

федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования "Первый Санкт-Петербургский государственный медицинский университет имени академика И. П. Павлова" Министерства здравоохранения Российской Федерации

УТВЕРЖДАЮ
Председатель Методического Совета
ФГБОУ ВО ПСПбГМУ им. И.П. Павлова

_____ профессор А. И. Ярёмко

« _____ » _____ 2023 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

ХИМИЯ ТВЁРДОГО ТЕЛА

Направленность подготовки – научная специальность 1.4.15 Химия твёрдого тела

Форма обучения — очная (4 года)

Санкт-Петербург
2023

Рабочая программа составлена в соответствии с федеральными государственными требованиями (ФГТ) к структуре программ подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре, условиям их реализации, срокам освоения этих программ с учётом различных форм обучения, образовательных технологий и особенностей отдельных категорий аспирантов (утв. Пр. Минобрнауки России от 20.10.2021 г. № 951; учебным планом по научной специальности 1.4.15 Химия твёрдого тела; с учётом программы кандидатского экзамена по научной специальности 1.4.15 Химия твёрдого тела и паспорта научной специальности 1.4.15 Химия твёрдого тела, разработанного экспертным советом ВАК.

Составители:

д. х. н., доцент, зав. кафедрой общей и биоорганической химии К. Н. Семёнов; д. б. н., доцент, профессор кафедры общей и биоорганической химии В. В. Шаройко, д. х. н., профессор кафедры общей и биоорганической химии Е. А. Попова

Рабочая программа обсуждена и одобрена на заседании кафедры общей и биоорганической химии «21» сентября 2022 года, протокол № 2

Заведующий кафедрой д. х. н., доцент К. Н. Семёнов _____

Рабочая программа одобрена
на заседании Учёного совета лечебного факультета
протокол № ____ от _____ 2022 года.

Председатель Учёного совета лечебного факультета
профессор Т. Д. Власов _____

СОГЛАСОВАНО:

Проректор по послевузовскому образованию К. С. Клюковкин _____

Декан факультета послевузовского образования Н. Л. Шапорова _____

СОДЕРЖАНИЕ

	стр.
1. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ	4
2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ООП	4
3. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ 3.1. Объем дисциплины и виды учебной работы 3.2. Тематический план дисциплины 3.3. Содержание разделов дисциплины 3.4. Лекции 3.5. Практические занятия (семинары) 3.6. Самостоятельная работа	4
4. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ 4.1. Текущий контроль успеваемости и промежуточная аттестация по результатам освоения дисциплины 4.2. Критерии оценки качества знаний аспирантов 4.3. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и опыта деятельности, характеризующих этапы формирования знаний, умений, навыков и опыта деятельности	13
5. ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ОБУЧЕНИЯ Литература для самоподготовки	17

1. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Цель: формирование у аспиранта углублённых знаний в области химии твёрдого тела, необходимых для подготовки диссертации на соискание учёной степени кандидата наук, и профессиональной научной и научно-педагогической деятельности.

Задачи:

- 1) знать фундаментальные основы разделов химии твёрдого тела, актуальные направления исследований в области химии твёрдого тела;
- 2) владеть глубокими знаниями в различных областях химии твёрдого тела в рамках программы кандидатского экзамена по специальности;
- 3) иметь навык анализа учебной и научной литературы, касающейся различных научно-образовательных проблем современной химии твёрдого тела, включая также междисциплинарные задачи;
- 4) уметь письменно и устно излагать результаты экспериментальной/расчётной и теоретической частей своей научно-исследовательской работы.

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ООП

Дисциплина «Химия твёрдого тела» относится к обязательным дисциплинам образовательного компонента ООП, в том числе направленной на подготовку к сдаче кандидатского экзамена.

Требования к предварительной подготовке:

Дисциплина базируется на знаниях, умениях и компетенциях, полученных обучающимся в процессе обучения в высшем учебном заведении, в соответствии с федеральными государственными образовательными стандартами высшего образования по программам специалитета и магистратуры химического профиля.

Знания и навыки, полученные аспирантами при изучении данной дисциплины, необходимы для подготовки и защиты диссертации по 1.4.15 «Химия твёрдого тела»; при подготовке к преподавательской деятельности по дисциплине «Химия твёрдого тела»

3. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

3.1 Объем дисциплины и виды учебной работы

По учебному плану подготовки аспирантов трудоёмкость учебной нагрузки обучающегося при освоении данной дисциплины составляет:

Всего - 4 зет/144 часа, в том числе:

аудиторная/самостоятельная - 25%/75%

обязательная аудиторная учебная нагрузка аспиранта - 1 зет/36 часов;

самостоятельная работа аспиранта - 3 зет/108 часов.

<i>Вид учебной работы</i>	<i>Трудоёмкость</i>	
	<i>зет</i>	<i>часов</i>
Аудиторная учебная нагрузка (Ауд) в том числе:	1	36
Лекции (Л)		6
Семинары		30
Внеаудиторная самостоятельная работа (СР)	3	108

Форма контроля - кандидатский экзамен		
---------------------------------------	--	--

3.2. Тематический план дисциплины

Наименование разделов и тем дисциплины	Всего, часов	Аудиторная работа		Внеаудиторная работа (СР)
		Л	Семинары	
Раздел 1				
Тема 1.1. Основные положения и понятия химии твёрдого тела		2	10	36
Раздел 2				
Тема 2.1. Методы синтеза и химические реакции твёрдых веществ		2	10	36
Раздел 3				
Тема 3.1. Твердофазные материалы		2	10	36
ИТОГО:	144	6	30	108

3.3 Содержание разделов дисциплины

Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела	Формы текущего контроля успеваемости
Раздел 1		зачёт
Тема 1.1 Основные положения и понятия химии твёрдого тела	<p>Специфика химии твёрдого состояния как раздела химической науки. Общие отличия строения и свойств твёрдых веществ от газов и жидкостей. Классификация твёрдых веществ.</p> <p>Кристаллические твёрдые тела. Монокристаллическое, поликристаллическое и нанокристаллическое состояния твёрдых веществ. Однофазные и гетерофазные кристаллические тела.</p> <p>Аморфные твёрдые вещества. Стекла. Некристаллические наночастицы. Микро и мезопористые твёрдые тела. Жидкие кристаллы. Значение химии твёрдого состояния для материаловедения и химической технологии.</p> <p>Строение кристаллических твёрдых веществ. Понятие о симметрии кристаллической решётки. Кристаллографические пространственные группы симметрии. Выбор и типы элементарных ячеек.</p> <p>Молекулярные кристаллы. Кристаллы с ионными и ковалентными решётками. Правила Полинга. Металлы и сплавы. Интерметаллические соединения. Кристаллы с участием водородных и ван-дер-ваальсовых связей. Супрамолекулярные образования. Координационные числа.</p> <p>Способы организации структур. Структуры с гексагональной и кубической плотнейшими упаковками. Тетрагональная упаковка. Дефекты</p>	

упаковок, политипизм. Полиэдрическое описание кристаллических структур. Изоморфизм, изоморфная ёмкость.

Некоторые наиболее распространённые структурные типы. Структуры каменной соли (NaCl) и хлорида цезия (CsCl) ГЦК и ОЦК, 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).

Соединения со слоистой структурой. Общие сведения о структурах силикатов и алюмосиликатов. Соединения внедрения и клатраты. Органические кристаллические структуры.

Твёрдые растворы замещения, внедрения и вычитания. Изовалентное и гетеровалентное замещение. Нестехиометричные соединения.

Структура аморфных твёрдых тел. Функция радиального распределения. Нерегулярные плотнейшие упаковки. Описание аморфных структур в полиэдрах. Кластерная модель. Стеклообразное состояние вещества. Факторы, влияющие на стеклообразование. Кинетическая природа стеклообразования. Ближний порядок. Структурные единицы. Топология сочленения структурных единиц на примере кварцевого стекла.

Структура квазикристаллов. Несоразмерные структуры. Структура жидких кристаллов.

Типы химической связи в твёрдом теле. Ван-дер-ваальсово взаимодействие в молекулярных кристаллах, клатраты. Ионная модель строения кристаллов, константа Моделунга, энергия ионной решётки. Цикл Борна-Габера и термохимические расчёты.

Основы теорий кристаллического поля и поля лигандов применительно к твёрдым телам. Влияние d-электронов. Энергия стабилизации кристаллическим полем и катионное распределение. Эффект Яна-Теллера. Сравнение тетраэдрического и октаэдрического окружений. Эффект неподелённых электронных пар.

Зонная структура кристаллов. Образование зон в результате перекрывания орбиталей. Уровень Ферми. Химический потенциал. Заселённость зон, её влияние на электрофизические свойства кристаллов. Валентная зона, запрещённая зона, зона проводимости.

Металлы и диэлектрики. Собственные и примесные полупроводники. Электронная и дырочная проводимость. Общие представления о методах расчёта зонной структуры кристаллов. Границы применимости зонной модели.

Цепочечные структуры и одномерная проводимость. Двумерные проводники и интеркаляты. Пайерлсовское искажение.

	<p>Слабые невалентные взаимодействия в твёрдых супрамолекулярных образованиях. Наноструктуры, объёмные кластеры.</p> <p>Совершенные и несовершенные кристаллы. Типы дефектов. Электронные дефекты. Собственные точечные дефекты. Термодинамические причины образования точечных дефектов. Дефектообразование и нестехиометрия кристаллов. Дефекты по Шоттки и Френкелю.</p> <p>Примесные точечные дефекты. Нейтральные и заряженные точечные дефекты. Квазихимическая модель описания равновесия точечных дефектов. Взаимодействие точечных дефектов. Ассоциаты дефектов. Центры окраски. Взаимосвязь концентрации примесей и собственных точечных дефектов. Влияние точечных дефектов на свойства неорганических веществ.</p> <p>Методы создания неравновесных концентраций точечных дефектов: закалка, механическое и радиационное воздействие.</p> <p>Подвижность точечных дефектов. Диффузия и самодиффузия в твёрдых телах. Основные механизмы самодиффузии. Коэффициент диффузии, энергия активации диффузии. Диффузия, обусловленная градиентом концентраций, законы Фика.</p> <p>Диффузия точечных дефектов в электрическом поле. Уравнение Нернста-Эйнштейна. Методы исследования диффузии. Ионная проводимость. Подвижность, числа переноса.</p> <p>Температурная зависимость ионной проводимости. Собственная и примесная проводимость. Суперионные проводники (твёрдые электролиты).</p> <p>Твёрдые тела со структурной разупорядоченностью. Протяжённые дефекты. Структуры кристаллографического сдвига. Дефекты упаковки. Границы блоков и антифазные домены (границы). Гетерогенные включения. Нейтральные и заряженные протяжённые дефекты.</p> <p>Дислокации в кристаллах, основные виды. Причины возникновения дислокаций. Движение дислокаций. Влияние дислокаций на свойства кристаллов. Экспериментальные методы исследования дислокаций.</p> <p>Поверхность как дефект строения твёрдого тела. Поверхностная энергия кристалла. Искажение структуры и электронного строения в приповерхностных слоях. Роль поверхности в химических реакциях твёрдых тел. Роль соотношения объем-поверхность в свойствах твёрдых тел. Общие особенности химии твёрдых наноразмерных частиц. Экспериментальные методы изучения поверхности.</p>	
<i>Раздел 2</i>		зачёт

<p>Тема 2.1. Методы синтеза и химические реакции твёрдых веществ</p>	<p>Термодинамическая классификация фазовых переходов. Стабильные и метастабильные фазы. Представление фазовых переходов на диаграммах состояния. Структурные изменения при фазовых переходах. Изменения структуры с ростом температуры и давления. Мартенситные превращения. Механизмы фазовых переходов. Кинетика фазовых переходов. Скорость зародышеобразования. Общая скорость превращения, уравнение Аврами. Факторы, влияющие на кинетику фазовых переходов. Мартенситные превращения.</p> <p>Переходы типа порядок-беспорядок. Несоразмерные фазы. Жидкокристаллическое состояние. Некристаллическое состояние и фазовые переходы в стёклах.</p> <p>Термодинамические оценки возможности прохождения химических реакций с участием твёрдых тел. Общие закономерности скорости гетерогенных химических процессов с участием твёрдых тел. Элементарные кинетические стадии процессов. Роль массопереноса. Процессы, лимитируемые диффузионными и кинетическими стадиями. Роль зародышеобразования в процессах, сопровождающихся образованием твёрдых продуктов. Термодинамика формирования новой фазы. Критическое пересыщение, критический размер зародыша. Кинетика образования и роста зародышей. Классификация химических гетерогенных процессов с участием твёрдых фаз. Термическое разложение твёрдых фаз с образованием продуктов в различных фазовых состояниях. Распад твёрдых растворов по спинодальному механизму и механизму роста зародышей. Реакции твёрдая фаза — твёрдая фаза, твёрдая фаза — газ, твёрдая фаза — жидкость. Примеры. Кинетические особенности процессов в каждом случае. Основные факторы, влияющие на реакционную способность твёрдых тел. Роль примесей и дефектов. Химические реакции на поверхности. Методы управления развитием процессов с участием твёрдых тел. Нетермические способы повышения реакционной способности твёрдых тел: фотохимические, радиационно-химические, механические и др.</p> <p>Термодинамические основы синтеза твёрдых веществ. P–T–x фазовые диаграммы двухкомпонентных систем как геометрическое представление термодинамических данных. Правило фаз Гиббса. Работа с проекциями и сечениями P–T–x диаграмм. Основные типы конденсированных фазовых диаграмм двухкомпонентных систем: с простой эвтектикой, с образованием конгруэнтно и инконгруэнтно плавящихся промежуточных соединений, с расщеплением в жидкой фазе, с неограниченными и ограниченными твёрдыми растворами, с</p>	
---	---	--

	<p> полиморфизмом компонентов и соединений. Конденсированные диаграммы трёхкомпонентных систем. Фазовые равновесия в субсолидусной области. Использование фазовых диаграмм для выбора условий синтеза. </p> <p> Синтез путём твердофазных реакций. Основные термодинамические и кинетические закономерности. Экспериментальное осуществление, роль температуры. Методы интенсификации твердофазных процессов: диспергирование исходных веществ, методы химической гомогенизации. Совместное соосаждение компонентов из растворов. Криохимический синтез и распылительная сушка. Кристаллизация из гелей. Золь-гель процесс. Механохимическое стимулирование твердофазных процессов. Основные закономерности и возможности механохимических процессов. Саморазвивающийся высокотемпературный синтез. Твердофазный синтез при высоких давлениях. </p> <p> Кристаллизация из растворов и расплавов. Использование фазовых диаграмм. Кривые растворимости. Основные кинетические закономерности. Особенности зародышеобразования. Возможность образования метастабильных фаз. Политермические и изотермические процессы синтеза. Экспериментальное оформление. Методы электрохимического синтеза. </p> <p> Кристаллизация из паровой фазы. Основные термодинамические и кинетические закономерности. Процессы сублимации-конденсации. Управление составом внутри области гомогенности отжигом в паре компонентов. Синтез и очистка веществ с помощью химических транспортных реакций в паровой фазе. Теоретические основы, основные закономерности и возможности. </p> <p> Гидротермальные методы синтеза твёрдых веществ. Применение различных физических (ультразвукового, микроволнового и др.) воздействий при синтезе твердофазных веществ. </p> <p> Выращивание монокристаллов. Общие кинетические особенности. Механизмы роста кристаллов. Выращивание из расплавов и растворов. Методы Чохральского, Степанова, Бриджмена-Стокбаргера. Зонная плавка. Рост из «раствора в расплаве». Выращивание из газовой фазы. Газоплазменный метод Вернейля. </p> <p> Получение твёрдых веществ в виде тонких слоёв и плёнок. Поликристаллические и эпитаксиальные плёнки. Физические методы: лазерная абляция, магнетронное распыление, электронно-лучевое испарение. Химическое осаждение из паровой фазы, использование гидридов, галогенидов, металлоорганических соединений. Метод молекулярного </p>	
--	--	--

	<p>наслаивания. Получение плёнок из растворов и расплавов. Жидкофазная эпитаксия. Электрохимическая кристаллизация плёнок и покрытий. Керамика. Основные закономерности и способы спекания. Способы получения твёрдых аморфных веществ и стёкол. Методы получения твёрдых фаз в наноразмерном состоянии.</p> <p>Методы изучения кристаллического строения твёрдых тел. Дифракция рентгеновских лучей. Закон Брэгга, расчёт межплоскостных расстояний. Метод порошка, научные основы и применение. Метод Гинье. Индексирование рентгенограмм. Идентификация веществ по рентгенограммам, рентгенофазовый анализ. Общие представления о структурном анализе по порошковым данным. Метод Ритвельда. Рентгенографическое исследование монокристаллов, общие представления о ходе структурного анализа. Получение структурных данных с помощью электронной и нейтронной дифракции. Особенности и возможности методов.</p> <p>Другие методы изучения строения твёрдых веществ. Кристаллооптический анализ. Электронная микроскопия: принципы и возможности сканирующей электронной микроскопии, туннельной электронной микроскопии, электронной микроскопии высокого разрешения.</p> <p>Спектральные методы: колебательная спектроскопия, ИК- и КР- спектры; спектроскопия видимого излучения и УФ-спектроскопия; спектроскопия ядерного магнитного резонанса (ЯМР), ядерного квадрупольного резонанса (ЯКР) и электронного парамагнитного резонанса (ЭПР); ядерная гамма-резонансная (мёссбауэровская) спектроскопия (ЯГРС).</p> <p>Методы определения химического состава. Химический элементный анализ. Рентгенофлуоресцентный анализ. Локальный рентгеноспектральный анализ, масс-спектрометрические методы, атомно-эмиссионная спектроскопия.</p> <p>Методы исследования поверхности. Оже-электронная спектроскопия, РФЭС, обратное резерфордское рассеяние. Методы исследования ближнего окружения атомов. Рентгеновская абсорбционная спектроскопия (EXAFS, XANES).</p> <p>Исследования термических свойств веществ. Термогравиметрический анализ. Дифференциально-термический анализ и дифференциальная сканирующая калориметрия.</p> <p>Методы исследования электрических и магнитных свойств.</p>	
Раздел 3		зачёт
Тема 3.1.	Классификация твердофазных материалов по функциональным свойствам.	

<p>Твердофазные материалы</p>	<p>Ионная проводимость и твёрдые электролиты (ТЭЛ). Суперионные проводники. Катионные проводники. Кислород-ионные проводники. Галогенид-ионные проводники. Применение твёрдых электролитов (источники тока, топливные элементы, химические сенсоры).</p> <p>Полупроводники. Классификация полупроводниковых материалов. Элементарные полупроводники, германий и кремний. Полупроводниковые соединения АЗВ5 и А2В6. Кристаллохимические особенности. Арсенид галлия. Нитрид галлия. Химические основы легирования полупроводников. Гетероструктуры и сверхрешётки. Основные области применения полупроводников.</p> <p>Диэлектрики. Химическая и физическая природа диэлектриков. Наведённая и спонтанная поляризация. Сегнетоэлектрики, пиро- и пьезоэлектрики. Примеры. Области применения сегнетоэлектриков, пиро- и пьезоэлектриков.</p> <p>Магнитные материалы. Функциональные параметры. Классификация магнитных материалов, основные структуры и свойства (металлы и сплавы, оксиды переходных металлов, шпинели, гранаты, перовскиты, гексаферриты). Области применения, взаимосвязь структуры и свойств. Материалы с эффектом гигантского (ГМС) и колоссального (КМС) магнитного сопротивления.</p> <p>Оптические материалы. Люминесцентные материалы и люминофоры. Фосфоресцирующие материалы.</p> <p>Твердотельные источники лазерного излучения (рубиновый и неодимовый лазеры). Нелинейные оптические материалы. Основные области применения.</p> <p>Сверхпроводящие материалы. Традиционные (металлы и интерметаллиды) и высокотемпературные (оксиды) сверхпроводники (ВТСП). Взаимосвязь состав-структура-свойство для высокотемпературных сверхпроводников на основе купратов. Области и перспективы применения.</p> <p>Тугоплавкие материалы. Металлы и сплавы, оксиды, карбиды, бориды, нитриды, силициды. Композиционные материалы, их классификация и методология создания. Металлсодержащие композиционные материалы.</p> <p>Аморфные материалы и стекла. Факторы, влияющие на стеклообразование. Оксидные, фторидные и халькогенидные стекла. Электропроводящие стекла. Металлические стекла. Стеклокерамика. Ситаллы. Различные области применения стёкол. Жидкие кристаллы.</p> <p>Органические функциональные материалы. Основные типы и области применения. Биоматериалы.</p>
-------------------------------	--

3.4. Лекции

<i>Номер раздела и темы</i>	<i>Тема лекции</i>	<i>Объем часов</i>
Раздел 1. Тема 1.1	Основные положения и понятия химии твёрдого тела. Физико-химические свойства твёрдых веществ.	2
Раздел 2. Тема 2.1	Методы синтеза и химические реакции твёрдых веществ.	2
Раздел 3. Тема 3.1	Твердофазные материалы	2
ИТОГО:		6

3.5. Семинары

Тема 1.1	Принципы создания, изучения твердотельных материалов	4
	Строение твёрдых веществ	4
	Химическая связь и электронное строение твёрдых веществ	4
	Реальная структура кристаллов	2
Тема 2.1	Фазовые переходы в твёрдых веществах	4
	Химические реакции твёрдых веществ	4
	Методы синтеза твёрдых веществ	4
	Методы исследования твёрдых веществ	2
Тема 3.1	Применение твердофазных материалов в медицине	2
ИТОГО		30

3.6. Самостоятельная работа

Самостоятельная работа предполагает самостоятельную проработку учебного материала.

Аспирант занимается конспектированием и реферированием первоисточников и научно-исследовательской литературы по тематическим блокам.

Вопросы для самоподготовки

Тема 1.1. Основные положения и понятия химии твёрдого тела. Физико-химические свойства твёрдых веществ.

1. Понятия: твёрдое вещество, материал, композиционный материал (композит); макро- и микроструктура, наноструктура; наноматериал, композиционный наноматериал.
2. Значение химии твёрдого состояния для материаловедения.
3. Твёрдые растворы и их классификация.
4. Диффузия и самодиффузия в твёрдых телах.
5. Особенности химии твёрдых наноразмерных частиц.

Тема 2.1. Методы синтеза и химические реакции твёрдых веществ.

1. Гетерогенные химические реакции. Общая характеристика и классификация гетерогенных реакций твёрдых веществ.
2. Модельное описание реакции низкомолекулярных веществ с поверхностью твёрдого тела.
3. Поверхностные химические реакции.

4. Современные подходы к синтезу наноматериалов.
5. Термодинамические основы синтеза твёрдых веществ.

Тема 3.1. Твердофазные материалы.

1. Оптические материалы: люминесцентные материалы, люминофоры, фосфоресцирующие материалы.
2. Применение наночастиц кремнезёма в медицине.
3. Совместимость материалов с биологическими средами живого организма.
4. Биомедицинское применение магнитных наночастиц.
5. Композиционные материалы — гетерофазные системы, структурированные на макро-, микро- и наноуровне.

4. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

4.1. Текущий контроль успеваемости и промежуточная аттестация по результатам освоения дисциплины

Текущий контроль успеваемости постоянно осуществляет научный руководитель аспиранта.

По мере освоения программы дисциплины «Химия твёрдого тела» аспирант должен сдать 3 зачёта, после чего получает допуск к сдаче кандидатского экзамена по дисциплине «Химия твёрдого тела».

Зачёт 1 состоит из тестового контроля (по 30 тестов) по всем разделам программы (входной уровень знаний), после прохождения тестового контроля аспирант сдаёт зачёт по соответствующему разделу программы в виде собеседования (по определённому перечню вопросов).

Зачёты 2 и 3 включают собеседование (по определённому перечню вопросов).

Зачёты по освоенным разделам дисциплины входят в содержание промежуточной аттестации по итогам I, III и IV семестров, фиксируются в зачётном листе аспиранта.

Контроль	Время проведения	Содержание	Оценка
Зачёт 1	1-й семестр	Раздел 1	зачтено/незачтено
Зачёт 2	3-й семестр	Раздел 2	зачтено/незачтено
Зачёт 3	4-й семестр	Раздел 3	зачтено/незачтено, допуск к кандидатскому экзамену
Кандидатский экзамен	4-й семестр	Основная программа КЭ Дополнительная программа КЭ	пятибалльная система

По мере совершенствования знаний по дисциплине «Химия твёрдого тела» аспирант должен:

результаты освоения дисциплины	оценка освоения дисциплины
--------------------------------	----------------------------

<p>ЗНАТЬ:</p> <p>— основные фундаментальные явления и эффекты, теоретические работы и результаты экспериментальных исследований в области химии твёрдого тела;</p> <p>— основные методы проведения физико-химических экспериментов в химии твёрдого тела;</p> <p>— основные современные направления развития химии твёрдого тела; современные методы исследования строения и свойств твёрдых тел.</p>	<p>текущий контроль знаний (опрос, обсуждение)</p> <p>зачёт 1 – тест, собеседование</p>
<p>УМЕТЬ:</p> <p>— выбирать экспериментальные методы, необходимые для получения конкретной информации о строении и химических и физических свойствах твёрдых тел;</p> <p>— модифицировать существующие и разрабатывать новые методы, исходя из задач конкретного исследования по выбранной теме;</p> <p>— проводить литературный поиск, анализировать информацию, определять задачи, в которых можно применять знания и представления о физико-химическом поведении веществ в конденсированном состоянии.</p>	<p>текущий контроль знаний (опрос, обсуждение)</p> <p>зачёт 2 – собеседование</p> <p>зачёт 3 – собеседование</p>
<p>ВЛАДЕТЬ:</p> <p>— основами физико-химических методов изучения строения и свойств твёрдых тел;</p> <p>— навыками современных методов исследования в области химии твёрдого тела;</p> <p>— навыками грамотной интерпретации процессов, происходящих при твердофазных превращениях.</p>	<p>текущий контроль знаний (опрос, обсуждение)</p> <p>зачёт 2 – собеседование</p> <p>зачёт 3 – собеседование</p>
	Кандидатский экзамен

4.2. Критерии оценки качества знаний аспирантов

Зачёт по соответствующему разделу программы включает 2 вопроса:

зачтено

- знание определений, физических понятий, формулировок и доказательств утверждений
- знание фактического материала;
- владение необходимым математическим аппаратом;
- критическое и самостоятельное изложение материала
- способность отвечать на дополнительные вопросы по программе.

незачтено

- не дан ответ на поставленные вопросы билета
- не даны ответы ни на один дополнительный вопрос
- продемонстрирована недостаточность знаний в рамках программы экзамена
- использование математического аппарата содержит грубые ошибки
- поставленные задачи не решены.

4.3. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и опыта деятельности, характеризующих этапы формирования знаний, умений, навыков и опыта деятельности

Зачёт 1

Примеры тестовых вопросов

1. Укажите, каков характер сил, участвующих в образовании химической связи в твёрдом теле:
 - а) расположение атомов в пространстве и взаимодействие между атомами и молекулами, из которых состоят твёрдые тела;
 - б) образования химических связей, в том числе и в твёрдых телах, объясняется тем, что атомы, у которых не заполнены валентные оболочки, могут принимать или отдавать электроны;
 - в) наиболее существенное значение имеют электростатические силы, т. е. силы взаимодействия электрических зарядов, носителями которых являются электроны и ядра атомов.
2. Общий подход к рассмотрению ионных, ковалентных и металлических кристаллов даёт:
 - а) зонная теория кристаллов;
 - б) метод молекулярных орбиталей;
 - в) метод валентных связей;
 - г) теория Дебая.
3. Что такое идеальная кристаллическая структура?
 - а) идеальная кристаллическая структура подразумевает периодичность в трёх измерениях, что соответствует понятию решётки;
 - б) идеальная кристаллическая структура подразумевает теоретические положения о том, что вещество состоит из совершенно одинаковых элементарных ячеек, одинаково ориентированных и заполняющих всё пространство;
 - в) упрощённое описание кристаллической структуры.
4. Что такое реальная кристаллическая структура?
 - а) такая структура содержит дополнительные данные к описанию идеальной кристаллической структуры;
 - б) реальный кристалл всегда содержит различные дефекты внутренней структуры решётки, искажения и неровности на гранях и деформаций;
 - в) реальный кристалл является продуктом синтеза.
5. Чем различаются понятия кристаллическая структура и кристаллическая решётка?
 - а) понятия кристаллической структуры и кристаллической решётки равноценны;
 - б) кристаллическая структура — это физическая реальность, а пространственная решётка — теоретическое (геометрическое построение), помогающее выявить законы симметрии кристаллической структуры;
 - в) эти понятия применяются в разных случаях (1 — в научных исследованиях и 2 — при описании материалов), но, по сути, они одинаковы.
6. Назовите причины образования точечных дефектов в кристаллах.
 - а) наличие пор в кристаллах;
 - б) наличие мест с атомами, обладающими большей энергией и перешедшими с одного места на другое;
 - в) наличие атомов с различной валентностью;
 - г) наличие нестехиометрии.
7. Назовите способы введения примесей в кристалл:

- а) легирование уже выращенных кристаллов;
 - б) легирование кристаллов в процессе выращивания из жидкой фазы;
 - в) легирование в расплаве;
 - г) облучение кристаллов лучом света.
8. Что такое коэффициент диффузии?
- а) коэффициент диффузии — это количество вещества, образовавшегося в результате диффузии в единицу времени;
 - б) коэффициент диффузии — это количественная характеристика скорости диффузии, равная количеству вещества (в массовых единицах), проходящего в единицу времени через участок единичной площади (например, 1 м^2) в результате теплового движения молекул при градиенте концентрации, равном единице (соответствующем изменению $1 \text{ моль/л} \rightarrow 0 \text{ моль/л}$ на единицу длины);
 - в) коэффициентом диффузии называют физическую величину, которая численно равна количеству диффундирующего вещества, которое проникает за единицу времени через единицу поверхности, если разность плотностей на двух поверхностях, находящихся на расстоянии равном единице длины, равна единице.
9. Перечислите основные механизмы диффузии в реальном кристалле.
- а) основным механизмом перемещения атомов по кристаллу может быть прямой обмен атомов местами;
 - б) основными механизмами перемещения атомов по кристаллу могут быть: 1) прямой обмен атомов местами; 2) кольцевой обмен; 3) перемещение по междоузлиям; 4) эстафетная диффузия; 5) перемещение по вакансиям;
 - в) Основным механизмом перемещения атомов по кристаллу может быть вакансионный механизм диффузии.
10. В чем отличие материала от твёрдого вещества:
- а) материал — это твёрдое химическое соединение, которое после определённой обработки можно применять в промышленности;
 - б) материал — это твёрдое химическое соединение (SiO_2 , TiO_2 , Al_2O_3 и др.) или их совокупность с известным химическим составом и строением, находящееся в таком состоянии, которое характеризуется комплексом необходимых для практики функциональных свойств;
 - в) материал — это любое твёрдое химическое соединение, которое можно применять в промышленности;
 - г) только полимеры.

Примеры вопросов для собеседования

1. Молекулярные кристаллы. Кристаллы с ионными и ковалентными решётками. Правила Полинга. Металлы и сплавы. Интерметаллические соединения.
2. Металлы и диэлектрики. Собственные и примесные полупроводники. Электронная и дырочная проводимость.
3. Диффузия точечных дефектов в электрическом поле. Уравнение Нернста-Эйнштейна. Методы исследования диффузии.
4. Типы химической связи в твёрдом теле. Ван-дер-Ваальсово взаимодействие в молекулярных кристаллах, клатраты.
5. Дислокации в кристаллах, основные виды. Причины возникновения дислокаций.

Зачёт 2

Примеры вопросов для собеседования

1. Классификация химических гетерогенных процессов с участием твёрдых фаз.
2. Термодинамическая классификация фазовых переходов. Стабильные и метастабильные фазы. Представление фазовых переходов на диаграммах состояния.
3. Методы изучения кристаллического строения твёрдых тел. Дифракция рентгеновских лучей. Закон Брэгга, расчёт межплоскостных расстояний.
4. Основные факторы, влияющие на реакционную способность твёрдых тел.
5. Диаграммы плавкости двухкомпонентных систем.

Зачёт 3

Примеры вопросов для собеседования

1. Магнитные материалы. Функциональные параметры. Классификация магнитных материалов, основные структуры и свойства.
2. Аморфные материалы и стекла. Факторы, влияющие на стеклообразование. Оксидные и халькогенидные стекла.
3. Основные типы и параметры структуры композиционных материалов, в том числе композиционных наноматериалов.
4. Биомедицинское применение фуллеренов и углеродных нанотрубок.
5. Наноструктуры в диагностике и лечении рака.

5. ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ОБУЧЕНИЯ

Учебная, учебно-методическая и иные библиотечно-информационные ресурсы обеспечивают учебный процесс и гарантируют возможность качественного освоения аспирантом образовательной программы. Кафедры располагают обширной библиотекой, включающей научную литературу по химии твёрдого тела, научные журналы и труды конференций.

Литература, рекомендуемая для самоподготовки.

1. Иванов-Шиц А. К., Мурин И. В. Ионика твёрдого тела: Т.1, СПб.: Изд-во С. Петерб. Ун-та, 2000.
2. Иванов-Шиц А. К., Мурин И. В. Ионика твёрдого тела: Т.2, СПб.: Изд-во С. Петерб. Ун-та, 2010.
3. Егоров-Тисменко Ю. К.; под ред. академика В. С. Урусова. Кристаллография и кристаллохимия. М.: КДУ, 2005.
4. Вуль А. Я., Шендерова О. А. Детонационные наноалмазы. Технология, структура, свойства и применения. СПб.: ФТИ им. А.Ф.Иоффе, 2016.
5. Бокштейн Б. С., Ярославцев А. Б. Диффузия атомов и ионов в твёрдых телах. М.: МИСИС, 2005.
6. Болдырева Е. В. Описание симметрии кристаллических структур. Изд-во НГУ, 1995.
7. Витайкин Б. Е. Физика твёрдого тела. Учебное пособие. 2-е изд., стер. М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2008.
8. Григорьева Т. Ф., Баринаева А. П., Ляхов Н. З. Механохимический синтез в металлических системах. Новосибирск: Параллель. 2008
9. Гусев А. И. Нестехиометрия, беспорядок, ближний и дальний порядок в твёрдом теле. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2007.

10. Cataldo F., Milani P., Da Ros T. (eds.) *Medicinal Chemistry and Pharmacological Potential of Fullerenes and Carbon Nanotubes*, Vol. 01, 2008.
11. Пиотровский Л. Б. *Очерки о наномедицине*. СПб.: Издательство «Европейский Дом», 2013.
12. Кнотько А. В. *Химия твёрдого тела. Учебное пособие для студ. высш. учеб. заведений*. М.: Издательский центр «Академия», 2006.
13. Князева А. Г. *Термодинамика фазовых переходов в простых и сложных средах (учебное пособие)*. Томск: Изд-во НТЛ, 2001.
14. Полубояров В. А., Андрюшкова О. В., Паули И. А., Коротаева З. А. *Механохимия создания материалов с заданными свойствами (учебное пособие)*. Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2007.
15. Русанов А. И. *Термодинамические основы механохимии*. СПб.: Наука, 2006.
16. Скрипов В. П., Файзуллин М. З. *Фазовые переходы кристалл – жидкость – пар и термодинамическое подобие*. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2003.
17. Третьяков Ю. Д. *Твердофазные реакции*. «Химия», 1978
18. Уваров Н. Ф. *Композиционные твёрдые электролиты*. Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2008.
19. *Физические методы исследования неорганических веществ. Учебное пособие для студ. высш. учеб. заведений*. Т. Г. Баличева и др. Под ред. А. Б. Никольского. М.: Издательский центр «Академия», 2006.
20. K. N. Semenov, N. A. Charykov, V. N. Postnov, V. V. Sharoyko, I. V. Vorotyntsev, M. M. Galagudza, I. V. Murin. Fullereneols: Physicochemical properties and applications // *Progress in Solid State Chemistry*. 2016. V. 44 (2). P. 59–74.
21. K. N. Semenov, E. V. Andrusenko, N. A. Charykov, E. V. Litasova, G. G. Panova, A. V. Penkova, I. V. Murin, L. B. Piotrovskiy. Carboxylated fullerenes: Physico-chemical properties and potential applications // *Progress in Solid State Chemistry*. 2017. V. 47–48. P. 19–36.
22. E. I. Pochkaeva, N. E. Podolskiy, D. N. Zakusilo, A. V. Petrov, G. G. Panova, K. N. Semenov, N. A. Charykov, T. D. Vlasov, A. V. Penkova, V. V. Sharoyko, I. V. Murin. Fullerene derivatives with amino acids, peptides and proteins: from synthesis to biomedical application // *Progress in Solid State Chemistry*. 2020. V. 57, P. 100255.
23. V. V. Sharoyko, S. V. Ageev, N. E. Podolsky, A. V. Petrov, E. V. Litasova, T. D. Vlasov, L. V. Vasina, I. V. Murin, L. B. Piotrovskiy, K. N. Semenov. Biologically active water-soluble fullerene adducts: Das Glasperlenspiel (by H. Hesse)? // *Journal of Molecular Liquids*. 2021, V. 323, P. 114990.

Интернет-ресурсы:

1. ЭБС «Консультант студента»
2. База данных рефератов и цитирования SCOPUS
3. <http://elibrary.ru> eLibrary – Научная электронная библиотека
4. <http://library.1spbgmu.ru> – Фундаментальная библиотека ПСПбГМУ им. акад. И. П. Павлова.