

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное учреждение
высшего профессионального образования
"Казанский (Приволжский) федеральный университет"
Химический институт им. А.М. Бутлерова



подписано электронно-цифровой подписью

Программа дисциплины
Химия твердого тела М2.ДВ.2

Направление подготовки: 020100.68 - Химия

Профиль подготовки: Нефтехимия и катализ

Квалификация выпускника: магистр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

Автор(ы):

Штырлин В.Г.

Рецензент(ы):

Соломонов Б.Н.

СОГЛАСОВАНО:

Заведующий(ая) кафедрой: Амиров Р. Р.

Протокол заседания кафедры No ____ от " ____ " _____ 201__г

Учебно-методическая комиссия Химического института им. А.М. Бутлерова:

Протокол заседания УМК No ____ от " ____ " _____ 201__г

Регистрационный No 731815

Казань
2014

Содержание

1. Цели освоения дисциплины
2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы
3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля
4. Структура и содержание дисциплины/ модуля
5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения
6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов
7. Литература
8. Интернет-ресурсы
9. Материально-техническое обеспечение дисциплины/модуля согласно утвержденному учебному плану

Программу дисциплины разработал(а)(и) доцент, к.н. (доцент) Штырлин В.Г. Кафедра неорганической химии Химический институт им. А.М. Бутлерова, Valery.Shtyrlin@kpfu.ru

1. Цели освоения дисциплины

получение знаний в области устоявшихся и современных концепций в области химии твердого тела, современных способах конструирования, синтеза и методах исследования твердотельных материалов

2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы высшего профессионального образования

Данная учебная дисциплина включена в раздел " М2.ДВ.2 Профессиональный" основной образовательной программы 020100.68 Химия и относится к дисциплинам по выбору. Осваивается на 2 курсе, 3 семестр.

относится к циклу М2 профессиональных дисциплин, его вариативной части М2.ДВ2 и опирается на основные разделы общенаучных дисциплин: физика, неорганическая химия, органическая химия, физическая химия, строение вещества, аналитическая химия, физические методы исследования, теория симметрии в координационной химии, кристаллохимия

3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля

В результате освоения дисциплины формируются следующие компетенции:

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ПК-3 (профессиональные компетенции)	способностью понимать и применять в исследовательской и прикладной деятельности современный математический аппарат
ОК-2 (общекультурные компетенции)	способностью уважительно и бережно относиться к историческому наследию и культурным традициям, толерантность в восприятии социальных и культурных различий
ОК-4 (общекультурные компетенции)	способностью понимать и анализировать мировоззренческие, социально и лично значимые философские проблемы
ОК-6 (общекультурные компетенции)	способностью использовать нормативные правовые документы в своей деятельности, проявлять настойчивость в достижении цели с учетом моральных и правовых норм и обязанностей
ПК-1 (профессиональные компетенции)	способностью демонстрации общенаучных базовых знаний естественных наук, математики и информатики, понимание основных фактов, концепций, принципов теорий, связанных с прикладной математикой и информатикой
ПК-4 (профессиональные компетенции)	способностью в составе научно-исследовательского и производственного коллектива решать задачи профессиональной деятельности
ПК-5 (профессиональные компетенции)	способностью критически переосмысливать накопленный опыт, изменять при необходимости вид и характер своей профессиональной деятельности

В результате освоения дисциплины студент:

1. должен знать:

-основы строения твердых тел, симметрии кристаллов, методы синтеза твердых веществ, механизмы твердофазных реакций;
 - фазовые превращения твердых тел, типы и роли дефектов в твердых телах, взаимосвязь между структурой и свойствами кристаллов, магнитные, электрические, диэлектрические и оптические свойства кристаллов

2. должен уметь:

-ориентироваться в систематике структур неорганических соединений, структурах органических кристаллов, соединений включения и клатратов, аморфных твердых тел, методах исследования кристаллов, дизайне особых твердотельных материалов, структурных особенностях высокотемпературных оксидных сверхпроводников

3. должен владеть:

навыками:

- рассмотрения и анализа кристаллохимической информации в книжных и журнальных изданиях.

4. должен демонстрировать способность и готовность:

ориентироваться в систематике структур неорганических соединений, структурах органических кристаллов, соединений включения и клатратов, аморфных твердых тел

4. Структура и содержание дисциплины/ модуля

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетных(ые) единиц(ы) 108 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины зачет в 3 семестре.

Суммарно по дисциплине можно получить 100 баллов, из них текущая работа оценивается в 50 баллов, итоговая форма контроля - в 50 баллов. Минимальное количество для допуска к зачету 28 баллов.

86 баллов и более - "отлично" (отл.);

71-85 баллов - "хорошо" (хор.);

55-70 баллов - "удовлетворительно" (удов.);

54 балла и менее - "неудовлетворительно" (неуд.).

4.1 Структура и содержание аудиторной работы по дисциплине/ модулю

Тематический план дисциплины/модуля

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
1.	Тема 1. Строение твердых тел	3	1-5	2	4	0	устный опрос
2.	Тема 2. Методы исследования кристаллов	3	6-7	2	4	0	устный опрос
3.	Тема 3. Методы синтеза твердых веществ	3	8-9	1	4	0	контрольная работа
4.	Тема 4. Фазовые превращения	3	10-11	1	2	0	устный опрос

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
5.	Тема 5. Дефекты в твердых телах	3	12-13	1	2	0	контрольная работа
6.	Тема 6. Взаимосвязь между структурой и свойствами кристаллов	3	14-15	1	2	0	устный опрос
7.	Тема 7. Твердофазные реакции	3	16	1	2	0	контрольная работа
8.	Тема 8. Дизайн особых твердотельных материалов	3	17-18	1	2	0	устный опрос
	Тема . Итоговая форма контроля	3		0	0	0	зачет
	Итого			10	22	0	

4.2 Содержание дисциплины

Тема 1. Строение твердых тел

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Симметрия кристаллов. Химическая связь в твердых телах. Систематика структур не-органических соединений. Силикаты и алюмосиликаты. Несвязывающие взаимодействия в ионных кристаллах. Политипизм. Органические кристаллы: фуллерены и родственные материалы, комплексы с переносом заряда. Соединения включения и клатраты. Аморф-ные твердые тела.

практическое занятие (4 часа(ов)):

Квазикристаллы. Квазичастицы в кристаллах: фононы, магноны, экситоны, поляроны, солитоны.

Тема 2. Методы исследования кристаллов

лекционное занятие (2 часа(ов)):

Рентгеновская, электронная и нейтронная дифракция. Электронная микроскопия. Рентгеновская адсорбционная спектроскопия (EXAFS и XANES). Электронная спектроскопия (XPS, UVPS, AES, EELS).

практическое занятие (4 часа(ов)):

Спектроскопия ЯМР и ЭПР. Адсорбционная, флуоресцентная, ИК- и КР-спектроскопия. Зондовая микроскопия (STM, AFM).

Тема 3. Методы синтеза твердых веществ

лекционное занятие (1 часа(ов)):

Получение неорганических материалов керамическими, химическими и дугowymi методами, применение высокого давления, настыльного плавления и химического осаждения из газовой фазы (CVD). Особенности синтеза органических твердых тел. Синтез наноматериалов.

практическое занятие (4 часа(ов)):

Получение аморфных веществ. Общие методы выращивания крупных кристаллов.

Тема 4. Фазовые превращения

лекционное занятие (1 часа(ов)):

Термодинамика фазовых переходов. Фазовые переходы первого и второго рода. Теория фазовых переходов Ландау. Мягкие моды. Критические явления. Структурные изменения при фазовых превращениях. Основные механизмы фазовых переходов. Несоразмерные фазы. Кооперативный эффект Яна-Теллера. Переходы между спиновыми состояниями. Мезофазы.

практическое занятие (2 часа(ов)):

Пластическое кристаллическое состояние. Жидкие кристаллы: нематические, холестерические и смектические фазы. Фазовые переходы в стеклах.

Тема 5. Дефекты в твердых телах

лекционное занятие (1 часа(ов)):

Точечные дефекты по Френкелю и Шоттки. Равновесие точечных дефектов. Параэлектрические и молекулярные примеси. Центры окраски. Дислокации. Планарные дефекты. Взаимодействие дефектов. Упорядочение точечных дефектов и сверхструктуры. Кристаллографический сдвиг.

практическое занятие (2 часа(ов)):

Блочные и бесконечно адаптивные структуры. Прораствание кристаллов. Дефектные перовскитные оксиды.

Тема 6. Взаимосвязь между структурой и свойствами кристаллов

лекционное занятие (1 часа(ов)):

Описание электронной структуры твердых тел в зонной модели, моделях локализованных электронов, химической связи и кластеров. Магнитные свойства кристаллов. Электрические свойства твердых тел. Сверхпроводимость. Диэлектрические и оптические свойства кристаллов.

практическое занятие (2 часа(ов)):

Переходы металл-неметалл между делокализованными состояниями, моттовские и андерсоновские переходы. Смешанно-валентные соединения. Низкоразмерные твердые тела. Ферроики.

Тема 7. Твердофазные реакции

лекционное занятие (1 часа(ов)):

Классификация твердофазных реакций. Реакции, включающие только одну твердую фазу. Топохимические и топотактические процессы. Реакции твердое-газ, твердое-твердое и твердое-жидкость. Процессы интеркаляции. Реакции органических твердых веществ. Механизмы важнейших твердофазных реакций.

практическое занятие (2 часа(ов)):

Диффузия в твердых телах и роль дефектов в твердофазных реакциях. Кинетические модели и уравнения изотермической кинетики. Модели с лимитированием диффузией, взаимодействием на границе раздела фаз и зародышеобразованием.

Тема 8. Дизайн особых твердотельных материалов

лекционное занятие (1 часа(ов)):

Твердые ионные проводники. Фотоэлектрохимические материалы. Магнитные материалы. Материалы для хранения водорода. Аморфные материалы. Органические материалы: молекулярные магниты, органические сверхпроводники, фотохромные материалы, вещества с выжженными дырками.

практическое занятие (2 часа(ов)):

Пленки Ленгмюра-Блоджетт. Жидкие кристаллы. Нелинейные оптические материалы. Люминесцентные материалы. Лазерные материалы. Высокотемпературные оксидные сверхпроводники.

4.3 Структура и содержание самостоятельной работы дисциплины (модуля)

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
---	-------------------	---------	-----------------	---------------------------------------	------------------------	---------------------------------------

твердых тел

устному опросу

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
2.	Тема 2. Методы исследования кристаллов	3	6-7	подготовка к устному опросу	10	устный опрос
3.	Тема 3. Методы синтеза твердых веществ	3	8-9	подготовка к контрольной работе	10	контрольная работа
4.	Тема 4. Фазовые превращения	3	10-11	подготовка к устному опросу	10	устный опрос
5.	Тема 5. Дефекты в твердых телах	3	12-13	подготовка к контрольной работе	10	контрольная работа
6.	Тема 6. Взаимосвязь между структурой и свойствами кристаллов	3	14-15	подготовка к устному опросу	10	устный опрос
7.	Тема 7. Твердофазные реакции	3	16	подготовка к контрольной работе	10	контрольная работа
8.	Тема 8. Дизайн особых твердотельных материалов	3	17-18	подготовка к устному опросу	4	устный опрос
	Итого				76	

5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения

- демонстрацией слайдов с применением мультимедийной техники,
- использованием раздаточного материала с изображением структуры кристаллов, графиками, схемами приборов, фотографиями.
- использованием интернет-ресурсов различных поисковых систем, таких как www.rambler.ru, www.yandex.ru, www.wail.ru, www.yahoo.ru; www.rushim.ru, www.chem.msu.ru, www.Scirus.com, а также сайтов государственных ВУЗов: МГУ, СПбГУ, НГУ, ИК СО РАН, Scientopica, ChemWeb, ResearchIndex, ScientificWorld

6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов

Тема 1. Строение твердых тел

устный опрос , примерные вопросы:

Типы связи в твердых телах. Ионные кристаллы.

Тема 2. Методы исследования кристаллов

устный опрос , примерные вопросы:

Методы рентгеновской дифракции: метод Лауэ. Методы рентгеновской дифракции: метод порошка (Дебая-Шеррера-Халла). Методы рентгеновской дифракции: метод вращающегося кристалла (метод Вейсенберга).

Тема 3. Методы синтеза твердых веществ

контрольная работа , примерные вопросы:

Структуры соединений типа ABX_3 : перовскиты. . Структуры соединений типа A_2BX_4 : K_2NiF_4 . Структуры соединений типа AB_2O_4 : шпинели и ?обращенные? шпинели. Структуры соединений типа $A_2B_2O_7$: пирохлоры.

Тема 4. Фазовые превращения

устный опрос , примерные вопросы:

Каркасные структуры на основе диоксида кремния (меланофлогит, додекасил-3С). Клатраты с сильной связью гость-хозяин (гексабориды щелочноземельных металлов и лантанидов, фазы Шевреля). Слоистые интеркалаты графита и дихалькогенидов металлов.

Тема 5. Дефекты в твердых телах

контрольная работа , примерные вопросы:

Аморфные твердые тела и их описание в моделях непрерывной беспорядочной сетки (ко-валентные стекла), беспорядочной упаковки жестких сфер (металлические стекла). Аморфные твердые тела и их описание в моделях беспорядочной спирали (полимер-ные стекла).

Тема 6. Взаимосвязь между структурой и свойствами кристаллов

устный опрос , примерные вопросы:

Возможности метода МО для описания кристаллических структур. Политипизм: политипы ZnS , CdI_2 , PbI_2 , Политипизм: политипы слоистых дихалькогенидов, силикатов, перовскитов. Органические кристаллы.

Тема 7. Твердофазные реакции

контрольная работа , примерные вопросы:

Голоэдрическая группа. Операция трансляции и открытые операции симметрии. Винтовой оператор и винтовые оси.

Тема 8. Дизайн особых твердотельных материалов

устный опрос , примерные вопросы:

Высокотемпературные оксидные сверхпроводники: структурные особенности купратных сверхпроводников, механизм сверхпроводимости в купратах.

Тема . Итоговая форма контроля

Примерные вопросы к зачету:

Вопросы к зачету и контрольным работам

1. Типы связи в твердых телах.
2. Ионные кристаллы.
3. Уравнения Борна-Майера и Борна-Ланде.
4. Постоянная Маделунга и маделунговский потенциал ионов.
5. Ковалентные кристаллы.
6. Алмазоподобные структуры, соединения типа ANB_8-N .
7. Ионность связи в кристаллах по Полингу и Филлипсу, эвристическое значение параметра ионности.
8. Металлические кристаллы.
9. Основы зонной теории.
10. Молекулярные кристаллы.
11. Ван-дер-Ваальсовы взаимодействия.
12. Энергии Кеезома, Дебая, Лондона.
13. Потенциал Леннарда-Джонса.
14. Парные атом-атомные потенциалы Китайгородского.
15. Кристаллы с водородной связью, значение водородной связи в живой природе.
16. Асимметричные и симметричные водородные связи, способы их описания.
17. Элементарная ячейка.

[...]

237. Аморфные материалы.

238. Органические материалы: органические полимеры и полимерные сплавы, металлорганические полимеры, фотохромные материалы, органические сверхпроводники, молекулярные магниты, вещества с выжженными дырками.

239. Пленки Ленгмюра-Блоджетт.

240. Жидкие кристаллы.

241. Нелинейные оптические материалы.

242. Люминесцентные материалы.

243. Лазерные материалы.

244. Высокотемпературные оксидные сверхпроводники: структурные особенности купратных сверхпроводников, механизм сверхпроводимости в купратах

7.1. Основная литература:

1. Аникина, В. И. Основы кристаллографии и дефекты кристаллического строения [Электронный ресурс] : Практикум / В. И. Аникина, А. С. Сапарова. - Красноярск : Сиб. федер. ун-т, 2011. - 148 с. -

<http://znanium.com/bookread.php?book=441367>

2. Цирельсон В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела. 2-е издание. - М.: Бином. Лаборатория знаний, 2012. - 496 с.

http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=3150

7.2. Дополнительная литература:

1. Майер И. Избранные главы квантовой химии: доказательства теорем и вывод формул. - 2-е изд. - М.: Бином. Лаборатория знаний, 2014. - 383 с.

http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=50535

2. Ярославцев А. Б. Химия твердого тела - М.: Научный мир, 2009. 322 с.

7.3. Интернет-ресурсы:

Избранные главы квантовой химии: доказательства теорем и вывод формул. -

http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=50535

Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела -

http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_id=3150

Основы кристаллографии и дефекты кристаллического строения -

<http://znanium.com/bookread.php?book=441367>

химия твердого тела - <http://www.xumuk.ru/encyklopedia/2/4998.html>

энциклопедия физики и техники. поверхность - http://www.femto.com.ua/articles/part_2/2913.html

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины(модуля)

Освоение дисциплины "Химия твердого тела" предполагает использование следующего материально-технического обеспечения:

- слайды с применением мультимедийной техники;

- раздаточный материал с изображением структуры кристаллов, графиками, схемами приборов, фотографиями

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО и учебным планом по направлению 020100.68 "Химия" и магистерской программе Нефтехимия и катализ .

Автор(ы):

Штырлин В.Г. _____

"__" _____ 201__ г.

Рецензент(ы):

Соломонов Б.Н. _____

"__" _____ 201__ г.