

**Федеральное государственное автономное образовательное  
учреждение высшего образования  
«Московский физико-технический институт  
(государственный университет)»**



**«УТВЕРЖДАЮ»**

**Проректор по учебной работе  
и экономическому развитию**

\_\_\_\_\_ **Д.А. Зубцов**

**Рабочая программа дисциплины (модуля)**

**по дисциплине:** Химическая физика твердого состояния вещества  
**по направлению:** Прикладные математика и физика (магистратура)  
**профиль подготовки:** Химическая физика  
Факультет молекулярной и химической физики  
кафедра химической физики  
**курс:** 1  
**квалификация:** магистр

Семестры, формы промежуточной аттестации:

1(Осенний) - Дифференцированный зачет  
2(Весенний) - Экзамен

Аудиторных часов: 60 всего, в том числе:

лекции: 0 час.  
практические и семинарские занятия: 60 час.  
лабораторные занятия: 0 час.

Самостоятельная работа: 45 час.

Подготовка к экзамену: 30 час.

Всего часов: 135, всего зач. ед.: 3

**Программу составил:** А.Н. Стрелецкий, д-р хим. наук, профессор

**Программа обсуждена на заседании кафедры**

16 февраля 2016 г.

**СОГЛАСОВАНО:**

Заведующий кафедрой

А.А. Берлин

Начальник учебного управления

И.Р. Гарайшина

Декан факультета

В.М. Некипелов

## 1. Цели и задачи

### Цель дисциплины

Цель курса – освоение студентами фундаментальных знаний о строении и свойствах реальных кристаллов и стекол, начиная от энергии кристаллического поля, дефектной структуры реального твердого тела и многообразия форм теплового движения до ответной реакции твердых тел на интенсивные физические воздействия.

### Задачи дисциплины

- формирование базовых знаний в области химической физики реального твердого тела как дисциплины, интегрирующей общефизическую и общетеоретическую подготовку физиков и обеспечивающей технологические основы современных инновационных сфер деятельности;
- обучение студентов принципам учета дефектной структуры твердого тела, выявление роли дефектов различной природы и их влияния на различные физические и химические свойства реальных материалов;
- формирование подходов к выполнению исследований студентами в области химической физики в рамках выпускных работ на степень магистра.

## 2. Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы

Данная дисциплина относится к вариативной части образовательной программы.

Дисциплина «Химическая физика твердого состояния вещества» базируется на дисциплинах:

- Общая и неорганическая химия;
- Физические методы исследований;
- Физические методы исследований: лабораторный практикум;
- Введение в математический анализ;
- Вычислительная математика;
- Дифференциальные уравнения;
- Линейная алгебра;
- Основы химической физики;
- Теория вероятностей;
- Теория функций комплексного переменного;
- Уравнения математической физики;
- Общая физика: лабораторный практикум;
- Общая физика: термодинамика и молекулярная физика;
- Общая физика: оптика;
- Аналитическая геометрия;
- Основы химической физики: лабораторный практикум;
- Кратные интегралы и теория поля;
- Общая физика: механика;
- Общая физика: электричество и магнетизм;
- Многомерный анализ, интегралы и ряды;
- Гармонический анализ;
- Общая физика: квантовая физика.

Дисциплина «Химическая физика твердого состояния вещества» предшествует изучению дисциплин:

Научно-исследовательская работа.

### 3. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы

Освоение дисциплины направлено на формирование следующих общекультурных, общепрофессиональных и профессиональных компетенций:

способность к абстрактному мышлению, анализу, синтезу (ОК-1);

способность использовать на практике углубленные фундаментальные знания, полученные в области естественных и гуманитарных наук, и владением научным мировоззрением (ОПК-3);

способность самостоятельно и (или) в составе исследовательской группы разрабатывать, исследовать и применять математические модели для качественного и количественного описания явлений и процессов и (или) разработки новых технических средств (ПК-1).

#### В результате освоения дисциплины обучающиеся должны

##### знать:

- основные представления о кристаллической решетке и реальной дефектной структуре твердого тела, особенностях аморфного и наносостояния, о природе химической связи в твердом теле;
- основные представления о физической природе различных свойств твердого тела и определяющем влиянии на них различных факторов (кристаллическая решетка, дефекты, наносостояние, природа химической связи и пр.);
- особенности подвижности и реакционной способности в твердом состоянии, способы влияния на эти величины;
- порядки численных величин, характерных для различных свойств твердого состояния вещества.

##### уметь:

- выделять наиболее существенные физические факторы, влияющие на те или иные свойства;
- делать правильные выводы из сопоставления результатов теории и эксперимента;
- производить численные оценки по порядку величины;
- делать качественные выводы при переходе к предельным условиям в изучаемых проблемах;
- эффективно использовать информационные технологии и компьютерную технику для достижения необходимых теоретических и прикладных результатов.

##### владеть:

- навыками освоения большого объема информации;
- навыками самостоятельной работы в лаборатории;
- культурой постановки и моделирования физических задач;
- навыками планирования, постановкой и обработкой результатов физического эксперимента в области химической физики твердого состояния.

### 4. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий

#### 4.1. Разделы дисциплины (модуля) и трудоемкости по видам учебных занятий

№	Тема (раздел) дисциплины	Виды учебных занятий, включая самостоятельную работу				
		Лекции	Практические и семинарские занятия	Лаборат. работы	Задания, курсовые работы	Самост. работа
1	Введение		2			

2	Внутренняя энергия кристаллов.		6			
3	Деформации и напряжение в твердых телах.		9			
4	Иерархия структурных дефектов в кристаллах.		8			
5	Тепловое движение в твердых телах.		5			15
6	Аморфные твердые тела (стекла).		6			2
7	Диффузия в твердых телах		6			2
8	Заключение по курсу.		2			2
9	Нанокристаллы		4			2
10	Особенности кинетики химических реакций в твердых телах.		6			2
11	Твердые тела при интенсивных физических воздействиях.		6			20
Итого часов			60			45
Подготовка к экзамену		30 час.				
Общая трудоёмкость		135 час., 3 зач.ед.				

#### 4.2. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам)

Семестр: 1 (Осенний)

##### 1. Введение

Отличия твердых тел от газов и жидкостей. Физические, химические и физико-химические превращения в кристаллах и стеклах, вызванные действием тепла, света, ионизирующего излучения, механических напряжений. Изменения структуры и свойств твердого тела в этих превращениях. Взаимосвязь изменений атомной структуры с изменениями в электронной и фононной подсистемах кристаллов. Дефектная структура кристаллов. Фундаментальные и структурно-чувствительные свойства кристаллов

##### 2. Внутренняя энергия кристаллов.

Кристаллическая решетка, элементарная ячейка, принцип плотной упаковки. Потенциалы взаимодействия между атомами, молекулами, ионами. Расчеты энергии одноатомных кристаллов. Решеточная сумма и кристаллическое поле. Кристалл и молекула. Ионные кристаллы: энергия кристаллической решетки и ширина запрещенной зоны. Оценки энергии кристаллов на примерах аргона, алмаза, хлорида калия. Примеры расчетов.

##### 3. Деформации и напряжение в твердых телах.

Внутренние напряжения, их источники. Основные механические свойства: упругость, неупругость, пластичность, деформационное упрочнение и разрушение с позиций химической физики. Модуль и предел упругости. ИК -спектры деформированных межатомных связей. Неупругость в кристаллах и стеклах. Энтропийные эффекты. Спектры времен релаксации в полимерах. Дислокационная и недислокационная пластичность. Деформационное упрочнение. Эффект Холла-Петча. Теоретическая прочность. Прочность нанотрубок Трещина Гриффитса. Эффект Ребиндера. Долговременная прочность. Деформации при высоких давлениях. Изменения электронного строения и атомной структуры твердых тел при динамическом сжатии. Электрофизические явления при разрушении твердых тел и нарушении адгезионного контакта.

#### 4. Иерархия структурных дефектов в кристаллах.

Точечные, линейные, планарные дефекты. Равновесные и неравновесные дефекты, их происхождение.

А) Точечные дефекты. Термодинамика образования точечных дефектов: энтальпия и конфигурационная энтропия, уравнение Френкеля. Газ вакансий, его параметры. Точечные дефекты в одноатомных и бинарных кристаллах. Дефекты Френкеля и Шоттки. Ассоциация дефектов. Специфика точечных дефектов в интерметаллидах, полимерах и твердых телах с гомеоплярной связью. Точечные дефекты в ионных кристаллах. Электрически заряженные точечные дефекты. Оценки электронных уровней энергии F- и V- центров.

Б) Линейные дефекты Краевые и винтовые дислокации. Расчет энергии винтовой дислокации. Возникновение и размножение дислокаций по механизму Франка-Рида. Формы движения дислокаций: скольжение и переползание. Причины возникновения электрических зарядов на линии дислокации. Взаимодействие дислокаций с точечными дефектами. Объединение дислокаций в скопления. Дефекты упаковки и двойники.

В) Планарные дефекты: межзеренные границы и межфазная поверхность. Структура и энергия дислокационных границ между блоками мозаики, зависимость энергии от угла разориентировки блоков. Поверхность твердого тела, ее структура. Расчет поверхностной энергии и энергии поверхностных электронных состояний (уровни Тамма). Двойной электрический слой. Свойства твердых тел с развитой поверхностью. Методы исследования.

Г) Заключение. Взаимодействие между разными типами дефектов. Избыточная энергия кристалла с дефектами. Влияние дефектов на свойства кристаллов: реакционную способность, механические свойства, кинетику переноса массы, заряда, тепла

#### 5. Тепловое движение в твердых телах.

Многообразие форм теплового движения в одноатомных и сложных молекулярных кристаллах. Колебания атомов и вращение молекул в узлах кристаллической решетки. Структурные переходы. Пластические кристаллы. Жидкие кристаллы, их классификация в зависимости от форм подвижности. Спектры времен молекулярной подвижности в полимерах. Концепция свободного объема. Энтропия плавления. Теплоемкость, термическое расширение, теплопроводность.

### Семестр: 2 (Весенний)

#### 6. Аморфные твердые тела (стекла).

Классификация. Методы создания: закалка, конденсация и др. Особенности строения.

А) Ячеистый беспорядок. Энтропийный фактор. Ледовый беспорядок. Модель Изинга. Дальний и ближний порядок. Переходы порядок - беспорядок. Энтальпия перехода. Влияние упругих напряжений на переход.

Б) Топологический беспорядок. Образование стекол. Аморфные материалы. Структура и некоторые физические свойства аморфных материалов. Механические свойства. Модель Бернала, полиэдры Вороного моделирование методом молекулярной динамики. Аморфные металлические стекла, их получение и применение.

## 7. Диффузия в твердых телах

Основные механизмы диффузии в кристаллах. Частота перескоков. Выражение для коэффициента диффузии.

А) Самодиффузия. Коэффициент самодиффузии, оценки значений предэкспоненциального множителя и энергии активации самодиффузии. Корреляционный множитель. Газ вакансий и его свойства.

Б) Диффузия в поле внешних сил. Ионная электропроводность. Числа переноса. Безпороговая диффузионная ползучесть. Кинетика взаимной диффузии. Эффекты Френкеля и Киркендалла.

В) Диффузия по ускоренным путям – дислокационным трубкам, границам зерен, поверхности.

## 8. Заключение по курсу.

Влияние основных характеристик (кристаллическая решетка - реальная дефектная структура, кристалл -аморфное состояние, макроскопическое – нано состояние и теплового движения) на свойства, подвижность и реакционную способность твердых тел

## 9. Нанокристаллы

Множественность состояний наночастиц: кластеры, нанокристаллы, коллоиды, консолидированные наноматериалы. Роль поверхностных атомов и границ раздела в консолидированных наноматериалах. Методы определения размеров наночастиц. Термодинамика образования твердого кластера. Понижение температуры плавления. Изменение оптических свойств при переходе к наноразмерам. Квантовые ямы, проволоки точки.

Методы получения наноматериалов. Особенности дефектной структуры наноматериалов. Механические свойства нанокристаллов. Наноидентирование.

## 10. Особенности кинетики химических реакций в твердых телах.

Основные особенности кинетики химических реакций в твердых телах. Локальные, условные и средние концентрации. Температурный коэффициент и энергия активации. Туннельные эффекты для атомов и электрона.

А) Статические (мономолекулярные и квазимономолекулярные) реакции. Кинетическая неэквивалентность. Гиперболическое распределение по константам скорости. Приближение Рогинского-Алфрея. Различные механизмы перемешивания распределений. Сложные реакции.

Б) Диффузионно контролируемые реакции. Константа скорости: решения при граничных условиях Смолуховского (стационарный и нестационарный режимы) и Уейта (радиационные). Неопределенность в размере клетки. Химическая миграция свободно-радикальных состояний.

В) Топохимические процессы. Термодинамика (по Фольмеру) формирования новой фазы. Магические числа. Критический зародыш. Критическое пересыщение. Кинетика образования и роста зародышей, рост новой фазы. Спекание.

Г) Твердофазные превращения. Объемные превращения без изменения химического состава (аллотропические, мартенситные, упорядочение и разупорядочение твердого раствора). Химические превращения. Диффузионно –контролируемые реакции Модели Яндера, Антияндера, сокращающейся сферы, уравнение Аврамии-Колмогорова.

#### 11. Твердые тела при интенсивных физических воздействиях.

Нетепловые методы воздействия на кристаллическую структуру и создания метастабильных состояний. Представления о дозе подведенной энергии и энергетических выходах нетепловых превращений.

А) Основные механизмы создания структурных дефектов в кристаллах. 1) Бомбардировке кристаллов частицами с высокой энергией. Пороговая энергия. Первичный выбитый атом, роль его энергии. 2)- Безизлучательные распад возбужденных состояний при действии ионизирующего излучения на кристаллы. Миграция экситонов и связанные состояния в ионных кристаллах. 3) Ионно-молекулярные реакции в органических веществах (на примере углеводов) и создание свободных радикалов, их предельные концентрации и энергетические выходы. 4) - Распад и перегруппировка атомов в упруго-напряженных состояниях. Энергетические выходы механического разрыва межатомных связей, размножения дислокаций и распада ионных кристаллов при разрушении. Свободно-радикальные состояния в полимерах.

Б) Разупорядочение кристаллов. 1)- Химические превращения при воздействии ударных волн на вещество. Процессы активации веществ с различной природой межатомных связей. 2)Распад надмолекулярной структуры и свободно-радикальные процессы в полимерах и ковалентных кристаллах. Вторичные свободно-радикальные реакции. Предельные концентрации радикалов. Механизмы миграции свободной валентности. Реакционная способность боковых связей. 3) Особенности и глубина разложения ионных кристаллов. Короткоживущие состояния, их природа и реакционная способность.4)Разупорядочение кристаллической структуры металлов. Пластическое диспергирование: начальные выходы образования поверхности, предельные размеры микрокристаллических блоков.

В) Микроперемешивание и синтез в реакционных смесях.1) Радиационная ползучесть и деформационное перемешивание на атомном уровне. 2) Процессы в смесях твердых реагентов. Образование поверхности контакта и миграция атомов сквозь нее. Формирование новых кристаллических структур продуктов реакции. 3) Тепловое самоускорение химических реакций. Два источника производства тепла. Адиабатическая температура. Критические условия взрывного синтеза при интенсивных механических воздействиях на реакционные смеси.

### **5. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)**

Учебная аудитория, мультимедийное оборудование (проектор, звуковая система).

### **6. Перечень основной и дополнительной литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)**

Основная литература

1. А.Н. Орлов. Введение в теорию дефектов в кристаллах. М., Высш. школа, 1983.
2. Дж.Хирт,И.Лотте. Теория дислокаций. М., Атомиздат, 1972.
3. Я.Е.Гегузин. Физика спекания. М., Наука, 1984.
4. А.А. Чернов и др. Современная кристаллография, т.1-3. М., Наука, 3-х-томная коллективная монография. 1980.
5. Э.Д. Алукер и др. Быстропротекающие радиационно-стимулированные процессы в щелочно-галоидных кристаллах. Рига, Зинатне, 1987.
6. В.С.Бокштейн, С.З. Бокштейн, А.А Жуковицкий. Термодинамика и кинетика диффузии в твердых телах. М., Metallurgia, 1974 .
7. Ю.Д. Третьяков. Химия твердого тела. М. МГУ, 2002.
8. Дэвинсон, Дж. Левин. Поверхностные (таммовские) электронные состояния. М., Мир, 1973.
9. И.П.Суздалев. Физико-химия нанокластеров, наноструктур и наноматериалов. 2005

#### Дополнительная литература

1. Р.А.Андриевский, А.В.Рагуля. Наноструктурные материалы. Академия. 200 ?
2. Ю.И.Головин. Наноидентификация и мех. свойства твердых тел. ФТТ, 2008, №50(12), 2113
3. Р.Ф.Валиев Интенсивное пластическое деформирование 2009

### **7. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю)**

- 1.П.Ю.Бутягин. Химическая физика твердого тела. МГУ. 2006

### **8. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины**

Студент, изучающий дисциплину, должен с одной стороны, овладеть общим понятийным аппаратом, а с другой стороны, должен научиться применять теоретические знания на практике.

В результате изучения дисциплины студент должен знать основные определения дисциплины, уметь применять полученные знания для решения различных задач.

Успешное освоение курса требует:

- посещения всех занятий, предусмотренных учебным планом по дисциплине;
- ведения конспекта занятий;
- напряжённой самостоятельной работы студента.

Самостоятельная работа включает в себя:

- чтение рекомендованной литературы;
- проработку учебного материала, подготовку ответов на вопросы, предназначенных для самостоятельного изучения;
- решение задач, предлагаемых студентам на занятиях;
- подготовку к выполнению заданий текущей и промежуточной аттестации.

Показателем владения материалом служит умение без конспекта отвечать на вопросы по темам дисциплины.

Важно добиться понимания изучаемого материала, а не механического его запоминания. При затруднении изучения отдельных тем, вопросов, следует обращаться за консультациями преподавателю.

Возможен промежуточный контроль знаний студентов в виде решения задач в соответствии с тематикой занятий.

### **9. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации по итогам обучения**





**ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ  
ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ОБУЧАЮЩИХСЯ  
ПО ДИСЦИПЛИНЕ**

**по направлению:** Прикладные математика и физика (магистратура)  
**профиль подготовки:** Химическая физика  
Факультет молекулярной и химической физики  
кафедра химической физики  
**курс:** 1  
**квалификация:** магистр

Семестры, формы промежуточной аттестации:

1(Осенний) - Дифференцированный зачет  
2(Весенний) - Экзамен

**Разработчик:** А.Н. Стрелецкий, д-р хим. наук, профессор

## 1. Компетенции, формируемые в процессе изучения дисциплины

Освоение дисциплины направлено на формирование у обучающегося следующих общекультурных (ОК), общепрофессиональных (ОПК) и профессиональных (ПК) компетенций:

способность к абстрактному мышлению, анализу, синтезу (ОК-1);

способность использовать на практике углубленные фундаментальные знания, полученные в области естественных и гуманитарных наук, и владением научным мировоззрением (ОПК-3);

способность самостоятельно и (или) в составе исследовательской группы разрабатывать, исследовать и применять математические модели для качественного и количественного описания явлений и процессов и (или) разработки новых технических средств (ПК-1).

## 2. Показатели оценивания компетенций

В результате изучения дисциплины «Химическая физика твердого состояния вещества» обучающийся должен:

### знать:

- основные представления о кристаллической решетке и реальной дефектной структуре твердого тела, особенностях аморфного и наносостояния, о природе химической связи в твердом теле;
- основные представления о физической природе различных свойств твердого тела и определяющем влиянии на них различных факторов (кристаллическая решетка, дефекты, наносостояние, природа химической связи и пр.);
- особенности подвижности и реакционной способности в твердом состоянии, способы влияния на эти величины;
- порядки численных величин, характерных для различных свойств твердого состояния вещества.

### уметь:

- выделять наиболее существенные физические факторы, влияющие на те или иные свойства;
- делать правильные выводы из сопоставления результатов теории и эксперимента;
- производить численные оценки по порядку величины;
- делать качественные выводы при переходе к предельным условиям в изучаемых проблемах;
- эффективно использовать информационные технологии и компьютерную технику для достижения необходимых теоретических и прикладных результатов.

### владеть:

- навыками освоения большого объема информации;
- навыками самостоятельной работы в лаборатории;
- культурой постановки и моделирования физических задач;
- навыками планирования, постановкой и обработкой результатов физического эксперимента в области химической физики твердого состояния.

## 3. Перечень типовых контрольных заданий, используемых для оценки знаний, умений, навыков

Перечень контрольных вопросов для сдачи дифференцированного зачета в 1-ом семестре:

- 1) Кристаллическая решетка, элементарная ячейка, принцип плотной упаковки. Потенциалы взаимодействия между атомами, молекулами, ионами.

- 2) Расчеты энергии одноатомных кристаллов. Решеточная сумма и кристаллическое поле. Кристалл и молекула. Оценки энергии кристаллов аргона и алмаза.
- 3) Ионные кристаллы: энергия кристаллической решетки и ширина запрещенной зоны. Оценки энергии кристаллов хлорида калия.
- 4) Основные механические свойства: упругость, неупругость, пластичность, деформационное упрочнение и разрушение с позиций химической физики.
- 5) Модуль и предел упругости Расчет по порядку величины модуля упругости. ИК -спектры деформированных межатомных связей.
- 6) Неупругость в кристаллах и стеклах. Энтропийные эффекты. Спектры времен релаксации в полимерах.
- 7) Дислокационная и недислокационная пластичность.
- 8) Деформационное упрочнение. Эффект Холла-Петча.
- 9) Теоретическая прочность. Прочность нанотрубок Трещина Гриффитса. Эффект Ребиндера. Долговременная прочность.
- 10) Деформации при высоких давлениях. Изменения электронного строения и атомной структуры твердых тел при динамическом сжатии.
- 11) Многообразие форм теплового движения в одноатомных и сложных молекулярных кристаллах. Колебания атомов и вращение молекул в узлах кристаллической решетки. Структурные переходы.
- 12) Спектры времен молекулярной подвижности в полимерах. Концепция свободного объема. Энтропия плавления.
- 13) Теплоемкость твердых тел
- 14) Основные причины термического расширения твердых тел
- 15) Точечные, линейные, планарные дефекты. Равновесные и неравновесные дефекты, их происхождение
- 16) Термодинамика образования точечных дефектов: энтальпия и конфигурационная энтропия, уравнение Френкеля. Дефекты Френкеля и Шоттки. Газ вакансий, его параметры
- 17) Специфика точечных дефектов в интерметаллидах, полимерах и твердых телах с гомеоплярной связью.
- 18) Точечные дефекты в ионных кристаллах. Электрически заряженные точечные дефекты. Оценки электронных уровней энергии F- и V- центров
- 19) Краевые и винтовые дислокации. Расчет энергии винтовой дислокации.
- 20) Возникновение и размножение дислокаций по механизму Франка-Рида. Формы движения дислокаций: скольжение и реперползание.
- 21) Причины возникновения электрических зарядов на линии дислокации.
- 22) Взаимодействие дислокаций с точечными дефектами. Объединение дислокаций в скопления.
- 23) Дефекты упаковки и двойники.
- 24) Структура и энергия дислокационных границ между блоками мозаики, зависимость энергии от угла разориентировки блоков
- 25) Планарные дефекты: межзеренные границы и межфазная поверхность
- 26) Расчет поверхностной энергии и энергии поверхностных электронных состояний (уровни Тамма). Двойной электрический слой.

Перечень контрольных вопросов для сдачи экзамена во 2-ом семестре:

- 1) Множественность состояний наночастиц: кластеры, нанокристаллы, коллоиды, консолидированные наноматериалы. Роль поверхностных атомов и границ раздела в консолидированных наноматериалах.
- 2) Методы определения размеров наночастиц.
- 3) Термодинамика образования твердого кластера. Понижение температуры плавления.
- 4) Изменение оптических свойств при переходе к наноразмерам. Квантовые ямы, проволоки точки.

- 5) Методы получения наноматериалов. Особенности дефектной структуры наноматериалов.
- 6) Механические свойства нанокристаллов. Наноидентирование.
- 7) Классификация неупорядоченных твердых тел Методы создания: закалка, конденсация и др. Особенности строения.
- 8) Ячеистый беспорядок. Энтропийный фактор. Ледовый беспорядок.
- 9) Модель Изинга. Дальний и ближний порядок. Переходы порядок - беспорядок. Энтальпия перехода.
- 10) Влияние упругих напряжений на переход порядок-беспорядок.
- 11) Топологический беспорядок. Образование стекол. Аморфные материалы.
- 12) Структура, физические и механические свойства аморфных материалов.
- 13) Теоретическое моделирование аморфных материалов Модель Берналла, полиэдры Вороного.
- 14) Основные механизмы диффузии в кристаллах. Частота перескоков. Выражение для коэффициента диффузии.
- 15) Самодиффузия. Коэффициент самодиффузии, оценки значений предэкспоненциального множителя и энергии активации самодиффузии. Корреляционный множитель.
- 16) Газ вакансий и его свойства.
- 17) Диффузия в поле внешних сил. Ионная электропроводность. Числа переноса.
- 18) Безпороговая диффузионная ползучесть.
- 19) Кинетика взаимной диффузии. Эффекты Френкеля и Киркендалла.
- 20) Диффузия по ускоренным путям – дислокационным трубкам, границам зерен, поверхности.
- 21) Низкотемпературный предел скорости химической реакции. Туннельные эффекты для атомов и электрона.
- 22) Статические (мономолекулярные и квазимономолекулярные) реакции. Кинетическая неэквивалентность. Гиперболическое распределение по константам скорости. Приближение Рогинского-Алфрея.
- 23) Диффузионно контролируемые реакции. Константа скорости: решения при граничных условиях Смолуховского (стационарный и нестационарный режимы) и Уейта (радиационные).
- 24) Топохимические процессы. Термодинамика (по Фольмеру) формирования новой фазы. Магические числа. Критический зародыш. Критическое пересыщение.
- 25) Твердофазные превращения. Объемные превращения без изменения химического состава: аллотропические, мартенситные, упорядочение и разупорядочение твердого раствора.
- 26) Модели Яндера, Антияндера, сокращающейся сферы, уравнение Аврамии-Колмогорова.
- 27) Нетепловые методы воздействия на кристаллическую структуру и создания метастабильных состояний. Представления о дозе подведенной энергии и энергетических выходах нетепловых превращений.
- 28) Основные механизмы создания структурных дефектов в кристаллах.
- 29) Химические превращения при воздействии ударных волн на вещество.
- 30) Процессы активации веществ с различной природой межатомных связей.
- 31) Распад надмолекулярной структуры и свободно-радикальные процессы в полимерах и ковалентных кристаллах.
- 32) Вторичные свободно-радикальные реакции. Предельные концентрации радикалов. Механизмы миграции свободной валентности. Реакционная способность боковых связей.
- 33) Особенности и глубина разложения ионных кристаллов.
- 34) Короткоживущие состояния, их природа и реакционная способность.
- 35) Разупорядочение кристаллической структуры металлов. Пластическое диспергирование: начальные выходы образования поверхности, предельные размеры микрокристаллических блоков.
- 36) Микроперемешивание и синтез в реакционных смесях. Радиационная ползучесть и деформационное перемешивание на атомном уровне.
- 37) Процессы в смесях твердых реагентов. Образование поверхности контакта и миграция атомов сквозь нее. Формирование новых кристаллических структур продуктов реакции.

38) Тепловое самоускорение химических реакций. Два источника производства тепла. Адиабатическая температура. Критические условия взрывного синтеза при интенсивных механических воздействиях на реакционные смеси

#### **4. Критерии оценивания**

Оценка отлично 10 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины, проявляющему интерес к данной предметной области, продемонстрировавшему умение уверенно и творчески применять их на практике при решении конкретных задач, свободное и правильное обоснование принятых решений.

Оценка отлично 9 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины и умение уверенно применять их на практике при решении конкретных задач, свободное и правильное обоснование принятых решений.

Оценка отлично 8 баллов - выставляется студенту, показавшему всесторонние, систематизированные, глубокие знания учебной программы дисциплины и умение уверенно применять их на практике при решении конкретных задач, правильное обоснование принятых решений, с некоторыми недочетами.

Оценка хорошо 7 баллов - выставляется студенту, если он твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но недостаточно грамотно обосновывает полученные результаты.

Оценка хорошо 6 баллов - выставляется студенту, если он твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но допускает в ответе или в решении задач некоторые неточности.

Оценка хорошо 5 баллов - выставляется студенту, если он в основном знает материал, грамотно и по существу излагает его, умеет применять полученные знания на практике, но допускает в ответе или в решении задач достаточно большое количество неточностей.

Оценка удовлетворительно 4 бала - выставляется студенту, показавшему фрагментарный, разрозненный характер знаний, недостаточно правильные формулировки базовых понятий, нарушения логической последовательности в изложении программного материала, но при этом он освоил основные разделы учебной программы, необходимые для дальнейшего обучения, и может применять полученные знания по образцу в стандартной ситуации.

Оценка удовлетворительно 3 бала - выставляется студенту, показавшему фрагментарный, разрозненный характер знаний, допускающему ошибки в формулировках базовых понятий, нарушения логической последовательности в изложении программного материала, слабо владеет основными разделами учебной программы, необходимыми для дальнейшего обучения и с трудом применяет полученные знания даже в стандартной ситуации.

Оценка неудовлетворительно 2 бала - выставляется студенту, который не знает большей части основного содержания учебной программы дисциплины, допускает грубые ошибки в формулировках основных принципов и не умеет использовать полученные знания при решении типовых задач.

Оценка неудовлетворительно 1 бал - выставляется студенту, который не знает основного содержания учебной программы дисциплины, допускает грубейшие ошибки в формулировках базовых понятий дисциплины и вообще не имеет навыков решения типовых практических задач.

#### **5. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности**

При проведении устного экзамена и дифференцированного зачета, обучающемуся предоставляется 30 минут на подготовку. Опрос обучающегося по билету на устном экзамене не должен превышать одного астрономического часа.