesSaved=
- Реферативно-библиографическая и наукометрическая (библиометрическая) база данных Scopus https://www.scopus.com/search/form.uri?display=basic
- Полнотекстовая база данных ScienceDirect – ведущая информационная платформа Elsevier для ученых, преподавателей, студентов (https://www.sciencedirect.com);
- Google Scholar – полнотекстовый поиск в научных источниках – журналах, тезисах, книгах (https://scholar.google.ru);
- DOAJ – Directory of Open Access Journal – каталог журналов открытого доступа (www.doaj.org);
- Электронная библиотека РФФИ http://www.rfbr.ru/rffi/ru/books;
- Электронные ресурсы удаленного доступа ГПНТБ России http://www.gpntb.ru/elektronnye-resursy-udalennogo-dostupa.html
- Электронные каталоги и базы данных ГПНТБ СО РАН http://webirbis.spsl.nsc.ru/irbis64r_01/cgi/cgiirbis_64.exe?C21COM=F&I21DBN=CAT&P21DBN=CAT
- Электронная библиотека ГПНТБ СО РАН http://www.spsl.nsc.ru/win/nelbib/index-new1.html;
- Единое окно доступа к образовательным ресурсам Федерального портала Российское образование http://www.window.edu.ru;
- Портал фундаментального химического образования России http://www.chem.msu.ru.

9. Материально-техническое обеспечение дисциплины.

- Ноутбук, медиа-проектор, экран.
- Доска и набор цветных фломастеров.
- Программное обеспечение для демонстрации слайд-презентаций.
- Лабораторное оборудование для демонстрационных экспериментов.

10. Язык преподавания.

Дисциплина преподается на русском языке.