

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

УТВЕРЖДЕНО

**Директор физтех-школы
электроники, фотоники и
молекулярной физики**

В.В. Иванов

| | |
|----------------------------|---|
| | Рабочая программа дисциплины (модуля) |
| по дисциплине: | Химия твердого тела |
| по направлению: | Материаловедение и технологии материалов |
| профиль подготовки: | Перспективные функциональные материалы Физтех-школа Электроники, Фотоники и Молекулярной Физики кафедра нанометрологии и наноматериалов |
| курс: | 1 |
| квалификация: | магистр |

Семестр, формы промежуточной аттестации: 1 (осенний) - Экзамен

Аудиторных часов: 30 всего, в том числе:

лекции: 15 час.

семинары: 15 час.

лабораторные занятия: 0 час.

Самостоятельная работа: 30 час.

Подготовка к экзамену: 30 час.

Всего часов: 90, всего зач. ед.: 2

Программу составил: С.А. Зайцев, канд. физ.-мат. наук

Программа обсуждена на заседании кафедры нанометрологии и наноматериалов 29.05.2020

Аннотация

Курс "Химия твердого тела" предусматривает изучение основ современной химии твердого тела.

Задачи курса:

- Знакомство с современной кристаллохимией и теорией химической связи
- Постановка практических навыков оценки стабильности основных структурных типов
- Обсуждение взаимосвязи «структура-свойства» и основ кристаллохимического дизайна.

По результатам освоения курса студент должен:

Знать:

Теоретические основы кристаллохимии и современные модели химической связи.

Уметь:

Предсказывать возможность существования и относительную устойчивость соединений с наиболее распространенными структурными типами; планировать процедуру синтеза соединений.

Владеть:

Методами оценки относительной устойчивости и направлений искажения структурных типов.

Основное содержание курса изложено в следующих разделах:

1. Основы кристаллохимии
2. Современные представления о химической связи
3. Стабилизация и искажения структурных типов.
4. Взаимосвязь «структура-свойства».
5. Дисперсность и структурная химия.
6. Экспериментальная химия твердого тела.

1. Цели и задачи

Цель дисциплины

- изучение основ современной химии твердого тела.

Задачи дисциплины

- знакомство с современной кристаллохимией и теорией химической связи;
- постановка практических навыков оценки стабильности основных структурных типов;
- обсуждение взаимосвязи «структура-свойства» и основ кристаллохимического дизайна.

2. Перечень формируемых компетенций

Освоение дисциплины направлено на формирование следующих компетенций:

| Код и наименование компетенции | Индикаторы достижения компетенции |
|---|--|
| ПК-1 Способен ставить, формализовывать и решать задачи, в том числе разрабатывать и исследовать математические модели изучаемых явлений и процессов, системно анализировать научные проблемы, получать новые научные результаты | ПК-1.1 Способен находить, анализировать и обобщать информацию об актуальных результатах исследований |
| | ПК-1.2 Способен выдвигать гипотезы, строить математические модели для описания изучаемых явлений и процессов, оценивать качество разработанной модели |
| | ПК-1.3 Способен применять теоретические и (или) экспериментальные методы исследований к конкретной научной задаче и интерпретировать полученные результаты |

3. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю)

В результате освоения дисциплины обучающиеся должны

знать:

- теоретические основы кристаллохимии и современные модели химической связи.

уметь:

- предсказывать возможность существования и относительную устойчивость соединений с наиболее распространенными структурными типами; планировать процедуру синтеза соединений.

владеть:

- методами оценки относительной устойчивости и направлений искажения структурных типов.

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 | Трудоемкость по видам учебных занятий, включая самостоятельную работу, час. | | | |
|-----------------------|--|---|----------|-----------------|----------------|
| | | Лекции | Семинары | Лаборат. работы | Самост. работа |
| 1 | Основы кристаллохимии | 2 | 2 | | 4 |
| 2 | Современные представления о химической связи | 4 | 4 | | 8 |
| 3 | Стабилизация и искажения структурных типов | 4 | 4 | | 8 |
| 4 | Взаимосвязь «структура-свойства» | 2 | 2 | | 4 |
| 5 | Дисперсность и структурная химия | 2 | 2 | | 4 |
| 6 | Экспериментальная химия твердого тела | 1 | 1 | | 2 |
| Итого часов | | 15 | 15 | | 30 |
| Подготовка к экзамену | | 30 час. | | | |
| Общая трудоёмкость | | 90 час., 2 зач.ед. | | | |

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

Семестр: 1 (Осенний)

1. Основы кристаллохимии

Первые модели строения кристаллов. Модель шаровых упаковок. Плотнейшие шаровые упаковки в трехмерном пространстве. Пустоты в шаровых упаковках, их взаимное расположение и размеры.

Размерные модели в кристаллохимии. Атомные и ионные радиусы. Система радиусов Шеннона-Прюитта. Понятие координационного числа. Основные координационные полиэдры. Модель Гиллеспи. Теория кристаллического поля: взаимосвязь координационного окружения и электронной конфигурации центрального атома для d-металлов.

Основные структурные типы плотноупакованных структур. Структурные типы металлов, структурные типы ионных соединений. Типы NaCl, CaF₂. Структурные типы с вакансиями: пироксид, CdI₂. Структурный тип ReO₃, структурный тип перовскита. Искажения структурных типов (на примере типа CaF₂ и перовскита). Энергия кристаллической решетки и движущие силы структурных искажений для ионных структур.

2. Современные представления о химической связи

Формирование химической связи. Металлическая, ковалентная и ионная связь. Направленное и ненаправленное взаимодействия. Электронная структура твердого тела: формулирование задачи, исследование симметрии (теорема Блоха), краевые условия и множество k -векторов в зоне Бриллюэна. Современные подходы в квантовой химии твердого тела. Метод функционала плотности.

Топологические методы в описании химической связи: метод Бейдера, метод ELF/ELI. Методы обратного пространства (COOP, CONP). Полная энергия кристалла как $H(0)$. Поверхность потенциальной энергии кристалла. Колебания кристаллической решетки: симметрия задачи, фононный спектр твердого тела.

3. Стабилизация и искажения структурных типов

Стабилизация структуры как достижение минимума на ППЭ. Термодинамическая стабильность структуры. Формирование твердых растворов, энтропийный вклад. Переходы «порядок-беспорядок», теория фазовых переходов Лифшица. Стабилизация модулированных структур.

Понижение симметрии и электронный вклад. Фазы Юм-Розери. Фазы с преимущественно ковалентным взаимодействием: фазы Цинтля, молекулярные кристаллы. Ван-дер-Ваальсовы взаимодействия. Размерность блоков, структуры срастания (на примере фаз Раддлсдена-Поппера, фаз Ауривиллиуса).

4. Взаимосвязь «структура-свойства»

Факторы, обуславливающие влияние структуры на свойства. Электронная конфигурация d -металлов. Понижение симметрии и ферроэлектрики. Некоторые аспекты взаимосвязи магнитных свойств веществ и их структуры. Химическое давление. Основные принципы структурного дизайна.

5. Дисперсность и структурная химия

Вклад поверхности в свободную энергию. Стабилизация полиморфных модификаций в дисперсных системах. Некоторые аспекты взаимосвязи размеров частиц и свойств материалов (обзор). Тонкие пленки как системы со значительным вкладом поверхностной энергии.

6. Экспериментальная химия твердого тела

Фазовые диаграммы двух- и трехкомпонентных систем. Планирование синтеза на основе данных фазовых диаграмм. Использование ДТА при планировании синтеза. Методы синтеза метастабильных фаз (мягкая химия, ВД-синтез, высокоэнергетические методы – MW, SPS).

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

учебная аудитория, оснащенная компьютером и мультимедийным оборудованием (проектор, звуковая система).

6. Перечень рекомендуемой литературы

Основная литература

1. Химическая физика твердого тела [Текст] : учебник для вузов по направлению "Химия, физика и механика материалов" / П. Ю. Бутягин .— М. : Изд-во МГУ, 2006 .— 272 с.
2. А. Вест Химия твёрдого тела.
3. Шрайвер Д., Эткинс П. Неорганическая химия.

Дополнительная литература

1. Курс физической химии [Текст] : в 2 т. Т. 2 : учеб. пособие для вузов / под общ. ред. Я. И. Герасимова .— М. : Химия, 1973 .— 623 с.
2. Анималу А. Квантовая теория кристаллических твердых тел.

7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимых для освоения дисциплины (модуля)

1. <http://www.elsevier.com>
2. <http://www.elibrary.ru>
3. <http://www.books.google.ru>

8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю), включая перечень необходимого программного обеспечения и информационных справочных систем (при необходимости)

на лекционных и семинарских занятиях используются мультимедийные технологии, включая демонстрацию презентаций.

9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)

Студент, прослушавший курс лекций и семинаров, должен овладеть общим понятийным аппаратом и научиться применять теоретические знания на практике.

Успешное освоение курса требует:

- 1) посещения всех лекций и семинаров, предусмотренных учебным планом; ведение конспектов занятий; активное участие в обсуждении лекций и семинаров;
- 2) важно добиться понимания изучаемого материала, а не механического его запоминания. При затруднении изучения отдельных тем, вопросов, следует обращаться за консультацией к преподавателю на лекции или к докладчику на семинаре.

ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ПО ДИСЦИПЛИНЕ (МОДУЛЮ)

| | |
|--|---|
| по направлению: | Материаловедение и технологии материалов |
| профиль подготовки: | Перспективные функциональные материалы Физтех-школа Электроники, Фотоники и Молекулярной Физики кафедра нанометрологии и наноматериалов |
| курс: | <u>1</u> |
| квалификация: | магистр |
| Семестр, формы промежуточной аттестации: 1 (осенний) - Экзамен | |
| Разработчик: | С.А. Зайцев, канд. физ.-мат. наук |

1. Компетенции, формируемые в процессе изучения дисциплины

| Код и наименование компетенции | Индикаторы достижения компетенции |
|---|--|
| ПК-1 Способен ставить, формализовывать и решать задачи, в том числе разрабатывать и исследовать математические модели изучаемых явлений и процессов, системно анализировать научные проблемы, получать новые научные результаты | ПК-1.1 Способен находить, анализировать и обобщать информацию об актуальных результатах исследований |
| | ПК-1.2 Способен выдвигать гипотезы, строить математические модели для описания изучаемых явлений и процессов, оценивать качество разработанной модели |
| | ПК-1.3 Способен применять теоретические и (или) экспериментальные методы исследований к конкретной научной задаче и интерпретировать полученные результаты |

2. Показатели оценивания компетенций

В результате изучения дисциплины «Химия твердого тела» обучающийся должен:

знать:

- теоретические основы кристаллохимии и современные модели химической связи.

уметь:

- предсказывать возможность существования и относительную устойчивость соединений с наиболее распространенными структурными типами; планировать процедуру синтеза соединений.

владеть:

- методами оценки относительной устойчивости и направлений искажения структурных типов.

3. Перечень типовых (примерных) вопросов, заданий, тем для подготовки к текущему контролю

С целью контроля освоения обучающимися учебного материала проводится устный опрос в начале занятия по теме прошлой лекции или в конце занятия по пройденной теме.

4. Перечень типовых (примерных) вопросов и тем для проведения промежуточной аттестации обучающихся

Вопросы к экзамену:

1. Основы кристаллохимии.
2. Современные представления о химической связи.
3. Стабилизация и искажения структурных типов.
4. Взаимосвязь «структура-свойства».
5. Дисперсность и структурная химия.
6. Экспериментальная химия твердого тела.

Пример экзаменационных билетов.

Пример 1.

1. Основы кристаллохимии.
2. Современные представления о химической связи.

Пример 2.

1. Дисперсность и структурная химия.
2. Экспериментальная химия твердого тела.

Критерии оценивания

10 баллов — (ПРЕВОСХОДНО):

- систематизированные, глубокие и полные знания по всем разделам учебной программы, а также по основным вопросам, выходящим за ее пределы;
- точное использование научной терминологии (в том числе на иностранном языке), стилистически грамотное, логически правильное изложение ответа на вопросы;
- безупречное владение инструментарием учебной дисциплины, умение его эффективно использовать в постановке и решении научных и профессиональных задач;
- выраженная способность самостоятельно и творчески решать сложные проблемы в нестандартной ситуации;
- полное и глубокое усвоение основной и дополнительной литературы, рекомендованной учебной программой дисциплины;
- умение ориентироваться в теориях, концепциях и направлениях по изучаемой дисциплине и давать им критическую оценку, использовать научные достижения других дисциплин;
- творческая самостоятельная работа на практических, лабораторных занятиях, активное участие в групповых обсуждениях, высокий уровень культуры исполнения заданий.

9 баллов — (ОТЛИЧНО):

- систематизированные, глубокие и полные знания по всем разделам учебной программы;
- точное использование научной терминологии (в том числе на иностранном языке), стилистически грамотное, логически правильное изложение ответа на вопросы;
- владение инструментарием учебной дисциплины, умение его эффективно использовать в постановке и решении научных и профессиональных задач;
- способность самостоятельно и творчески решать сложные проблемы в нестандартной ситуации в рамках учебной программы, полное усвоение основной и дополнительной литературы, рекомендованной учебной программой дисциплины;
- умение ориентироваться в основных теориях, концепциях и направлениях по изучаемой дисциплине и давать им критическую оценку;
- самостоятельная работа на практических, лабораторных занятиях, творческое участие в групповых обсуждениях, высокий уровень культуры исполнения заданий.

8 баллов — (ПОЧТИ ОТЛИЧНО):

- систематизированные, глубокие и полные знания по всем поставленным вопросам в объеме учебной программы;
- использование научной терминологии, стилистически грамотное, логически правильное изложение ответа на вопросы, умение делать обоснованные выводы;
- владение инструментарием учебной дисциплины (методами комплексного анализа, техникой информационных технологий), умение его использовать в постановке и решении научных и профессиональных задач; способность самостоятельно решать сложные проблемы в рамках учебной программы;
- усвоение основной и дополнительной литературы, рекомендованной учебной программой дисциплины;
- умение ориентироваться в основных теориях, концепциях и направлениях по изучаемой дисциплине и давать им критическую оценку с позиций государственной идеологии (по дисциплинам социально-гуманитарного цикла);
- активная самостоятельная работа на практических, лабораторных занятиях, систематическое участие в групповых обсуждениях, высокий уровень культуры исполнения заданий.

7 баллов — (ОЧЕНЬ ХОРОШО):

- систематизированные, глубокие и полные знания по всем разделам учебной программы;
- использование научной терминологии (в том числе на иностранном языке), лингвистически и логически правильное изложение ответа на вопросы, умение делать обоснованные выводы;
- владение инструментарием учебной дисциплины, умение его использовать в постановке и решении научных и профессиональных задач;
- усвоение основной и дополнительной литературы, рекомендованной учебной программой дисциплины;
- умение ориентироваться в основных теориях, концепциях и направлениях по изучаемой дисциплине и давать им критическую оценку;
- самостоятельная работа на практических, лабораторных занятиях, участие в групповых обсуждениях, высокий уровень культуры исполнения заданий.

6 баллов — (ХОРОШО):

- достаточно полные и систематизированные знания в объеме учебной программы;

- использование необходимой научной терминологии, стилистически грамотное, логически правильное изложение ответа на вопросы, умение делать обоснованные выводы;
- владение инструментарием учебной дисциплины, умение его использовать в решении учебных и профессиональных задач; способность самостоятельно применять типовые решения в рамках учебной программы;
- усвоение основной литературы, рекомендованной учебной программой дисциплины;
- умение ориентироваться в базовых теориях, концепциях и направлениях по изучаемой дисциплине и давать им сравнительную оценку; активная самостоятельная работа на практических, лабораторных занятиях, периодическое участие в групповых обсуждениях, высокий уровень культуры исполнения заданий.

5 баллов — (ПОЧТИ ХОРОШО):

- достаточные знания в объеме учебной программы;
- использование научной терминологии, стилистически грамотное, логически правильное изложение ответа на вопросы, умение делать выводы;
- владение инструментарием учебной дисциплины, умение его использовать в решении учебных и профессиональных задач;
- способность самостоятельно применять типовые решения в рамках учебной программы;
- усвоение основной литературы, рекомендованной учебной программой дисциплины;
- умение ориентироваться в базовых теориях, концепциях и направлениях по изучаемой дисциплине и давать им сравнительную оценку;
- самостоятельная работа на практических, лабораторных занятиях, участие в групповых обсуждениях, высокий уровень культуры исполнения заданий.

4 балла — (УДОВЛЕТВОРИТЕЛЬНО), ЗАЧТЕНО:

- достаточный объем знаний в рамках образовательного стандарта;
- усвоение основной литературы, рекомендованной учебной программой дисциплины;
- использование научной терминологии, стилистическое и логическое изложение ответа на вопросы, умение делать выводы без существенных ошибок;
- владение инструментарием учебной дисциплины, умение его использовать в решении стандартных (типовых) задач;
- умение под руководством преподавателя решать стандартные (типовые) задачи;
- умение ориентироваться в основных теориях, концепциях и направлениях по изучаемой дисциплине и давать им оценку;
- работа под руководством преподавателя на практических, лабораторных занятиях, допустимый уровень культуры исполнения заданий.

3 балла — (НЕУДОВЛЕТВОРИТЕЛЬНО), НЕЗАЧТЕНО:

- недостаточно полный объем знаний в рамках образовательного стандарта;
- знание части основной литературы, рекомендованной учебной программой дисциплины;
- использование научной терминологии, изложение ответа на вопросы с существенными лингвистическими и логическими ошибками;
- слабое владение инструментарием учебной дисциплины, некомпетентность в решении стандартных (типовых) задач;
- неумение ориентироваться в основных теориях, концепциях и направлениях изучаемой дисциплины;
- пассивность на практических и лабораторных занятиях, низкий уровень культуры исполнения заданий.

2 балла — (НЕУДОВЛЕТВОРИТЕЛЬНО):

- фрагментарные знания в рамках образовательного стандарта;
- знания отдельных литературных источников, рекомендованных учебной программой дисциплины;
- неумение использовать научную терминологию дисциплины, наличие в ответе грубых стилистических и логических ошибок;
- пассивность на практических и лабораторных занятиях, низкий уровень культуры исполнения заданий.

1 балл — (НЕУДОВЛЕТВОРИТЕЛЬНО):

- отсутствие знаний и компетенций в рамках образовательного стандарта или отказ от ответа.

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

При проведении экзамена обучающемуся предоставляется до 60 минут на подготовку. Опрос обучающегося по билету не должен превышать двух астрономических часов в устной и (или) письменной форме.