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

ХИМИЯ ТВЕРДОГО ТЕЛА

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 «Химия твердого тела» 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, канд. хим. наук Матвиенко 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 кристаллографии и кристаллохимии, теорией электронного строения твердых тел, дефектов кристаллического строения и фазовых переходов в твёрдых телах;
- формирование у аспирантов представлений о влиянии дефектов на протекание твердофазных реакций;
- ознакомление аспирантов с экспериментальными методами исследования твердых тел.

Данный курс знакомит аспирантов с основами описания кристаллической структуры кристаллов, влияния химического состава на структуру кристаллов, влияния дефектов кристаллического строения на физические и химические свойства твёрдых тел, даёт общие представления об электронном строении твёрдых тел и фазовых переходах в кристаллах.

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы.

Дисциплина «Химия твердого тела» относится к базовой 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 «Химия твердого тела» является базовой дисциплиной модуля «Химия твердого тела» и направлена на подготовку к сдаче кандидатского экзамена. Дисциплина обязательна для освоения в 1-й – 2-й годы обучения. Сдача кандидатского экзамена предусмотрена в 8 семестре, когда обучающиеся освоили все дисциплины модуля, практики, приобрели опыт научно-исследовательской деятельности. Предусмотрена возможность сдачи кандидатского экзамена в более ранние сроки по заявлению обучающегося.

Результаты освоения дисциплины «Химия твердого тела» используются в следующих разделах программы аспирантуры:

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

3. Планируемые результаты обучения по дисциплине «Химия твердого тела».

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	**Знать** основные фундаментальные явления и эффекты, современное состояние, теоретические работы и результаты экспериментальных

	решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях.	исследований в области химии твердого тела.
УК-3	Готовность участвовать в работе российских и международных исследовательских коллективов по решению научных и научно-образовательных задач.	**Уметь** представлять результаты исследований в виде докладов и научных статей, в том числе, с привлечением современных средств редактирования и печати.
УК-5	Способность планировать и решать задачи собственного профессионального и личностного развития.	**Уметь** выбирать методы исследования, модифицировать существующие и разрабатывать новые методы исходя из задач конкретного исследования по выбранной теме.
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 в химии твердого тела.
ОПК-2	Готовность организовать работу исследовательского коллектива в области химии и смежных наук.	**Уметь** формулировать и ставить задачи, возникающие в ходе научно-исследовательской деятельности.
ОПК-3	Готовность к преподавательской деятельности по основным образовательным программам высшего образования.	**Знать** обучающий материал всесторонне и глубоко, чтобы использовать его в своей преподавательской деятельности.
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.	**Знать** основные направления, проблемы, теории и методы по проблемам конкретной области исследований в рамках химии твердого тела. **Владеть** основами физико-химических методов изучения строения и свойств 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 конкретной информации о строении и химических и физических свойствах твёрдых тел.
ПК-3	Способность к самостоятельной (в том числе руководящей) научно-исследовательской деятельности, требующей широкой	**Знать** основные современные направления развития химии твёрдого тела; современные методы исследования строения и свойств твёрдых тел.

	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 в области химии твердого тела.
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** основы описания кристаллической структуры и электронного строения твердых тел; теоретические представления о влиянии дефектов кристаллического строения на физические и химические свойства твёрдых тел и фазовых переходах в кристаллах. **Уметь** проводить литературный поиск, анализировать информацию, определять задачи, в которых можно применять знания и представления о физико-химическом поведении веществ в конденсированном состоянии.
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, происходящих при твердофазных превращениях.

4. Объем, структура и содержание дисциплины.

Объем дисциплины составляет 5 зачетных единиц, всего 180 академических часов, из которых 88 часов составляет контактная работа аспиранта с преподавателем (72 часа - занятия лекционного типа, 10 часов - групповые консультации, 4 часа - мероприятия промежуточной аттестации, 2 часа – кандидатский экзамен), 92 часа составляет самостоятельная работа аспиранта.

4.1. Объем и структура дисциплины:

Таблица 4.1

Показатель объема дисциплины и вид деятельности		Семестр		
		1	**2**	**8**
	Объем дисциплины в зачетных единицах	2	2	1
	Объем дисциплины в часах	72	72	36
	Всего занятий в контактной форме, час	42	42	4

	Лекции, час.	36	36	
	Аттестация, час	2	2	2
	Консультации, час.	4	4	2
	Самостоятельная работа, час.	30	30	32
	Вид аттестации	Диф.зачет	Диф.зачет	Экзамен

4.2. Содержание дисциплины:

Таблица 4.2

Наименование разделов (тем) дисциплины	Количество часов				Контроль
	Лекции	**Сам. работа**	**Консульт.**	**Аттестация**	
Структура кристаллов. Понятие симметрии. Закрытые и открытые операции симметрии. Точечные группы симметрии. Трансляционная симметрия как характеристический признак кристаллических структур. Совместимость закрытых операций симметрии с трансляционной симметрией. Решётка Бравэ. Элементарная ячейка. Пространственные группы симметрии. Кристаллографический класс. Кристаллографические таблицы. Принципы описания структуры кристаллов. Базы данных кристаллических структур. Влияние симметрии кристаллов на их физические свойства. Принцип Кюри. Принцип Неймана. Связь симметрии и электрических свойств кристаллов: пироэлектрики, сегнетоэлектрики, пьезоэлектрики. Симметрия некристаллических твёрдых тел - квазикристаллов и несоразмерных структур. Структура аморфных твёрдых тел. Понятия ближнего и дальнего порядка. Жидкие кристаллы.	14	18			Опрос по ходу лекций
Типы химических связей и структура кристаллов. Структуры элементов, влияние типа связи на кристаллическую структуру. Описание структур твёрдых тел через плотные упаковки частиц. Структуры соединений, описываемых как плотнейшие упаковки различных шаров (в том числе, шпинели и перовскиты). Правила Полинга. Описание структур молекулярных кристаллов как плотнейших и плотных упаковок. Понятие радиуса атомов и ионов. Различные системы радиусов. Описание структуры в координационных полиэдрах. Основные виды полиэдров, выделяемых в структурах оксидов, халькогенидов, галогенидов, силикатов. Выявление степеней окисления и электронного состояния атомов, входящих в структуру, и получение информации о химических связях в твёрдых телах на основании анализа координационных полиэдров. Структуры цеолитов, соединения типа "гость-хозяин". Водородные связи. Слабые нековалентные взаимодействия.	16	20	2		Опрос по ходу лекций
Различные подходы к описанию электронного строения твёрдых тел. Модели свободных и слабо связанных электронов. Метод кристаллических орбиталей. Роль трансляционной симметрии.	6	8			Опрос по ходу лекций

Функции Блоха. Локальные энергетические уровни и энергетические зоны. Изоляторы, собственные и примесные полупроводники, металлы. К-пространство. Зоны Бриллюэна. Энергия Ферми, поверхность Ферми.					
Классификация дефектов в кристаллах. Точечные дефекты в кристаллах. Механизмы образования точечных дефектов. Квазихимические равновесия. Тепловые дефекты, дефекты нестехиометрии и примесные дефекты. Центры окраски. Методы изменения концентрации точечных дефектов в кристаллах. Диффузия. Механизмы диффузии и выражения для коэффициента диффузии. Движущие силы диффузии. Законы Фика. Диффузия в поле механических напряжений (эффект Горского). Ионная проводимость, в том числе суперионная проводимость. Собственная и примесная проводимость. Влияние температуры и допирования. Изотерма Коха-Вагнера. Дислокации в кристаллах. Основные виды дислокаций. Вектор Бюргерса. Энергия дислокации. Взаимодействия между дислокациями. Основные виды движения дислокаций. Факторы, влияющие на подвижность дислокаций. Различные механизмы пластической деформации. Частичные дислокации. Двойникование в кристаллах. Влияние дислокаций на физические свойства кристаллов и на их поведение в химических реакциях. Структура большеугловых межкристаллитных границ. Структура межфазных границ. Поверхность кристалла. Разрушение в кристаллах.	20	26			Опрос по ходу лекций
Термодинамическая классификация фазовых переходов. Фазовые переходы 1-го и 2-го рода. Представление фазовых переходов на диаграммах состояния. Структурные изменения при фазовых переходах. Классификация фазовых переходов по Бюргеру. Реконструктивные и деформационные переходы. Изменения структуры при изменении температуры и давления. Теория зародышеобразования. Образование метастабильных фаз. Факторы, влияющие на кинетику фазовых переходов. Деформационные превращения. Мартенситные превращения.	16	20	**2**		Опрос по ходу лекций
Промежуточная аттестация (в 1 и 2 семестре)			**4**	**4**	**Дифзачеты**
Кандидатский экзамен (8 семестр)			**2**	**2**	**Экзамен**
Итого	**72**	**92**	**10**	**6**	**180 час.**

Программа курса лекций.

I. Строение кристаллов.

История кристаллографии. Понятие симметрии. Закрытые и открытые операции симметрии. Символьные и графические обозначения элементов симметрии. Матрицы преобразования координат под действием операций симметрии. Понятие группы симметрии. Точечные группы симметрии. Трансляционная симметрия как характеристический признак кристаллических структур. Совместимость закрытых операций симметрии с трансляционной симметрией. Группа трансляций. Решётка Бравэ. Группа Бравэ. Элементарная ячейка. Пространственные группы симметрии. Обозначения групп симметрии. Симморфные и асимморфные группы. Кристаллографический класс. Сингония кристаллической структуры. Симметрия решётки Бравэ и симметрия

структуры: общее и различия. Кристаллографические таблицы. Принципы описания структуры кристаллов. Базы данных кристаллических структур. Влияние симметрии кристаллов на их физические свойства. Принцип Кюри. Принцип Неймана. Связь симметрии и электрических свойств кристаллов: пироэлектрики, сегнетоэлектрики, пьезоэлектрики. Симметрия некристаллических твёрдых тел - квазикристаллов и несоразмерных структур. Сходства и различия в строении кристаллов, квазикристаллов и несоразмерных структур. Возможность существования дальнего порядка при отсутствии трансляционной симметрии. Понятия периода смещения несоразмерных структур. Использование последовательности Фиббоначчи, мозаик Пенроуза для описания структур квазикристаллов. Структура аморфных твёрдых тел. Понятия ближнего и дальнего порядка. Функция радиального распределения. Жидкие кристаллы. Нематики, смектики, холестерики. Применение жидких кристаллов.

II. Структура твёрдых веществ и химические связи в них.

Типы химических связей и структура кристаллов. Структуры элементов, влияние типа связи на кристаллическую структуру. Описание структур твёрдых тел через плотные упаковки частиц. Определение "плотнейшей" и "плотных" упаковок применительно к структурам твёрдых тел. Основные виды упаковок, встречающиеся в твёрдых телах. Основные типы упаковок шаров одного сорта: регулярные и нерегулярные упаковки, понятия слойности упаковки, дефекта упаковки. Виды кристаллических и некристаллических структур, успешно описываемых как плотнейшие упаковки одинаковых шаров. Упаковки шаров разных размеров: факторы, определяющие тип упаковки и мотив заполнения пустот. Структуры соединений, описываемых как плотнейшие упаковки различных шаров (в том числе, шпинели и перовскиты). Правила Полинга. Упаковки частиц сложной формы. Описание структур молекулярных кристаллов как плотнейших и плотных упаковок. Понятие "коэффициента упаковки". Выявление полостей и каналов в структурах с "плотными" и "плотнейшими" упаковками. Понятие радиуса атомов и ионов. Различные системы радиусов. Существующие системы атомных и ионных радиусов, а также инкрементов отдельных атомных группировок и целых молекул. Условность понятий "размера" и "формы" атомов, ионов, молекул. Возможности и ограничения различных методов их оценки из экспериментальных данных и теоретических расчётов. Необходимость использования различных приёмов описания структур твёрдых тел для различных целей, таких как: сравнение структур различных соединений и различных полиморфных модификаций одного и того же соединения; исследование химических связей и специфических взаимодействий в кристаллах; прослеживание эволюции структуры при искажениях в результате внешних воздействий, а также фазовых переходах и химических превращениях; исследование взаимосвязей "кристаллическая структура - физическое свойство" и "кристаллическая структура - химическая реакционная способность. Выделение координационных полиэдров в структурах твёрдых тел. Методы и степень условности выделения координационных полиэдров в структурах твёрдых тел. Основные виды полиэдров, выделяемых в структурах оксидов, халькогенидов, галогенидов, силикатов. Координационные полиэдры в кристаллических и некристаллических структурах. Связь структур некристаллических твёрдых тел со способами их получения. Выявление степеней окисления и электронного состояния атомов, входящих в структуру, и получение информации о химических связях в твёрдых телах на основании анализа координационных полиэдров. Описание всей структуры твёрдого тела как совокупности координационных полиэдров, заполняющих объём а) с образованием пустот; б) полностью (без пустот). Представление кристаллической структуры в виде полиэдров для объяснения нестехиометрии соединения. Понятие о сдвиговых структурах. Представление структуры в полиэдрах для описания распределения "свободного пространства" (каналов, полостей) в структуре. Структуры цеолитов, соединения типа "гость-хозяин". Водородные связи. Слабые

нековалентные взаимодействия.

III. Электронное строение твёрдых тел.

Различные подходы к описанию электронного строения твёрдых тел. Модели свободных и слабо связанных электронов. Метод кристаллических орбиталей. Роль трансляционной симметрии. Функции Блоха. Локальные энергетические уровни и энергетические зоны. Изоляторы, собственные и примесные полупроводники, металлы. К-пространство. Зоны Бриллюэна. Энергия Ферми, поверхность Ферми.

IV. Дефекты в кристаллах.

Классификация дефектов в кристаллах. Точечные дефекты в кристаллах. Причины образования. Тепловые точечные дефекты. Концентрация. Механизмы образования точечных дефектов. Собственные и примесные дефекты. Обозначения Крёгера. Квазихимические равновесия. Связь наличия точечных дефектов с нестехиометрией. Влияние температуры и окружающей среды на равновесия точечных дефектов в кристаллах. Центры окраски. Методы изменения концентрации точечных дефектов в кристаллах. Допирование. Диффузия. Механизмы диффузии и выражения для коэффициента диффузии. Движущие силы диффузии. Законы Фика. Диффузия в поле механических напряжений (эффект Горского). Ионная проводимость, в том числе суперионная проводимость. Собственная и примесная проводимость. Влияние температуры и допирования. Изотерма Коха-Вагнера. Структурные искажения вблизи точечных дефектов. Экспериментальное исследование точечных дефектов в твёрдых телах (электрофизические, спектроскопические, дифракционные методы). Влияние точечных дефектов на реакции с участием твёрдых тел. Дислокации в кристаллах. Основные виды дислокаций, краевые, винтовые, смешанные дислокации, дислокационные петли. Вектор Бюргерса. Энергия дислокации. Взаимодействия между дислокациями. Образование дислокационных сеток, полигонизация. Дислокационные стенки. Основные виды движения дислокаций. Скольжение дислокаций. Барьер Пайерлса-Набарро. Плоскости скольжения дислокаций. Системы скольжения в различных структурах. Переползание дислокаций. Факторы, влияющие на подвижность дислокаций. Деформация кристаллов (основные стадии). Явление наклёпа. Взаимодействия дислокаций с примесными атомами. Различные механизмы влияния примесных атомов на подвижность дислокаций. Взаимодействие дислокаций с дисперсионными частицами. Механизм Орована. Композиционные материалы. Различные механизмы пластической деформации: скольжение дислокаций, дислокационная и диффузионная ползучесть. Карта механизмов пластической деформации. Частичные дислокации. Дефекты упаковки. Энергия дефекта упаковки. Двойникование в кристаллах. Сдвиговые превращения. ГЦК – ГПУ превращение в кобальте. Влияние дислокаций на физические свойства кристаллов и на их поведение в химических реакциях. Экспериментальные методы изучения дислокаций. Эволюция дислокационной структуры при деформации и в процессе термообработки. Процессы образования зёрен. Первичная, вторична, третичная рекристаллизация. Структура большеугловых межкристаллитных границ. Различные модели: РСУ, полиэдров, 0-решётка, РЗС. Свойства межкристаллитных границ. Структура межфазных границ. Когерентные, полукогерентные, некогерентные границы. Строение некогерентных межфазных границ. Подвижность и свойства межфазных границ. Поверхность кристалла. Строение поверхности, поверхностные состояния. Экспериментальные методы исследования поверхностей. Физические и химические свойства твёрдых тел, определяемые их поверхностью. Влияние объёмных свойств на процессы на поверхности и поверхностных свойств на процессы в объёме. Теория Гриффитса хрупкого разрушения. Эффекты Иоффе и Ребендера. Теория Орована вязкого разрушения. Механизмы образования трещины при пластической деформации.

V. Фазовые переходы в кристаллах.

Термодинамическая классификация фазовых переходов. Фазовые переходы 1-го и 2-го рода. Представление фазовых переходов на диаграммах состояния. Структурные изменения при фазовых переходах. Классификация фазовых переходов по Бюргеру. Реконструктивные и деформационные переходы. Изменения структуры при изменении температуры и давления. Теория зародышеобразования. Образование метастабильных фаз. Механизмы фазовых переходов. Строение межфазных и межкристаллитных границ. Реконструктивные переходы. Скорость движения некогерентной границы. Факторы, влияющие на кинетику фазовых переходов. Деформационные превращения. Мартенситные превращения. Механизм ГЦК-ГПУ превращения в кобальте. Эффект памяти формы и сверхупругость.

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.	92

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, промежуточной и итоговой аттестации по дисциплине.

Текущий контроль.

Текущий контроль осуществляется на лекциях в форме устного контрольного опроса. Цель устного контрольного опроса - оценка самостоятельной работы аспирантов по вопросам тем теоретического содержания.

Промежуточная аттестация.

Промежуточная аттестация по итогам освоения дисциплины проводится в виде дифференцированного зачета (зачет с оценкой) в конце семестра. Сдача зачета оценивается по шкале: отлично, хорошо, удовлетворительно, неудовлетворительно, и проходит в устной форме. Необходимо подготовить развёрнутые ответы на 2 вопроса из разных разделов курса. При подготовке ответов можно пользоваться лекциями и любой литературой. Далее основной элемент зачета - беседа для проверки знаний базовых понятий и основ курса. Перед зачетом проводится консультация. Программа курса и список литературы доступны на сайте www.solid.nsc.ru.

Итоговая промежуточная аттестация.

Итоговая промежуточная аттестация – сдача кандидатского экзамена по специальности «Химия твердого тела». Экзамен сдается в устной форме по программе кандидатского экзамена. Программа кандидатского экзамена разрабатывается в профильном структурном подразделении ИХТТМ СО РАН.

7.2. Критерии оценивания.

При промежуточной аттестации применяются следующие критерии оценивания:

Таблица 7.2

Оценка	Критерии оценки
Отлично	Аспирант строит ответ логично в соответствии с планом, обнаруживает глубокое знание теоретических вопросов. Уверенно отвечает на дополнительные вопросы. При ответе грамотно использует научную лексику.
Хорошо	Аспирант строит ответ в соответствии с планом, обнаруживает хорошее знание теоретических вопросов. Ответ содержит ряд несущественных неточностей. Наблюдается некоторая неуверенность или неточность при ответе на дополнительные вопросы. Речь грамотная с использованием научной лексики.
Удовлетворительно	Ответ аспиранта недостаточно логически выстроен, обнаруживается слабость в развернутом раскрытии теоретических вопросов, хотя основные понятия раскрываются правильно. Наблюдается сильная степень неуверенности при ответе на дополнительные вопросы. Научная лексика используется ограниченно.
Неудовлетворительно	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. Аспирант не способен выполнить практическое задание.

7.2. Контролирующие материалы.

Примерные вопросы к зачету.

Строение твердых веществ

1. Трансляционная симметрия. Точечные и пространственные группы симметрии. Кристаллографический класс. Кристаллическая система. Решётки Бравэ. Выбор и типы элементарных ячеек. Наиболее распространенные пространственные группы симметрии кристаллических структур неорганических и органических соединений. Понятия аллотропии, полиморфизма, политипизма.
2. Описание кристаллических и некристаллических структур через плотные и плотнейшие упаковки. Размеры атомов и ионов. Координационные числа. Описание кристаллических и некристаллических структур в координационных полиэдрах.
3. Понятие «структурный тип». Примеры соединений, кристаллизующихся в основных структурных типах. Структуры каменной соли (NaCl) и хлорида цезия (CsCl), сфалерита и вюрцита (ZnS), флюорита (CaF_2) и антифлюорита (Na_2O). Структурные типы арсенида никеля (NiAs), иодида кадмия (CdI_2) и рутила (TiO_2). Структурные типы перовскита ($CaTiO_3$) и шпинели ($MgAl_2O_4$). Общие сведения о структурах силикатов и алюмосиликатов. Твердые растворы замещения, внедрения и вычитания. Соединения внедрения и клатраты.
4. Модулированные структуры (соразмерные и несоразмерные модуляции).

Квазикристаллы.

5. Строение аморфных твёрдых веществ. Функция радиального распределения. Структуры жидких кристаллов. Нематики, смектики, холестерики.

Структура твёрдых веществ и химические связи в них

1. Ионная модель строения кристаллов, константа Моделунга, энергия ионной решетки. Цикл Борна-Габера. Ковалентная связь. Степень ионности связи. Остаточная (Ван дер Ваальсова) связь. Водородная связь.
2. Зонная энергетическая структура кристалла. Зонная структура кристаллов. Образование зон в результате перекрывания орбиталей. Уровень Ферми. Химический потенциал. Заселенность зон, ее влияние на электрофизические свойства кристаллов. Валентная зона, запрещенная зона, зона проводимости. Металлы и диэлектрики. Собственные и примесные полупроводники. Электронная и дырочная проводимость.

Реальная структура кристаллов

1. Точечные дефекты в кристаллах. Основные виды. Беспорядок по Френкелю и Шоттке. Обозначения дефектов по Крегеру и Винку. Равновесная концентрация тепловых точечных дефектов. Энтальпия образования тепловых точечных дефектов.
2. Точечные дефекты, обусловленные нестехиометрией кристаллов. Квазихимические равновесия. Влияние внешней атмосферы на концентрацию точечных дефектов. Основные виды нестехиометрии в оксидах металлов. Влияние температуры на эффективный заряд точечных дефектов.
3. Точечные дефекты, обусловленные присутствием примесных атомов. Влияние примеси на концентрацию точечных дефектов в кристаллах.
4. Диффузия в твердых телах. Основные механизмы диффузии. Выражения для коэффициента диффузии в кристаллах. Энергия активации диффузии.
5. Направленная диффузия в кристаллах. 1-й закон Фика. Диффузия в поле механических напряжений – эффект Горского.
6. Ионная проводимость в кристаллах. Числа переноса. Параметры, которые можно получить из температурной зависимости ионной проводимости. Влияние примесных атомов на ионную проводимость. Изотерма Коха-Вагнера.
7. Взаимная диффузия в твердых телах. Эффект Киркендаля. Методы определения коэффициента диффузии.
8. Диффузия и химические реакции. Роль диффузии и точечных дефектов при реакциях твёрдое + газ и твердое + твердое.
9. Дислокации. Вектор и контур Бюргерса. Свойства вектора Бюргерса. Энергия краевой и винтовой дислокации.
10. Движение дислокаций: скольжение и переползание. Определение плоскости скольжения. Барьер Пайерлса-Набарро. Наблюдаемые системы скольжения (ГЦК, ОЦК и ГПУ металлы, ионные кристаллы (NaCl, CsCl)).
11. Упругое взаимодействие между дислокациями. Полигонизация, аннигиляция и пересечение дислокаций.
12. Образование дислокаций. Источник Франка-Рида. Методы наблюдения дислокаций.
13. Факторы, влияющие на подвижность дислокаций. Влияние примесных атомов на подвижность дислокаций. Взаимодействие дислокаций с дисперсными частицами.
14. Различные механизмы пластической деформации: скольжение дислокаций, дислокационная и диффузионная ползучесть. Карта механизмов пластической деформации.
15. Частичные дислокации. Дефекты упаковки. Энергия дефекта упаковки. Двойникование в кристаллах. Сдвиговые превращения. ГЦК – ГПУ превращение в кобальте.

16. Теория Гриффитса хрупкого разрушения. Эффекты Иоффе и Ребендера. Теория Орована вязкого разрушения. Механизмы образования трещины при пластической деформации.

Фазовые переходы в твёрдых телах.

1. Термодинамическая классификация фазовых переходов. Фазовые переходы 1-го и 2-го рода. Представление фазовых переходов на диаграммах состояния. Структурные изменения при фазовых переходах. Классификация фазовых переходов по Бюргеру. Реконструктивные и деформационные переходы. Изменения структуры при изменении температуры и давления.
2. Теория зародышеобразования. Образование метастабильных фаз. Механизмы фазовых переходов. Строение межфазных и межкристаллитных границ.
3. Реконструктивные переходы. Скорость движения некогерентной границы. Факторы, влияющие на кинетику фазовых переходов.
4. Деформационные превращения. Мартенситные превращения. Механизм ГЦК-ГПУ превращения в кобальте. Эффект памяти формы и сверхупругость.

8. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины.

8.1. Основная литература:

1. Кнотько А.В., Пресняков И.А., Третьяков Ю.Д. Химия твердого тела. – М.: «Академия», 2006. 304 с. http://www.studmed.ru/download/knotko-av-himiya-tverdogo-tela_7bcdd0060dd.html
2. Бокштейн Б.С., Ярославцев А.Б. Диффузия атомов и ионов в твердых телах. М.: МИСИС, 2005. 392 с.
3. Вест А. Химия твердого тела. Теория и приложения : пер. с англ. – М.: Мир, 1988. Ч. 1. –556 с., Ч. 2. – 338 с. http://booksonchemistry.com/index.php?id1=3&category=inorganic%20chemistry&author=vest-a&book=19881
4. Китель Ч. Введение в физику твердого тела. М.: «Наука», 1978. 792 с. https://kaf70.mephi.ru/pdf/kittel.pdf
5. Ч.Н.Р. Рао, Дж. Гопалакришнан. Новые направления в химии твердого тела. Новосибирск: «Наука», 1990. 520 с. https://freedocs.xyz/view-docs.php?djvu=438544697
6. Ковтуненко П.В. Физическая химия твердого тела. Кристаллы с дефектами. М.: «Высшая школа», 1993. 352 с.
7. Фридель Ж. Дислокации. М.: «Мир», 1967. 644 с.
8. Кофстад П. Отклонение от стехиометрии, диффузия и электропроводность в простых оксидах. М.: «Мир». 1975. 397 с.

8.2. Дополнительная литература:

1. Третьяков Ю.Д., Путляев В.И. Введение в химию твердофазных материалов. М.: «Наука». 2006. 400 с. http://www.vixri.com/d3/Tretjakov%20Ju.D.%20%20_Vvedenie%20v%20ximiju%20tverdofaznyx%20materialov.pdf
2. Келли А., Гровс Г. Кристаллография и дефекты в кристаллах. М.: «Мир», 1979. 486 с. http://booksonchemistry.com/index.php?id1=3&author=kallia-a
3. Штремель М.А. Прочность сплавов. Ч.1. Дефекты решётки. М.: «МИСИС», 1999. 384 с. https://lib-bkm.ru/load/99-1-0-2557
5. Ашкрофт Н., Мермин Н. Физика твердого тела. М.: «Мир»,1979, т. II. 486 с. http://mat.net.ua/mat/biblioteka-fizika/Ashkroft-tverdoe-telo-t1.pdf
6. Бокий Г.Б. Кристаллохимия. М.: «Наука», 1971. 400 с.

7. Чупрунов Е.В., Хохлов А.Ф., Фадеев М.А. Основы кристаллографии. М.: Физматлит, 2006. 500 с. http://www.vixri.ru/d/Chuprunov%20E.%20V.%20_Osnovy%20kristallografii-2004.pdf
8. Бутягин П.Ю. Химическая физика твердого тела. М.: Изд-во МГУ, 2006. 272 с.
9. Современная кристаллография т. 4. Физические свойства кристаллов. Под ред. Б.К. Вайнштейна, М.: «Наука», 1981. 496 с.
10. Порай-Кошиц М.А. Основы структурного анализа химических соединений. М.: «Высшая школа», 1989. 192 с. http://crystal.geology.spbu.ru/files/books/poraj-k.zip
11. Крегер Ф. Химия несовершенных кристаллов. М.: «Мир», 1969. 654 с. http://www.geokniga.org/bookfiles/geokniga-himiya-nesovershennyh-kristallov.djvu
12. Майер К. Физико-химическая кристаллография. М.: «Металлургия», 1972. 480 с.
13. Фистуль В.И. Физика и химия твердого тела. М.: 1995. т.1. 480 с. т. 2. 320 с. http://www.studmed.ru/download/fistul-vi-fizika-i-himiya-tverdogo-tela-1-tom_90ef9ab1a41.html

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 НГУ http://fen.nsu.ru/posob/htt/xtt_reactivity_1.pdf
- 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.

10. Язык преподавания.

Дисциплина преподается на русском языке.