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

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

Рабочая программа дисциплины

РЕАКЦИОННАЯ СПОСОБНОСТЬ ТВЕРДЫХ ТЕЛ

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»

Новосибирск 2018

Рабочая программа дисциплины «Реакционная способность твердых тел» 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.

Цель дисциплины – получение аспирантами фундаментальных знаний, связанных с актуальными проблемами современной химии твёрдого тела.

Данный курс знакомит аспирантов, прежде всего, с общими принципами термодинамического описания твердых тел. В рамках курса дается классификации химических реакций твердых тел. Особое внимание уделено взаимосвязи строения и дефектности твердых тел с реакционной способностью и способам регулирования реакционной способности твердых тел. Аспиранты знакомятся также с методами исследования реакционной способности твердых тел.

Задачи дисциплины:

- ознакомление аспирантов с термодинамическим описанием твердых тел;
- ознакомление аспирантов со способами регулирования и методами исследования реакционной способности твердых тел.

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы.

Дисциплина «Реакционная способность твердых тел» относится к вариативной части Блока 1 «Дисциплины (модули)» 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 «Реакционная способность твердых тел» является составной частью модуля «Химия твердого тела» и направлена на подготовку к сдаче кандидатского экзамена; обязательна для освоения в 1-й – 2-й годы обучения.

Результаты освоения дисциплины «Реакционная способность твердых тел» используются в следующих дисциплинах данной ООП:

- Физико-химическая механика и механохимия;
- Кинетика гетерогенных реакций;
- Физические методы исследования твердых тел;
- Структура и свойства современных материалов.

Уровень начальной подготовки аспиранта: для успешного освоения дисциплины необходимо знать основные положения общей, неорганической, аналитической химии, физики, высшей математики, иметь представления об использовании компьютерной техники для обработки результатов химического эксперимента. Дисциплина закладывает знания и навыки для подготовки кандидатской диссертации.

3. Планируемые результаты обучения по дисциплине «Реакционная способность твердых тел».

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	**Знать** основные фундаментальные явления и эффекты, современное состояние, теоретические работы и результаты экспериментальных исследований в области реакционной способности твердых тел.

	междисциплинарных областях.	
УК-3	Готовность участвовать в работе российских и международных исследовательских коллективов по решению научных и научно-образовательных задач.	**Уметь** представлять материалы исследований в области реакционной способности твердых тел в виде докладов и научных статей.
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 базовые методы исследования реакционной способности твердых тел.
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 исследования реакционной способности твердых тел.
ПК-2	Способность к разработке новых методов исследования и их применению в самостоятельной научно-исследовательской деятельности в области химии твердого тела с учетом правил соблюдения авторских прав.	**Уметь** выбирать экспериментальные методы, необходимые для получения информации о реакционной способности твёрдых тел.
ПК-3	Способность к самостоятельной (в том числе руководящей) 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.	**Владеть** навыками современных методов исследования реакционной способности твёрдых тел.
ПК-4	Владение фундаментальными знаниями в основных разделах химии твердого тела, включая проблемы строения и реакционной способности твердых веществ, методы синтеза различных классов	**Знать** общие принципы термодинамического описания твердых тел; основные положения теории реакционной способности твердых тел; способы регулирования реакционной способности твердых тел.

	твердофазных соединений, методы исследования свойств твердофазных веществ и материалов; владение техникой экспериментальных исследований умение использовать информационно-поисковые системы в области химии твердого тела.	
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 процессов, связанных с регулированием реакционной способности твердых тел.

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 - занятия лекционного типа, 10 часов – 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**
		1
	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.**	**Зачет**	
Термодинамическое описание твердых тел (ТТ). Особенности ТТ – наличие поверхности, анизотропии, напряженно-деформированного состояния, дефектности и термоактивированной диффузии. Поверхностные термодинамические функции. Взаимосвязь строения поверхностных слоев и термодинамических функций для ТТ с разным типом химической связи. Внешние и внутренние напряжения. Вклад напряженно-деформированного состояния и дефектности в энергетику ТТ. Особенности процессов переноса в ТТ.	2	8	2		Опрос по ходу лекций
Взаимосвязь строения и дефектности ТТ с реакционной способностью. Реакционная способность ТТ и тип химической связи. Кристаллическая структура и реакционная способность. Различные типы дефектов в различных типах реакций.	4	8	2		Опрос по ходу лекций
Классификации химических реакций ТТ. Реакции без переноса и с переносом электрона. Структурно-чувствительные и нечувствительные реакции. Гетерогенные и гомогенные реакции. Классификация по агрегатному состоянию реагентов и продуктов. Термодинамика, кинетика и механизм конкретных процессов: испарение, сублимация, конденсация из пара, растворение, плавление, кристаллизация, реакции разложения без и с образованием твердого продукта, реакции твердое + газ, твердое + жидкость, спекание, твердое+твердое. Особенности термо-, фото-, механо- и радиационнохимических реакций.	4	8	2		Опрос по ходу лекций
Способы регулирования реакционной способности ТТ. Влияние температуры и давления на реакционную способность. Влияние различных типов дефектов на реакционную способность. Регулирование реакционной способности через допирование, дисперсность, предварительное облучение. Реакционная способность гетерогенных систем. Изменение реакционной способности в ходе превращения – обратная связь.	4	8	2		Опрос по ходу лекций

Методы исследования реакционной способности ТТ. Методы спектроскопические, дифракционные и др. Применение методов исследования для продуктов превращения и на промежуточных стадиях. Использование методов исследования in situ: преимущества, недостатки, ограничения.	4	10	2		Опрос по ходу лекций
				2	**Зачет**
Итого	**18**	**42**	**10**	**2**	**72 часа**

Программа курса лекций:

1. **Термодинамическое описание твердых тел (ТТ).** Особенности ТТ – наличие поверхности, анизотропии, напряженно-деформированного состояния, дефектности и термоактивированной диффузии. Поверхностные термодинамические функции. Взаимосвязь строения поверхностных слоев и термодинамических функций для ТТ с разным типом химической связи. Внешние и внутренние напряжения. Вклад напряженно-деформированного состояния и дефектности в энергетику ТТ. Особенности процессов переноса в ТТ.
2. **Взаимосвязь строения и дефектности ТТ с реакционной способностью.** Реакционная способность ТТ и тип химической связи. Кристаллическая структура и реакционная способность. Различные типы дефектов в различных типах реакций.
3. **Классификации химических реакций ТТ.** Реакции без переноса и с переносом электрона. Структурно-чувствительные и нечувствительные реакции. Гетерогенные и гомогенные реакции. Классификация по агрегатному состоянию реагентов и продуктов. Термодинамика, кинетика и механизм конкретных процессов: испарение, сублимация, конденсация из пара, растворение, плавление, кристаллизация, реакции разложения без и с образованием твердого продукта, реакции твердое + газ, твердое + жидкость, спекание, твердое+твердое. Особенности термо-, фото-, механо- и радиационнохимических реакций.
4. **Способы регулирования реакционной способности ТТ.** Влияние температуры и давления на реакционную способность. Влияние различных типов дефектов на реакционную способность. Регулирование реакционной способности через допирование, дисперсность, предварительное облучение. Реакционная способность гетерогенных систем. Изменение реакционной способности в ходе превращения – обратная связь.
5. **Методы исследования реакционной способности ТТ.** Методы спектроскопические, дифракционные и др. Применение методов исследования для продуктов превращения и на промежуточных стадиях. Использование методов исследования in situ: преимущества, недостатки, ограничения.

5. Самостоятельная работа обучающихся.

Таблица 5.1

Виды работ	***Количество часов***
Работа с конспектами лекций, изучение основной и дополнительной литературы; подготовка к текущему и промежуточному контролю знаний.	42

6. Образовательные технологии.

Занятия проводятся в лекционной форме с элементами интерактивного обучения.

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. Текущий контроль осуществляется в виде опроса по ходу лекций.

Промежуточная аттестация. Промежуточная аттестация по итогам освоения дисциплины проводится в форме зачета. Шкала оценивания: «зачет – незачет». Вопросы к зачету отражают основные темы курса. Перед зачетом проводится консультация.

7.2. Контролирующие материалы.

***Вопросы для подготовки к зачету*:**

1. Особенности твердых тел – наличие поверхности, анизотропии, напряженно-деформированного состояния, дефектности и термоактивированной диффузии. Поверхностные термодинамические функции.
2. Взаимосвязь строения поверхностных слоев и термодинамических функций для твердых тел с разным типом химической связи.
3. Внешние и внутренние напряжения. Вклад напряженно-деформированного состояния и дефектности в энергетику твердых тел. Особенности процессов переноса в твердых телах.
4. Реакционная способность твердых тел и тип химической связи.
5. Кристаллическая структура и реакционная способность.
6. Различные типы дефектов в различных типах реакций.
7. Реакции без переноса и с переносом электрона.
8. Структурно-чувствительные и нечувствительные реакции.
9. Гетерогенные и гомогенные реакции. Классификация химических реакций по агрегатному состоянию реагентов и продуктов.
10. Термодинамика, кинетика и механизм конкретных процессов: испарение, сублимация, конденсация из пара, растворение, плавление, кристаллизация, реакции разложения без и с образованием твердого продукта, реакции твердое + газ, твердое + жидкость, спекание, твердое+твердое.
11. Особенности термо-, фото-, механо- и радиационно-химических реакций.
12. Влияние температуры и давления на реакционную способность.
13. Влияние различных типов дефектов на реакционную способность.
14. Регулирование реакционной способности через допирование, дисперсность, предварительное облучение.
15. Изменение реакционной способности в ходе превращения – обратная связь.
16. Методы исследования реакционной способности твердых тел: спектроскопические, дифракционные и др.
17. Применение методов исследования для продуктов превращения и на промежуточных стадиях.
18. Использование методов исследования in situ: преимущества, недостатки, ограничения.

7.3. Критерии оценивания.

Таблица 7.3

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. Болдырев В.В. Реакционная способность твердых веществ (на примере реакций термического разложения). Новосибирск: Изд-во СО РАН, 1997. 304 с.
2. Болдырев В.В. Управление химическими реакциями в твердой фазе. Соросовский образовательный журнал. 1996. http://www.pereplet.ru/obrazovanie/stsoros/96.html
3. Boldyrev V.V., Boulens M., Delmon B. The Control of the Reactivity of Solids. Elsevier Sci. Publ., Amsterdam, 1979.
4. Boldyrev V.V. Reactivity of Solids // Journal of Thermal Analysis. 1993. V. 40. P. 1041 - 1062.
5. Болдырев В.В., Ляхов Н.З., Чупахин А.П. Химия твердого тела. М.: Знание, 1982.
6. Чупахин А.П., Болдырев В.В. Изв. Сибирского отделения АН СССР, серия хим. наук. 1982. Т. 4. В. 2. С. 3.

8.2. Дополнительная литература:

1. Дельмон Б. *Кинетика гетерогенных реакции.* М., Мир, 1972.
2. Барре П. *Кинетика гетерогенных процессов.* М., Мир, 1976.
3. Будников П.П., Гинстлинг А.М. *Реакции в смесях твердых веществ.* М.: Стройиздат, 1971.
4. Третьяков Ю.Д. *Твердофазные реакции.* М.: Химия, 1978.
5. Розовский А.Я. *Кинетика топохимических реакций,* М., 1974.
6. Ляхов Н.З. *Кинетика твёрдофазных реакций, вып. 1, Топохимическая кинетика*, Новосибирск: НГУ, 1982.

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
- SCIRUS - бесплатная поисковая система издательства Elsevier, ориентированная на поиск научной информации (www.scirus.com);
- 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);
- 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.
- Электронные ресурсы НГУ
http://fen.nsu.ru/posob/htt/xtt_reactivity_1.pdf

9. Материально-техническое обеспечение дисциплины.

- Ноутбук, медиа-проектор, экран.
- Программное обеспечение для демонстрации слайд-презентаций.

10. Язык преподавания.

Дисциплина преподается на русском языке.