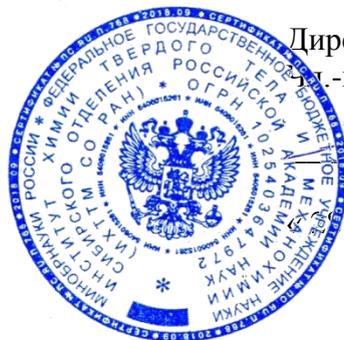


МИНОБРНАУКИ РОССИИ  
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ  
ИНСТИТУТ ХИМИИ ТВЕРДОГО ТЕЛА И МЕХАНОХИМИИ  
СИБИРСКОГО ОТДЕЛЕНИЯ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК  
(ИХТТМ СО РАН)



УТВЕРЖДАЮ  
Директор ИХТТМ СО РАН  
А.П. Немудрый

» марта 2022 г.

Рабочая программа дисциплины

**ХИМИЯ ТВЕРДОГО ТЕЛА**

Программы подготовки научных и научно-педагогических кадров  
в аспирантуре

Научная специальность подготовки:  
1.4.15. Химия твердого тела

Новосибирск 2022

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

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

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

Программу разработал:

доцент ИХТТМ СО РАН, канд. хим. наук Матвиенко А.А.



Зав. аспирантурой

д.х.н.

 Т.П. Шахтшнейдер

## **1. Цели и задачи дисциплины.**

Целью освоения дисциплины является получение аспирантами фундаментальных знаний в области химии твердого тела, приобретение умения анализировать наблюдения и экспериментальные данные, которые связаны с превращениями твердых тел.

Задачи дисциплины:

- ознакомление аспирантов с основами кристаллографии и кристаллохимии, теорией электронного строения твердых тел, дефектов кристаллического строения и фазовых переходов в твердых телах;
- формирование у аспирантов представлений о влиянии дефектов на протекание твердофазных реакций;
- ознакомление аспирантов с экспериментальными методами исследования твердых тел.

Данный курс знакомит аспирантов с основами описания кристаллической структуры кристаллов, влияния химического состава на структуру кристаллов, влияния дефектов кристаллического строения на физические и химические свойства твердых тел, даёт общие представления об электронном строении твердых тел и фазовых переходах в кристаллах.

## **2. Место дисциплины в структуре Программы аспирантуры.**

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

Дисциплина «Химия твердого тела» является базовой дисциплиной модуля «Химия твердого тела» и направлена на подготовку к сдаче кандидатского экзамена. Дисциплина обязательна для освоения в 1-й – 2-й годы обучения. Сдача кандидатского экзамена предусмотрена в 8 семестре, когда обучающиеся освоили все дисциплины модуля, практику, приобрели опыт научно-исследовательской деятельности. Предусмотрена возможность сдачи кандидатского экзамена в более ранние сроки по заявлению обучающегося.

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

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

## **3. Планируемые результаты обучения по дисциплине «Химия твердого тела».**

В результате освоения дисциплины аспиранты должны владеть фундаментальными знаниями в основных разделах химии твердого тела, включая проблемы строения и реакционной способности твердых веществ, методы синтеза различных классов твердофазных соединений, методы исследования свойств твердофазных веществ и материалов, в том числе

**Знать:**

- основные фундаментальные явления и эффекты, теоретические работы и результаты экспериментальных исследований в области химии твердого тела;
- основные методы проведения физико-химических экспериментов в химии твердого тела;
- основные современные направления развития химии твердого тела; современные методы исследования строения и свойств твердых тел;

- основы описания кристаллической структуры и электронного строения твердых тел; теоретические представления о влиянии дефектов кристаллического строения на физические и химические свойства твердых тел и фазовых переходах в кристаллах.

**Уметь:**

- выбирать экспериментальные методы, необходимые для получения конкретной информации о строении и химических и физических свойствах твердых тел;
- модифицировать существующие и разрабатывать новые методы, исходя из задач конкретного исследования по выбранной теме;
- проводить литературный поиск, анализировать информацию, определять задачи, в которых можно применять знания и представления о физико-химическом поведении веществ в конденсированном состоянии;

**Владеть:**

- основами физико-химических методов изучения строения и свойств твердых тел;
- навыками современных методов исследования в области химии твердого тела;
- навыками грамотной интерпретации процессов, происходящих при твердофазных превращениях.

**4. Объем, структура и содержание дисциплины.**

Объем дисциплины составляет 180 академических часов, из которых 88 часов составляет контактная работа аспиранта с преподавателем (72 часа - занятия лекционного типа, 10 часов - групповые консультации, 4 часа - мероприятия промежуточной аттестации, 2 часа – кандидатский экзамен), 92 часа составляет самостоятельная работа аспиранта.

**4.1. Объем и структура дисциплины:**

Таблица 4.1

Показатель объема дисциплины и вид деятельности		Семестр		
		1	2	8
	Объем дисциплины в часах	72	72	36
	Всего занятий в контактной форме, час	42	42	4
	Лекции, час.	36	36	
	Аттестация, час	2	2	2
	Консультации, час.	4	4	2
	Самостоятельная работа, час.	30	30	32
	Вид аттестации	Диф.зачет	Диф.зачет	Экзамен

**4.2. Содержание дисциплины:**

Таблица 4.2

Наименование разделов (тем) дисциплины	Количество часов				Контроль
	Лекции	Сам. работа	Консульт.	Аттестация	

<p>Структура кристаллов. Понятие симметрии. Закрытые и открытые операции симметрии. Точечные группы симметрии. Трансляционная симметрия как характеристический признак кристаллических структур. Совместимость закрытых операций симметрии с трансляционной симметрией. Решётка Бравэ. Элементарная ячейка. Пространственные группы симметрии. Кристаллографический класс. Кристаллографические таблицы. Принципы описания структуры кристаллов. Базы данных кристаллических структур. Влияние симметрии кристаллов на их физические свойства. Принцип Кюри. Принцип Неймана. Связь симметрии и электрических свойств кристаллов: пьезоэлектрики, сегнетоэлектрики, пьезоэлектрики. Симметрия некристаллических твёрдых тел - квазикристаллов и несоизмеримых структур. Структура аморфных твёрдых тел. Понятия ближнего и дальнего порядка. Жидкие кристаллы.</p>	14	18		Опрос по ходу лекций
<p>Типы химических связей и структура кристаллов. Структуры элементов, влияние типа связи на кристаллическую структуру. Описание структур твёрдых тел через плотные упаковки частиц. Структуры соединений, описываемых как плотнейшие упаковки различных шаров (в том числе, шпинели и перовскиты). Правила Полинга. Описание структур молекулярных кристаллов как плотнейших и плотных упаковок. Понятие радиуса атомов и ионов. Различные системы радиусов. Описание структуры в координационных полиэдрах. Основные виды полиэдров, выделяемых в структурах оксидов, халькогенидов, галогенидов, силикатов. Выявление степеней окисления и электронного состояния атомов, входящих в структуру, и получение информации о химических связях в твёрдых телах на основании анализа координационных полиэдров. Структуры цеолитов, соединения типа "гость-хозяин". Водородные связи. Слабые нековалентные взаимодействия.</p>	16	20	2	Опрос по ходу лекций
<p>Различные подходы к описанию электронного строения твёрдых тел. Модели свободных и слабо связанных электронов. Метод кристаллических орбиталей. Роль трансляционной симметрии. Функции Блоха. Локальные энергетические уровни и энергетические зоны. Изоляторы, собственные и примесные полупроводники, металлы. К-пространство. Зоны Бриллюэна. Энергия Ферми, поверхность Ферми.</p>	6	8		Опрос по ходу лекций
<p>Классификация дефектов в кристаллах. Точечные дефекты в кристаллах. Механизмы образования точечных дефектов. Квазихимические равновесия. Тепловые дефекты, дефекты нестехиометрии и примесные дефекты. Центры окраски. Методы изменения концентрации точечных дефектов в кристаллах. Диффузия. Механизмы диффузии и выражения для коэффициента диффузии. Движущие силы диффузии. Законы Фика. Диффузия в поле механических напряжений (эффект Горского). Ионная проводимость, в том числе суперионная проводимость. Собственная и примесная проводимость. Влияние температуры и допирования. Изотерма Коха-Вагнера. Дислокации в кристаллах. Основные виды дислокаций. Вектор</p>	20	26		Опрос по ходу лекций

Бюргерса. Энергия дислокации. Взаимодействия между дислокациями. Основные виды движения дислокаций. Факторы, влияющие на подвижность дислокаций. Различные механизмы пластической деформации. Частичные дислокации. Двойникование в кристаллах. Влияние дислокаций на физические свойства кристаллов и на их поведение в химических реакциях. Структура большеугловых межкристаллитных границ. Структура межфазных границ. Поверхность кристалла. Разрушение в кристаллах.					
Термодинамическая классификация фазовых переходов. Фазовые переходы 1-го и 2-го рода. Представление фазовых переходов на диаграммах состояния. Структурные изменения при фазовых переходах. Классификация фазовых переходов по Бюргеру. Реконструктивные и деформационные переходы. Изменения структуры при изменении температуры и давления. Теория зародышеобразования. Образование метастабильных фаз. Факторы, влияющие на кинетику фазовых переходов. Деформационные превращения. Мартенситные превращения.	16	20	2		Опрос по ходу лекций
Промежуточная аттестация (в 1 и 2 семестре)			4	4	Дифзачеты
Кандидатский экзамен (8 семестр)			2	2	Экзамен
<b>Итого</b>	<b>72</b>	<b>92</b>	<b>10</b>	<b>6</b>	<b>180 час.</b>

### Программа курса лекций.

#### I. Строение кристаллов.

История кристаллографии. Понятие симметрии. Закрытые и открытые операции симметрии. Символьные и графические обозначения элементов симметрии. Матрицы преобразования координат под действием операций симметрии. Понятие группы симметрии. Точечные группы симметрии. Трансляционная симметрия как характеристический признак кристаллических структур. Совместимость закрытых операций симметрии с трансляционной симметрией. Группа трансляций. Решётка Бравэ. Группа Бравэ. Элементарная ячейка. Пространственные группы симметрии. Обозначения групп симметрии. Симморфные и асимморфные группы. Кристаллографический класс. Сингония кристаллической структуры. Симметрия решётки Бравэ и симметрия структуры: общее и различия. Кристаллографические таблицы. Принципы описания структуры кристаллов. Базы данных кристаллических структур. Влияние симметрии кристаллов на их физические свойства. Принцип Кюри. Принцип Неймана. Связь симметрии и электрических свойств кристаллов: пьезоэлектрики, сегнетоэлектрики, пьезоэлектрики. Симметрия некристаллических твёрдых тел - квазикристаллов и несовершенных структур. Сходства и различия в строении кристаллов, квазикристаллов и несовершенных структур. Возможность существования дальнего порядка при отсутствии трансляционной симметрии. Понятия периода смещения несовершенных структур. Использование последовательности Фибоначчи, мозаик Пенроуза для описания структур квазикристаллов. Структура аморфных твёрдых тел. Понятия ближнего и дальнего порядка. Функция радиального распределения. Жидкие кристаллы. Нематики, смектики, холестерики. Применение жидких кристаллов.

#### II. Структура твёрдых веществ и химические связи в них.

Типы химических связей и структура кристаллов. Структуры элементов, влияние типа связи на кристаллическую структуру. Описание структур твёрдых тел через плотные

упаковки частиц. Определение "плотнейшей" и "плотных" упаковок применительно к структурам твёрдых тел. Основные виды упаковок, встречающиеся в твёрдых телах. Основные типы упаковок шаров одного сорта: регулярные и нерегулярные упаковки, понятия слойности упаковки, дефекта упаковки. Виды кристаллических и некристаллических структур, успешно описываемых как плотнейшие упаковки одинаковых шаров. Упаковки шаров разных размеров: факторы, определяющие тип упаковки и мотив заполнения пустот. Структуры соединений, описываемых как плотнейшие упаковки различных шаров (в том числе, шпинели и перовскиты). Правила Полинга. Упаковки частиц сложной формы. Описание структур молекулярных кристаллов как плотнейших и плотных упаковок. Понятие "коэффициента упаковки". Выявление полостей и каналов в структурах с "плотными" и "плотнейшими" упаковками. Понятие радиуса атомов и ионов. Различные системы радиусов. Существующие системы атомных и ионных радиусов, а также инкрементов отдельных атомных группировок и целых молекул. Условность понятий "размера" и "формы" атомов, ионов, молекул. Возможности и ограничения различных методов их оценки из экспериментальных данных и теоретических расчётов. Необходимость использования различных приёмов описания структур твёрдых тел для различных целей, таких как: сравнение структур различных соединений и различных полиморфных модификаций одного и того же соединения; исследование химических связей и специфических взаимодействий в кристаллах; прослеживание эволюции структуры при искажениях в результате внешних воздействий, а также фазовых переходах и химических превращениях; исследование взаимосвязей "кристаллическая структура - физическое свойство" и "кристаллическая структура - химическая реакционная способность. Выделение координационных полиэдров в структурах твёрдых тел. Методы и степень условности выделения координационных полиэдров в структурах твёрдых тел. Основные виды полиэдров, выделяемых в структурах оксидов, халькогенидов, галогенидов, силикатов. Координационные полиэдры в кристаллических и некристаллических структурах. Связь структур некристаллических твёрдых тел со способами их получения. Выявление степеней окисления и электронного состояния атомов, входящих в структуру, и получение информации о химических связях в твёрдых телах на основании анализа координационных полиэдров. Описание всей структуры твёрдого тела как совокупности координационных полиэдров, заполняющих объём а) с образованием пустот; б) полностью (без пустот). Представление кристаллической структуры в виде полиэдров для объяснения нестехиометрии соединения. Понятие о сдвиговых структурах. Представление структуры в полиэдрах для описания распределения "свободного пространства" (каналов, полостей) в структуре. Структуры цеолитов, соединения типа "гость-хозяин". Водородные связи. Слабые нековалентные взаимодействия.

### **III. Электронное строение твёрдых тел.**

Различные подходы к описанию электронного строения твёрдых тел. Модели свободных и слабо связанных электронов. Метод кристаллических орбиталей. Роль трансляционной симметрии. Функции Блоха. Локальные энергетические уровни и энергетические зоны. Изоляторы, собственные и примесные полупроводники, металлы. К-пространство. Зоны Бриллюэна. Энергия Ферми, поверхность Ферми.

### **IV. Дефекты в кристаллах.**

Классификация дефектов в кристаллах. Точечные дефекты в кристаллах. Причины образования. Тепловые точечные дефекты. Концентрация. Механизмы образования точечных дефектов. Собственные и примесные дефекты. Обозначения Крёгера. Квазихимические равновесия. Связь наличия точечных дефектов с нестехиометрией. Влияние температуры и окружающей среды на равновесия точечных дефектов в кристаллах. Центры окраски. Методы изменения концентрации точечных дефектов в

кристаллах. Допирование. Диффузия. Механизмы диффузии и выражения для коэффициента диффузии. Движущие силы диффузии. Законы Фика. Диффузия в поле механических напряжений (эффект Горского). Ионная проводимость, в том числе суперионная проводимость. Собственная и примесная проводимость. Влияние температуры и допирования. Изотерма Коха-Вагнера. Структурные искажения вблизи точечных дефектов. Экспериментальное исследование точечных дефектов в твёрдых телах (электрофизические, спектроскопические, дифракционные методы). Влияние точечных дефектов на реакции с участием твёрдых тел. Дислокации в кристаллах. Основные виды дислокаций, краевые, винтовые, смешанные дислокации, дислокационные петли. Вектор Бюргерса. Энергия дислокации. Взаимодействия между дислокациями. Образование дислокационных сеток, полигонизация. Дислокационные стенки. Основные виды движения дислокаций. Скольжение дислокаций. Барьер Пайерлса-Набарро. Плоскости скольжения дислокаций. Системы скольжения в различных структурах. Переползание дислокаций. Факторы, влияющие на подвижность дислокаций. Деформация кристаллов (основные стадии). Явление наклёпа. Взаимодействия дислокаций с примесными атомами. Различные механизмы влияния примесных атомов на подвижность дислокаций. Взаимодействие дислокаций с дисперсионными частицами. Механизм Орована. Композиционные материалы. Различные механизмы пластической деформации: скольжение дислокаций, дислокационная и диффузионная ползучесть. Карта механизмов пластической деформации. Частичные дислокации. Дефекты упаковки. Энергия дефекта упаковки. Двойникование в кристаллах. Сдвиговые превращения. ГЦК – ГПУ превращение в кобальте. Влияние дислокаций на физические свойства кристаллов и на их поведение в химических реакциях. Экспериментальные методы изучения дислокаций. Эволюция дислокационной структуры при деформации и в процессе термообработки. Процессы образования зёрен. Первичная, вторичная, третичная рекристаллизация. Структура большеугловых межкристаллитных границ. Различные модели: РСУ, полиэдров, 0-решётка, РЗС. Свойства межкристаллитных границ. Структура межфазных границ. Когерентные, полукогерентные, некогерентные границы. Строение некогерентных межфазных границ. Подвижность и свойства межфазных границ. Поверхность кристалла. Строение поверхности, поверхностные состояния. Экспериментальные методы исследования поверхностей. Физические и химические свойства твёрдых тел, определяемые их поверхностью. Влияние объёмных свойств на процессы на поверхности и поверхностных свойств на процессы в объёме. Теория Гриффитса хрупкого разрушения. Эффекты Иоффе и Ребендера. Теория Орована вязкого разрушения. Механизмы образования трещины при пластической деформации.

#### **V. Фазовые переходы в кристаллах.**

Термодинамическая классификация фазовых переходов. Фазовые переходы 1-го и 2-го рода. Представление фазовых переходов на диаграммах состояния. Структурные изменения при фазовых переходах. Классификация фазовых переходов по Бюргеру. Реконструктивные и деформационные переходы. Изменения структуры при изменении температуры и давления. Теория зародышеобразования. Образование метастабильных фаз. Механизмы фазовых переходов. Строение межфазных и межкристаллитных границ. Реконструктивные переходы. Скорость движения некогерентной границы. Факторы, влияющие на кинетику фазовых переходов. Деформационные превращения. Мартенситные превращения. Механизм ГЦК-ГПУ превращения в кобальте. Эффект памяти формы и сверхупругость.

#### **5. Самостоятельная работа обучающихся.**

Таблица 5.1

<i>Виды работ</i>	<i>Количество часов</i>
Работа с конспектами лекций; изучение основной и	92

дополнительной литературы; подготовка к текущему и промежуточному контролю знаний.	
--	--

## **6. Образовательные технологии.**

Занятия проводятся в лекционной форме с элементами интерактивного обучения.

## **7. Фонд оценочных средств для текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины.**

### **7.1. Формы текущего контроля, промежуточной и итоговой аттестации по дисциплине.**

#### **Текущий контроль.**

Текущий контроль осуществляется на лекциях в форме устного контрольного опроса. Цель устного контрольного опроса - оценка самостоятельной работы аспирантов по вопросам тем теоретического содержания.

#### **Промежуточная аттестация.**

Промежуточная аттестация по итогам освоения дисциплины проводится в виде дифференцированного зачета (зачет с оценкой) в конце семестра. Сдача зачета оценивается по шкале: отлично, хорошо, удовлетворительно, неудовлетворительно, и проходит в устной форме. Необходимо подготовить развернутые ответы на 2 вопроса из разных разделов курса. При подготовке ответов можно пользоваться лекциями и любой литературой. Далее основной элемент зачета - беседа для проверки знаний базовых понятий и основ курса. Перед зачетом проводится консультация. Программа курса и список литературы доступны на сайте [www.solid.nsc.ru](http://www.solid.nsc.ru).

#### **Итоговая промежуточная аттестация.**

Итоговая промежуточная аттестация – сдача кандидатского экзамена по специальности «Химия твердого тела». Экзамен сдается в устной форме по программе кандидатского экзамена. Программа кандидатского экзамена разрабатывается в профильном структурном подразделении ИХТТМ СО РАН.

### **7.2. Критерии оценивания.**

При промежуточной аттестации применяются следующие критерии оценивания:

Таблица 7.2

Оценка	Критерии оценки
Отлично	Аспирант строит ответ логично в соответствии с планом, обнаруживает глубокое знание теоретических вопросов. Уверенно отвечает на дополнительные вопросы. При ответе грамотно использует научную лексику.
Хорошо	Аспирант строит ответ в соответствии с планом, обнаруживает хорошее знание теоретических вопросов. Ответ содержит ряд несущественных неточностей. Наблюдается некоторая неуверенность или неточность при ответе на дополнительные вопросы. Речь грамотная с использованием научной лексики.
Удовлетворительно	Ответ аспиранта недостаточно логически выстроен,

	обнаруживается слабость в развернутом раскрытии теоретических вопросов, хотя основные понятия раскрываются правильно. Наблюдается сильная степень неуверенности при ответе на дополнительные вопросы. Научная лексика используется ограниченно.
Неудовлетворительно	Аспирант не может раскрыть содержание основных понятий и теорий. Проявляет стремление подменить научное обоснование проблемы рассуждением бытового плана. Ответ содержит ряд серьезных неточностей. Преобладает бытовая лексика. Аспирант не способен выполнить практическое задание.

## 7.2. Контролирующие материалы.

### Примерные вопросы к зачету.

#### Строение твердых веществ

1. Трансляционная симметрия. Точечные и пространственные группы симметрии. Кристаллографический класс. Кристаллическая система. Решётки Бравэ. Выбор и типы элементарных ячеек. Наиболее распространенные пространственные группы симметрии кристаллических структур неорганических и органических соединений. Понятия аллотропии, полиморфизма, политипизма.
2. Описание кристаллических и некристаллических структур через плотные и плотнейшие упаковки. Размеры атомов и ионов. Координационные числа. Описание кристаллических и некристаллических структур в координационных полиэдрах.
3. Понятие «структурный тип». Примеры соединений, кристаллизующихся в основных структурных типах. Структуры каменной соли ( $\text{NaCl}$ ) и хлорида цезия ( $\text{CsCl}$ ), сфалерита и вюрцита ( $\text{ZnS}$ ), флюорита ( $\text{CaF}_2$ ) и антифлюорита ( $\text{Na}_2\text{O}$ ). Структурные типы арсенида никеля ( $\text{NiAs}$ ), иодида кадмия ( $\text{CdI}_2$ ) и рутила ( $\text{TiO}_2$ ). Структурные типы перовскита ( $\text{CaTiO}_3$ ) и шпинели ( $\text{MgAl}_2\text{O}_4$ ). Общие сведения о структурах силикатов и алюмосиликатов. Твердые растворы замещения, внедрения и вычитания. Соединения внедрения и клатраты.
4. Модулированные структуры (соразмерные и несоразмерные модуляции). Квазикристаллы.
5. Строение аморфных твёрдых веществ. Функция радиального распределения. Структуры жидких кристаллов. Нематики, смектики, холестерики.

#### Структура твёрдых веществ и химические связи в них

1. Ионная модель строения кристаллов, константа Моделунга, энергия ионной решетки. Цикл Борна-Габера. Ковалентная связь. Степень ионности связи. Остаточная (Ван дер Ваальсова) связь. Водородная связь.
2. Зонная энергетическая структура кристалла. Зонная структура кристаллов. Образование зон в результате перекрывания орбиталей. Уровень Ферми. Химический потенциал. Заселенность зон, ее влияние на электрофизические свойства кристаллов. Валентная зона, запрещенная зона, зона проводимости. Металлы и диэлектрики. Собственные и примесные полупроводники. Электронная и дырочная проводимость.

#### Реальная структура кристаллов

1. Точечные дефекты в кристаллах. Основные виды. Беспорядок по Френкелю и Шоттке. Обозначения дефектов по Креггеру и Винку. Равновесная концентрация тепловых точечных дефектов. Энтальпия образования тепловых точечных дефектов.

2. Точечные дефекты, обусловленные нестехиометрией кристаллов. Квазихимические равновесия. Влияние внешней атмосферы на концентрацию точечных дефектов. Основные виды нестехиометрии в оксидах металлов. Влияние температуры на эффективный заряд точечных дефектов.
3. Точечные дефекты, обусловленные присутствием примесных атомов. Влияние примеси на концентрацию точечных дефектов в кристаллах.
4. Диффузия в твердых телах. Основные механизмы диффузии. Выражения для коэффициента диффузии в кристаллах. Энергия активации диффузии.
5. Направленная диффузия в кристаллах. 1-й закон Фика. Диффузия в поле механических напряжений – эффект Горского.
6. Ионная проводимость в кристаллах. Числа переноса. Параметры, которые можно получить из температурной зависимости ионной проводимости. Влияние примесных атомов на ионную проводимость. Изотерма Коха-Вагнера.
7. Взаимная диффузия в твердых телах. Эффект Киркендаля. Методы определения коэффициента диффузии.
8. Диффузия и химические реакции. Роль диффузии и точечных дефектов при реакциях твёрдое + газ и твёрдое + твёрдое.
9. Дислокации. Вектор и контур Бюргерса. Свойства вектора Бюргерса. Энергия краевой и винтовой дислокации.
10. Движение дислокаций: скольжение и переползание. Определение плоскости скольжения. Барьер Пайерлса-Набарро. Наблюдаемые системы скольжения (ГЦК, ОЦК и ГПУ металлы, ионные кристаллы (NaCl, CsCl)).
11. Упругое взаимодействие между дислокациями. Полигонизация, аннигиляция и пересечение дислокаций.
12. Образование дислокаций. Источник Франка-Рида. Методы наблюдения дислокаций.
13. Факторы, влияющие на подвижность дислокаций. Влияние примесных атомов на подвижность дислокаций. Взаимодействие дислокаций с дисперсными частицами.
14. Различные механизмы пластической деформации: скольжение дислокаций, дислокационная и диффузионная ползучесть. Карта механизмов пластической деформации.
15. Частичные дислокации. Дефекты упаковки. Энергия дефекта упаковки. Двойникование в кристаллах. Сдвиговые превращения. ГЦК – ГПУ превращение в кобальте.
16. Теория Гриффитса хрупкого разрушения. Эффекты Иоффе и Ребендера. Теория Орована вязкого разрушения. Механизмы образования трещины при пластической деформации.

#### **Фазовые переходы в твёрдых телах.**

1. Термодинамическая классификация фазовых переходов. Фазовые переходы 1-го и 2-го рода. Представление фазовых переходов на диаграммах состояния. Структурные изменения при фазовых переходах. Классификация фазовых переходов по Бюргеру. Реконструктивные и деформационные переходы. Изменения структуры при изменении температуры и давления.
2. Теория зародышеобразования. Образование метастабильных фаз. Механизмы фазовых переходов. Строение межфазных и межкристаллитных границ.
3. Реконструктивные переходы. Скорость движения некогерентной границы. Факторы, влияющие на кинетику фазовых переходов.
4. Деформационные превращения. Мартенситные превращения. Механизм ГЦК-ГПУ превращения в кобальте. Эффект памяти формы и сверхупругость.

## 8. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины.

### 8.1. Основная литература:

1. Кнотько А.В., Пресняков И.А., Третьяков Ю.Д. Химия твердого тела. – М.: «Академия», 2006. 304 с. [http://www.studmed.ru/download/knotko-av-himiya-tverdogo-tela\\_7bcdd0060dd.html](http://www.studmed.ru/download/knotko-av-himiya-tverdogo-tela_7bcdd0060dd.html)
2. Бокштейн Б.С., Ярославцев А.Б. Диффузия атомов и ионов в твердых телах. М.: МИСИС, 2005. 392 с.
3. Вест А. Химия твердого тела. Теория и приложения : пер. с англ. – М.: Мир, 1988. Ч. 1. – 556 с., Ч. 2. – 338 с.  
<http://booksonchemistry.com/index.php?id1=3&category=inorganic%20chemistry&author=vest-a&book=19881>
4. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. М.: «Наука», 1978. 792 с.  
<https://kaf70.mephi.ru/pdf/kittel.pdf>
5. Ч.Н.Р. Рао, Дж. Гопалакришнан. Новые направления в химии твердого тела. Новосибирск: «Наука», 1990. 520 с. <https://freedocs.xyz/view-docs.php?djvu=438544697>
6. Ковтуненко П.В. Физическая химия твердого тела. Кристаллы с дефектами. М.: «Высшая школа», 1993. 352 с.
7. Фридель Ж. Дислокации. М.: «Мир», 1967. 644 с.
8. Кофстад П. Отклонение от стехиометрии, диффузия и электропроводность в простых оксидах. М.: «Мир». 1975. 397 с.

### 8.2. Дополнительная литература:

1. Третьяков Ю.Д., Пуляев В.И. Введение в химию твердофазных материалов. М.: «Наука». 2006. 400 с.  
<http://www.vixri.com/d3/Tretjakov%20Ju.D.%20%20Vvedenie%20v%20ximiju%20tverdogfaznyx%20materialov.pdf>
2. Келли А., Гровс Г. Кристаллография и дефекты в кристаллах. М.: «Мир», 1979. 486 с.  
<http://booksonchemistry.com/index.php?id1=3&author=kallia-a>
3. Штремель М.А. Прочность сплавов. Ч.1. Дефекты решётки. М.: «МИСИС», 1999. 384 с.  
<https://lib-bkm.ru/load/99-1-0-2557>
5. Ашкрофт Н., Мермин Н. Физика твердого тела. М.: «Мир», 1979, т. II. 486 с.  
<http://mat.net.ua/mat/biblioteka-fizika/Ashkroft-tverdoe-telo-t1.pdf>
6. Бокий Г.Б. Кристаллохимия. М.: «Наука», 1971. 400 с.
7. Чупрунов Е.В., Хохлов А.Ф., Фадеев М.А. Основы кристаллографии. М.: Физматлит, 2006. 500 с. <http://www.vixri.ru/d/Chuprunov%20E.%20V.%20Osnovy%20kristallografii-2004.pdf>
8. Бутягин П.Ю. Химическая физика твердого тела. М.: Изд-во МГУ, 2006. 272 с.
9. Современная кристаллография т. 4. Физические свойства кристаллов. Под ред. Б.К. Вайнштейна, М.: «Наука», 1981. 496 с.
10. Порай-Кошиц М.А. Основы структурного анализа химических соединений. М.: «Высшая школа», 1989. 192 с. <http://crystal.geology.spbu.ru/files/books/poraj-k.zip>
11. Крегер Ф. Химия несовершенных кристаллов. М.: «Мир», 1969. 654 с.  
<http://www.geokniga.org/bookfiles/geokniga-himiya-nesovershennyh-kristallov.djvu>
12. Майер К. Физико-химическая кристаллография. М.: «Металлургия», 1972. 480 с.
13. Фистуль В.И. Физика и химия твердого тела. М.: 1995. т.1. 480 с. т. 2. 320 с.  
[http://www.studmed.ru/download/fistul-vi-fizika-i-himiya-tverdogo-tela-1-tom\\_90ef9ab1a41.html](http://www.studmed.ru/download/fistul-vi-fizika-i-himiya-tverdogo-tela-1-tom_90ef9ab1a41.html)

### 8.3. Программное обеспечение и Интернет-ресурсы:

#### *Программное обеспечение*

1. MS Windows 7.
2. Офисный пакет LibreOffice.
3. Антивирусная программа Dr.Web.
4. Программа просмотра файлов PDF Acrobat Reader.
5. Интернет-браузеры Mozilla Firefox, Google Chrome, Opera.

#### *Профессиональные базы данных и информационные справочные системы*

- Научная электронная библиотека eLibrary.ru (<http://elibrary.ru>);
- Реферативно-библиографическая и наукометрическая (библиометрическая) база данных Web of Science  
[http://apps.webofknowledge.com/UA\\_GeneralSearch\\_input.do?product=UA&search\\_mode=GeneralSearch&SID=N1ueGpOv8ndHm2xXVE2&preferencesSaved=](http://apps.webofknowledge.com/UA_GeneralSearch_input.do?product=UA&search_mode=GeneralSearch&SID=N1ueGpOv8ndHm2xXVE2&preferencesSaved=)
- Реферативно-библиографическая и наукометрическая (библиометрическая) база данных Scopus <https://www.scopus.com/search/form.uri?display=basic>
- Полнотекстовая база данных ScienceDirect – ведущая информационная платформа Elsevier для ученых, преподавателей, студентов (<https://www.sciencedirect.com>);
- Google Scholar – полнотекстовый поиск в научных источниках – журналах, тезисах, книгах (<https://scholar.google.ru>);
- DOAJ – Directory of Open Access Journal – каталог журналов открытого доступа ([www.doaj.org](http://www.doaj.org));
- Электронная библиотека РФФИ <http://www.rfbr.ru/rffi/ru/books>;
- Электронные ресурсы НГУ [http://fen.nsu.ru/posob/htt/xtt\\_reactivity\\_1.pdf](http://fen.nsu.ru/posob/htt/xtt_reactivity_1.pdf)
- Электронные ресурсы удаленного доступа ГПНТБ России <http://www.gpntb.ru/elektronnye-resursy-udalennogo-dostupa.html>
- Электронные каталоги и базы данных ГПНТБ СО РАН [http://webirbis.spsl.nsc.ru/irbis64r\\_01/cgi/cgiirbis\\_64.exe?C21COM=F&I21DBN=CAT&P21DBN=CAT](http://webirbis.spsl.nsc.ru/irbis64r_01/cgi/cgiirbis_64.exe?C21COM=F&I21DBN=CAT&P21DBN=CAT)
- Электронная библиотека ГПНТБ СО РАН <http://www.spsl.nsc.ru/win/nelbib/index-new1.html>;
- Единое окно доступа к образовательным ресурсам Федерального портала Российское образование <http://www.window.edu.ru>;
- Портал фундаментального химического образования России <http://www.chem.msu.ru>.

### **9. Материально-техническое обеспечение дисциплины.**

- Ноутбук, медиа-проектор, экран.
- Доска и набор цветных фломастеров.
- Программное обеспечение для демонстрации слайд-презентаций.

### **10. Язык преподавания.**

Дисциплина преподается на русском языке.