

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
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-р хим. наук
А.П. Немудрый

А.П. Немудрый
«22» марта 2022 г.

Рабочая программа дисциплины
ИОНИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА

Программы подготовки научных и научно-педагогических кадров
в аспирантуре

Научная специальность подготовки:
1.4.15. Химия твердого тела

Новосибирск 2022

Рабочая программа дисциплины «Химия твердого тела» составлена в соответствии с федеральными государственными требованиями в рамках Программы подготовки научных и научно-педагогических кадров по научной специальности 1.4.15. Химия твердого тела.

ФГТ введены в действие приказом Минобрнауки России от 20 октября 2021 г. № 951.

Программа утверждена на заседании Ученого совета ИХТТМ СО РАН, протокол № 6 от 28 марта 2022 г.

Программу разработал:

профессор ИХТТМ СО РАН, д-р хим. наук, ст. науч. сотр. Уваров Н.Ф.

Заведующий аспирантурой

д.х.н., ст. науч. сотр.

Т.П. Шахтшнейдер

1. Цели и задачи дисциплины.

Дисциплина ставит своей целью усвоение аспирантами понятий, связанных с физико-химическими процессами диффузии, ионного и электронного переноса в твердых телах, электрохимическими процессами в твердофазных системах и практическими применениями твердых электролитов.

Задачи дисциплины: ознакомить аспирантов с

- предметом ионики твердого тела как науки о физико-химических и электрохимических процессах, протекающих в твердофазных системах;
- основными классами твердых электролитов и функциональных материалов твердотельных электрохимических устройств;
- квазихимическим подходом для расчета концентрации точечных дефектов в кристаллах;
- твердыми веществами с высокой концентрацией дефектов, в т.ч. суперионными, соединениями;
- атомарными механизмами диффузионного переноса атомов и ионов в кристаллах;
- механизмами ионного переноса в протонных проводниках и ориентационно-разупорядоченных фазах ионных соединений;
- влиянием различных факторов (температуры, давления, величины электрического поля) на транспортные свойства твердых веществ;
- процессами химической диффузии и сопряженного переноса ионов и электронов в кристаллах;
- диффузионно-контролируемыми химическими процессами на границе раздела фаз;
- равновесием дефектов и образованием двойного электрического слоя на поверхности кристаллов и межзеренных границах;
- процессами образования дефектов на межфазных границах и транспортными свойствами композиционных твердых электролитов;
- экспериментальными методами исследования транспортных свойств твердофазных систем;
- методами расчета и оценки коэффициентов диффузии по экспериментальным данным;
- основами компьютерного моделирования процессов дефектообразования и ионного переноса в кристаллах;
- практическими применениями твердых электролитов и других соединений с уникальными транспортными свойствами.

Рассматриваются транспортные свойства упорядоченных соединений, твердых электролитов с высокой концентрацией дефектов, нестехиометрических соединений, как в индивидуальном состоянии, так и в качестве одного из компонентов композита. Анализируются процессы, протекающие в твердотельных электрохимических ячейках, электродных материалах и химических источниках тока.

2. Место дисциплины в структуре Программы аспирантуры.

Дисциплина «Ионика твердого тела» относится к образовательной компоненте Программы аспирантуры по научной специальности 1.4.15. Химия твердого тела, реализуемой в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институте химии твердого тела и механохимии Сибирского отделения Российской академии наук (ИХТТМ СО РАН).

Дисциплина «Ионика твердого тела» является составной частью модуля «Химия твердого тела».

Дисциплина «Ионика твердого тела» является дисциплиной по выбору для освоения

в 1-й – 2-й годы обучения.

Результаты освоения дисциплины «Ионика твердого тела» используются в следующих разделах Программы аспирантуры:

- Научная деятельность, направленная на подготовку диссертации к защите.
- Научно-исследовательская практика.
- Итоговая аттестация.

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

В результате освоения дисциплины аспиранты должны:

Знать основные фундаментальные явления и эффекты, теоретические работы и результаты экспериментальных исследований в области ионики твердого тела; основные методы исследования процессов ионного переноса в твердых телах; механизмы процессов переноса и методы их количественного описания в различных твердофазных системах.

Уметь выбирать методы исследования, модифицировать существующие и разрабатывать новые методы, исходя из задач конкретного исследования по выбранной теме в области ионики твердого тела; применять методы ионики твердого тела для решения современных проблем химии твердого тела.

Владеть навыками применения знаний о процессах ионного переноса для решения научно-исследовательских задач в области химии твердого тела; техникой экспериментальных исследований и методами обработки экспериментальных данных в области ионики твердого тела; навыками грамотной интерпретации процессов, происходящих в твердофазных электрохимических системах.

4. Объем, структура и содержание дисциплины.

4.1. Объем и структура дисциплины:

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

Таблица 4.1

Показатель объема дисциплины и вид деятельности		Семestr
		2
	Объем дисциплины в зачетных единицах	2
	Объем дисциплины в часах	72
	Всего занятий в контактной форме, час	
	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	Лекции, час.	Практические занятия (семинары), час	Самостоятельная работа	Консультации	Аттестация	Учебная деятельность
Введение. Предмет ионики твердого тела как науки о физико-химических и электрохимических процессах, протекающих в твердофазных системах. Основные классы твердых электролитов и функциональных материалов твердотельных электрохимических устройств.	2	-	4			Прослушивание лекций, осмысление учебной информации, ее обобщение и краткая запись. Своевременная доработка конспектов лекций.
Квазихимический подход для расчета концентрации точечных дефектов в кристаллах. Кристаллические веществами с высокой концентрацией дефектов, в т.ч. суперионные, соединения. Атомарные механизмы диффузионного переноса атомов и ионов в кристаллах. Механизмы ионного переноса в протонных проводниках и ориентационно-разупорядоченных фазах ионных соединений.	4	-	4	2		Прослушивание лекций. Подбор, изучение, анализ и конспектирование рекомендованной литературы.
Влияние различных факторов (температуры, давления, величины электрического поля) на транспортные свойства твердых веществ. Процессы химической диффузии и сопряженного переноса ионов и электронов в кристаллах. Уравнение Вагнера. Диффузионно-контролируемые химические процессы на границе раздела фаз. Равновесие дефектов и образование двойного электрического слоя на поверхности кристаллов и межзеренных границах. Процессы образования дефектов на межфазных границах и транспортные свойства композиционных твердых электролитов.	4	-	4	2		Прослушивание лекций. Подбор, изучение, анализ и конспектирование рекомендованной литературы.

Экспериментальные методы исследования транспортных свойств твердофазных систем. Измерение электропроводности. Методы потенциометрии и кондуктометрии. Экспериментальные методы исследования метастабильных твердофазных и аморфных состояний.	2	-	6	2		Прослушивание лекций. Подбор, изучение, анализ и конспектирование рекомендованной литературы.
Методы расчета и оценки коэффициентов диффузии по экспериментальным данным. Основы компьютерного моделирования процессов дефектообразования и ионного переноса в кристаллах.	4	-	4	2		Прослушивание лекций. Подбор, изучение, анализ и конспектирование рекомендованной литературы.
Дизелектрические свойства ионных кристаллов. Дизелектрическая релаксация этих систем. Практические применения твердых электролитов и других соединений с уникальными транспортными свойствами.	2	-	20	2		Написание реферата и его защита. Выяснение наиболее сложных, непонятных вопросов и их уточнение во время консультаций. Подготовка и сдача зачета.
				2		Зачет
Итого	18	-	42	10	2	

5. Самостоятельная работа обучающихся.

Темы для самостоятельного изучения	Количество часов	Формы самостоятельной работы	Методическое обеспечение	Формы отчетности
Дизелектрические свойства ионных кристаллов. Дизелектрическая релаксация этих систем. Практические применения твердых электролитов и других соединений с уникальными транспортными свойствами.	36	Реферирование литературы. Углубленный анализ научно-методической литературы.	Доступ к российским и международным реферативным базам данных.	Защита реферата

6. Образовательные технологии.

Преподавание дисциплины предусматривает следующие формы организации учебного процесса: лекции, самостоятельная работа аспиранта.

7. Фонд оценочных средств для проведения текущей и промежуточной аттестации по дисциплине.

7.1. Формы текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине.

Текущий контроль качества усвоения теоретического материала включает оценку ответов на вопросы устного группового опроса, организованного в ходе лекций. Текущий контроль освоения материала дисциплины для аспирантов проводится, в основном, по итогам выполнения заданий самостоятельной работы (подготовка и защита реферата).

Промежуточная аттестация по итогам освоения дисциплины проводится в виде зачета в форме устного собеседования. Шкала оценивания: «зачет-незачет». Перед зачетом проводится консультация.

7.2. Контролирующие материалы.

Примерный перечень вопросов для подготовки к зачету:

1. Предмет ионики твердого тела как науки о физико-химических и электрохимических процессах, протекающих в твердофазных системах.
2. Основные классы твердых электролитов и функциональных материалов твердотельных электрохимических устройств.
3. Квазихимический подход для расчета концентрации точечных дефектов в кристаллах.
4. Кристаллические веществами с высокой концентрацией дефектов, в т.ч. суперионные, соединения.
5. Атомарные механизмы диффузионного переноса атомов и ионов в кристаллах. Механизмы ионного переноса в протонных проводниках и ориентационно-разупорядоченных фазах ионных соединений.
6. Влияние различных факторов (температуры, давления, величины электрического поля) на транспортные свойства твердых веществ.
7. Процессы химической диффузии и сопряженного переноса ионов и электронов в кристаллах. Уравнение Вагнера.
8. Диффузионно-контролируемые химические процессы на границе раздела фаз. Равновесие дефектов и образование двойного электрического слоя на поверхности кристаллов и межзеренных границах.
9. Процессы образования дефектов на межфазных границах и транспортные свойства композиционных твердых электролитов.
10. Методы исследования транспортных свойств твердофазных систем. Измерение электропроводности. Методы потенциометрии и кондуктометрии.
11. Методы исследования метастабильных твердофазных и аморфных состояний.
12. Методы расчета и оценки коэффициентов диффузии по экспериментальным данным.
13. Основы компьютерного моделирования процессов дефектообразования и ионного переноса в кристаллах.
14. Диэлектрические свойства ионных кристаллов. Диэлектрическая релаксация этих систем.
15. Практические применения твердых электролитов и других соединений с уникальными транспортными свойствами.

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 наблюдаваться 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:

- Иванов-Шиц А.К., Мурин И.В. Ионика твердого тела. Т.1, 2. Санкт-Петербург: Изд-во СПбГУ, 2000.
- Уваров Н.Ф. Композиционные твердые электролиты. Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2008.

8.2. Дополнительная литература:

- Чеботин В.Н. Физическая химия твердого тела. М.: Химия, 1982.
- Чеботин В.Н. Химическая диффузия в твердых телах, М.: Наука, 1989.
- Вест А.Р. Химия твердого тела. Т.1, 2. Изд. Мир. М: 1988. Доступ: <http://booksonchemistry.com/index.php?id1=3&category=inorganic%20chemistry&author=vest-a&book=19881>
- Чеботин В.Н., Перфильев М.В. Электрохимия твердых электролитов. М.: Химия, 1978.
- Укше Е.А., Букун Н.Г. Твердые электролиты. М.: Наука. 1977.
- Solid State Electrochemistry I. Fundamentals, Materials and their Applications. (Ed. by Kharton V.V., 2009, WILEY-VCH, Weinheim), 500 p. ISBN: 978-3-527-32318-0. Доступ on-line: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/book/10.1002/9783527627868>
- CRC Handbook of Solid State Electrochemistry (Ed. by P.J. Gellings, H.J.M. Bouwmeester, 1997, CRC Press, USA) 618 р. Доступ: <https://www.crcpress.com/Handbook-of-Solid-State-Electrochemistry/Gellings-Bouwmeester/p/book/9780849389566>
- Ropp R.C. Solid State Chemistry, Elsevier Science, 2003, 460 р., eBook ISBN: 9780080541457. Доступ: <https://www.elsevier.com/books/solid-state-chemistry/ropp/978-0-444-51436-3>
- Perovskite Oxide for Solid Oxide Fuel Cells (Ed. by Ishihara T., 2009, Springer, e-ISBN 978-0-387-77708-5), 294 р. Доступ: <https://www.springer.com/gp/book/9780387777078>
- Moulson A. J., Herbert J. M. Electroceramics: Materials. Properties, Applications. (John Wiley & Sons Ltd, England). 576 р. Доступ: https://books.google.ru/books/about/Electroceramics.html?id=FbMfaqSgOxsC&redir_esc=y

8.3. Программное обеспечение и Интернет-ресурсы:

Программное обеспечение

- MS Windows 7.
- Офисный пакет LibreOffice.
- 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 научометрическая (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 научометрическая (библиометрическая) база данных Scopus (<https://www.scopus.com/search/form.uri?display=classic>);
- 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) - сайт, на котором расположены ссылки на открытые полнотекстовые научные журналы по всем темам и на всех языках;
- 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>.

9. Материально-техническое обеспечение дисциплины.

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

10. Язык преподавания.

Дисциплина преподается на русском языке.