

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ВОРОНЕЖСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
(ФГБОУ ВО «ВГУ»)

УТВЕРЖДАЮ

Заведующий кафедрой
общей и неорганической химии



Семенов В.Н.

21.06.2018 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Б1.В.ОД.12 Химия дефектов

1. Шифр и наименование направления подготовки/специальности: 04.03.01
Химия
 2. Профиль подготовки/специализации: Теоретическая и прикладная химия
 3. Квалификация (степень) выпускника: бакалавр
 4. Форма образования: очная
 5. Кафедра, отвечающая за реализацию дисциплины: общей и неорганической химии
 6. Составители программы Семенова Галина Владимировна, д.х.н., профессор
 7. Рекомендована: НМС химического факультета, протокол № 5 от 24.05.2018
-
-

8. Учебный год: 2020/ 2021 Семестр(-ы): 6

9. Цели и задачи учебной дисциплины: Целью курса химии дефектов является формирование представлений о взаимосвязи между химическим строением вещества и его свойствами. Это развивает у студентов более глубокое представление о природе твердофазного состояния, позволяет сформировать химическое мышление, закрепляя знания, полученные при изучении общей и неорганической химии.

Задачами курса являются: формирование представлений о причинах появления дефектов и их классификации; освоение квазихимического подхода при анализе процессов дефектообразования в твердом теле.

10. Место учебной дисциплины в структуре ООП: цикл Б1.В.ОД.12 – профессиональный цикл, вариативная часть. Необходимо владеть целостным представлением о природе химической связи в неорганических соединениях, их кристаллохимическом строении, уметь использовать знания для интерпретации процессов синтеза и свойств материалов. Материал, рассматриваемый в курсе полезен, а по ряду тематик является основой выполнения студентами квалификационной бакалаврской работы и в их последующей работе.

11. Планируемые результаты обучения по дисциплине/модулю (знания, умения, навыки), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников):

Компетенция		Планируемые результаты обучения
Код	Название	
ОПК-1	Способность использовать полученные знания теоретических основ фундаментальных разделов химии при решении профессиональных задач	<u>знать:</u> - теорию строения твердых тел; основные причины появления дефектов и их классификацию; <u>уметь:</u> - использовать основные понятия и законы химии твердого тела, <u>владеть:</u> <u>навыками</u> квазихимического описания процессов в твердом теле
ОПК-2	Владение навыками химического эксперимента, основными синтетическими и аналитическими методами получения и исследования химических веществ и реакций	<u>знать:</u> - основные причины появления дефектов и их классификацию; <u>уметь:</u> проводить расчеты концентрации дефектов в простых веществах и сложных соединениях методом Броуэра; <u>владеть</u> <u>навыками</u> описания процессов дефектообразования
ОПК-3	Способность к поиску и первичной обработке научной и научно-технической информации	<u>уметь:</u> определять энергии и энтропии образования дефектов, оценивать уровень дефектообразования методами термодинамики <u>владеть</u> <u>навыками</u> сопоставления имеющихся данных о дефектах и их оценки
ПК-8	Способность использовать основные закономерности химической науки и фундаментальные химические понятия при решении конкретных производственных задач	<u>знать:</u> - взаимосвязь природы и концентрации дефектов в твердом теле с внешними параметрами <u>уметь:</u> целенаправленно влиять на отклонение от стехиометрии за счет изменения внешних параметров; <u>владеть</u> <u>навыками</u> описания процессов дефектообразования в зависимости от температуры, давления собственного пара, наличия примесей

12. Объем дисциплины в зачетных единицах/час. (в соответствии с учебным планом) — 3 / 108.

Форма промежуточной аттестации (зачет/экзамен) зачет с оценкой.

13. Виды учебной работы

Вид учебной работы	Трудоемкость			
	Всего	По семестрам		
		№ семестра	№ семестра	...
Аудиторные занятия	54	6		
в том числе:	18	6		
лекции				
практические				
лабораторные	36	6		
Самостоятельная работа	54	6		
Форма промежуточной аттестации (зачет – 0 час. / экзамен – __ час.)		6		
Итого:	108	6		

13.1. Содержание дисциплины

п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела дисциплины
1. Лекции		
1.1	Общие понятия теории дефектов	Совершенные и несовершенные кристаллы. Тепловой беспорядок в кристалле. Равновесные и неравновесные дефекты. Разупорядочение собственное и примесное. Структурные дефекты и их классификация. Точечные дефекты, их характеристика. Эффективные заряды дефектов. Квазихимический метод. Химические потенциалы точечных дефектов. Термодинамическая оценка температурной зависимости концентрации точечных дефектов при разупорядочении по Шоттки и по Френкелю.
1.2	Дефектообразование в кристаллах простых веществ.	Полное термическое равновесие дефектов. Точное и приближенное решение системы уравнений, описывающей равновесие в кристалле простого вещества. Метод Броуэра. Использование метода Броуэра при описании дефектообразования в кристалле простого вещества (вакансии - единственный тип точечных дефектов). Дефектообразование в кристаллах простых веществ, содержащих примесь. Температурная зависимость концентрации дефектов в кристалле полупроводника

		и широкозонного материала. Механизм вхождения примеси в решетку кристалла простого вещества: случай донорной и акцепторной примеси. Частичное равновесие, процессы закалки в кристаллах простых веществ, легированных примесью.
1.3	Теория нестехиометрии.	Типы собственного разупорядочения в кристаллах бинарных соединений стехиометрического состава. Константы квазихимических процессов разупорядочения. Основные понятия теории нестехиометрии. Отображение отклонения от стехиометрии на фазовых диаграммах. Природа процессов, лежащих в основе образования фаз переменного состава: фазы с недостатком металла и фазы с избытком металла. Отклонение от стехиометрии с позиций классической термодинамики.
1.4	Полное равновесие дефектов в беспримесных кристаллах бинарных соединений.	Концентрация дефектов как функция температуры и давления пара летучего компонента для полупроводника и для широкозонного материала. Отклонение от стехиометрии как функция температуры и давления пара летучего компонента. Частичное равновесие, процессы закалки в кристаллах бинарных соединений
1.5	Примесные дефекты в кристаллах бинарных соединений.	Механизмы введения примеси. Дефектообразование в кристаллах бинарных соединений, легированных гетеровалентной примесью в зависимости от давления пара примеси для случая узкозонного и широкозонного материала
2. Лабораторные занятия		
2.1	Метод квазихимических реакций	Номенклатура точечных дефектов. Метод атомных структурных элементов. Метод относительных составляющих единиц. Эффективные заряды дефектов. Правила составления квазихимических уравнений и записи развернутых формул. Основные типы разупорядочения в кристаллах.
2.2	Дефектообразование в кристаллах простых веществ	Метод Броуэра. Легирование простых веществ, факторы, влияющие на механизм вхождения примеси. Частичное равновесие, процессы закалки в кристаллах простых веществ, легированных примесью.
2.3	Нестехиометрия. Влияние температуры и давления собственного пара на отклонение от стехиометрии.	Природа процессов, лежащих в основе образования фаз переменного состава. Диаграммы Броуэра $\ln[i] = f(R)$; $\ln[i] = f(T)$ для полупроводников и широкозонных соединений
2.4	Легирование кристаллов простых веществ и соединений	Механизмы внедрения, замещения и вычитания. Факторы, влияющие на изменение механизма в случае кристалла простого вещества. Метод контролируемых атомных дефектов, контролируемых

электронных дефектов.

13.2. Темы (разделы) дисциплины и виды занятий

№ п/п	Наименование темы (раздела) дисциплины	Виды занятий (часов)				
		Лекции	Практические	Лабораторные	Самостоятельная работа	Всего
1.1	Общие понятия теории дефектов	4		8	12	24
1.2	Дефектообразование в кристаллах простых веществ.	4		8	10	22
1.3	Теория нестехиометрии.	2		6	10	18
1.4	Полное равновесие дефектов в беспримесных кристаллах бинарных соединений.	4		8	10	22
1.5	Примесные дефекты в кристаллах бинарных соединений.	4		8	10	22
	Итого:	18		38	52	108

14. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины:

Организация изучения дисциплины предполагает:

- изучение основных и дополнительных литературных источников;
- работа с конспектами лекций;
- выполнение заданий текущей аттестации;
- текущий контроль успеваемости в форме устного опроса.

15. Перечень основной и дополнительной литературы, ресурсов интернет, необходимых для освоения дисциплины

а) основная литература:

№ п/п	Источник
1	Фахльман Б. Химия новых материалов и нанотехнологии / Б. Фахльман ; пер. с англ. Д.О. Чаркина и В.В. Уточниковой ; под ред. Ю.Д. Третьякова и Е.А. Гудилина.— Долгопрудный : Интеллект, 2011 .— 463 с.
2	Гончаров Е.Г. Краткий курс теоретической неорганической химии/ Е.Г. Гончаров В.Ю. Кондрашин, А.М. Ховив – СПб: Лань, 2017. – 464 с.

б) дополнительная литература:

№ п/п	Источник
3	Ярославцев А.Б. Химия твердого тела / А.Б. Ярославцев.— М. : Науч. мир, 2009. — 322 с.
4	Кнотько А.В. Химия твердого тела/ А.В. Кнотько, И.А.Пресняков, Ю.Д.

	Третьяков. - М. : Академия. - 2006. – 306 с.
5	Синельников Б.М. Физическая химия кристаллов с дефектами/ Б.М.Синельников – М. : Высш. шк., 2005. – 137 с.
6	Крегер Ф. Химия несовершенных кристаллов / Ф. Крегер. - М. : Мир, 1969. - 654 с.
7	Вест А. Химия твердого тела : Теория и приложения: в 2-х ч./ А. Вест. - М. : Мир, 1988. - Ч. 1. - 555 с. ; Ч. 2. – 334 с.

в)информационные электронно-образовательные ресурсы (официальные ресурсы интернет)*:

№ п/п	Ресурс
1.	www.lib.vsu.ru
2.	http://www.chem.ac.ru/Chemistry/Databases/MAIN.ru.html
3.	http://www.iucr.org/resources/cif

16. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы (учебно-методические рекомендации, пособия, задачки, методические указания по выполнению практических (контрольных) работ и др.)

№ п/п	Источник
1	Зломанов В.П. Фазовые равновесия. Химия дефектов в кристалле.: учеб. пособие / В.П. Зломанов. – М. : 2011. – 114 с.
2	Гончаров Е.Г. Химия полупроводников: учеб. пособие / Е.Г. Гончаров, Г.В. Семенова, Я.А. Угай. - Воронеж : Изд-во Воронеж. ун-та, 1995. – 270 с.

17. Информационные технологии, используемые для реализации учебной дисциплины, включая программное обеспечение и информационно-справочные системы (при необходимости)

18. Материально-техническое обеспечение дисциплины:

Мультимедийная техника

19. Фонд оценочных средств:

19.1. Перечень компетенций с указанием этапов формирования и

планируемых результатов обучения

Код и содержание компетенции (или ее части)	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенции посредством формирования знаний, умений, навыков)	Этапы формирования компетенции (разделы (темы) дисциплины или модуля и их наименования)	ФОС* (средства оценивания)

		ние)	
ОПК-1 Способность использовать полученные знания теоретических основ фундаментальных разделов химии при решении профессиональных задач	<u>знать:</u> - теорию строения твердых тел; - основные причины появления дефектов и их классификацию;	1.1,1.2,1.4	Опрос
	<u>уметь:</u> - использовать основные понятия и законы химии твердого тела,	1.2	Контрольная работа №1
	<u>владеть:</u> <u>навыками</u> квазихимического описания процессов в твердом теле	1.2	Контрольная работа №1
ОПК-2 Владение навыками химического эксперимента, основными синтетическими и аналитическими методами получения и исследования химических веществ и реакций	<u>знать:</u> - основные причины появления дефектов и их классификацию;	1.2	Опрос
	<u>уметь:</u> проводить расчеты концентрации дефектов в простых веществах и сложных соединениях методом Броуэра;	1.2,1.3	Контрольная работа №2
	<u>владеть</u> <u>навыками</u> описания процессов дефектообразования	1.2, 1.3	Контрольная работа №2
ОПК-3 Способность к поиску и первичной обработке научной и научно-технической информации	<u>уметь:</u> определять энергии и энтропии образования дефектов, оценивать уровень дефектообразования методами термодинамики <u>владеть</u> <u>навыками</u> сопоставления имеющихся данных о дефектах и их оценки	1.1	опрос
ПК-8 Способность использовать основные закономерности химической науки и фундаментальные химические понятия при решении конкретных производственных задач	<u>знать:</u> - взаимосвязь природы и концентрации дефектов в твердом теле с внешними параметрами	1.2	опрос
	<u>уметь:</u> целенаправленно влиять на отклонение от стехиометрии за счет изменения внешних параметров;	1.2,1.3	Контрольная работа №3
	<u>владеть</u> <u>навыками</u> описания процессов дефектообразования в зависимости от температуры, давления собственного пара, наличия примесей	1.2,1.3	Контрольная работа №3
Промежуточная аттестация			КИМ

19.2 Описание критериев и шкалы оценивания компетенций (результатов обучения) при промежуточной аттестации

Для оценивания результатов обучения на зачете с оценкой используются следующие показатели:

владение теоретическими основами химии твердого тела, способность иллюстрировать ответ примерами, фактами, данными научных исследований, применять теоретические знания для объяснения взаимосвязи свойств материалов с их дефектной структурой и условиями получения.

Для оценивания результатов обучения на экзамене (зачете с оценкой) используется 4-балльная шкала: «отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно».

Соотношение показателей, критериев и шкалы оценивания результатов обучения.

Критерии оценивания компетенций	Уровень сформированности компетенций	Шкала оценок
Студент хорошо владеет теоретическим материалом: понимает суть основных закономерностей, правильно записывает все основные формулы, применяет их к решению практических задач, приводит примеры. Правильно отвечает на все дополнительные вопросы. Ответ соответствует в полной мере всем перечисленным компетенциям.	Повышенный уровень	Отлично
То же, что для оценки «отлично», но студент допускает неточности в формулировках, несущественные ошибки в написании формул или уравнений квазихимических реакций, отвечает не на все дополнительные вопросы. Ответ соответствует не полному освоению компетенций.	Базовый уровень	Хорошо
Студент не знает некоторые разделы курса; допускает многочисленные ошибки при написании формул и уравнений квазихимических реакций, но способен их исправить. Понимает основные закономерности, но с трудом применяет их к решению практических задач. Ответ показывает недостаточное владение компетенциями.	Пероговый уровень	Удовлетворительно
Студент не приобрел никаких новых знаний, либо эти знания фрагментарны. Компетенции не освоены.	–	Неудовлетворительно

19.3 Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующие этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы

19.3.1 Перечень вопросов к зачету:

1. Понятие о твердой фазе. Совершенные несовершенные кристаллы. Тепловой беспорядок в кристалле.
2. Разупорядочение собственное и примесное. Структурные дефекты и их классификация.
3. Точечные дефекты, их характеристика. Нейтральные и заряженные дефекты.
4. Номенклатура точечных дефектов. Основные типы разупорядочения в кристаллах простых веществ.
5. Метод квазихимических реакций. Химические потенциалы точечных дефектов.
6. Термодинамическая оценка температурной зависимости концентрации точечных дефектов - разупорядочение по Шоттки
7. Термодинамическая оценка температурной зависимости концентрации точечных дефектов - разупорядочение по Френкелю
8. Дефектообразование в беспримесных кристаллах простых веществ. Полное равновесие дефектов. Метод Броуэра.
9. Использование метода Броуэра при описании дефектообразования в кристалле простого вещества (вакансии - единственный тип точечных дефектов).
10. Дефектообразование в кристаллах простых веществ, содержащих примесь - температурная зависимость концентрации дефектов в кристалле полупроводника. температурная зависимость концентрации дефектов в кристалле полупроводника
11. Дефектообразование в кристаллах простых веществ, содержащих примесь - температурная зависимость концентрации дефектов в кристалле полупроводника. температурная зависимость концентрации дефектов в кристалле широкозонного материала.
12. Механизм вхождения примеси в решетку кристалла простого вещества.
13. Теория нестехиометрии, основные понятия. Отображение отклонения от стехиометрии на фазовых диаграммах.
14. Природа процессов, лежащих в основе образования фаз переменного состава - фазы с недостатком металла
15. Природа процессов, лежащих в основе образования фаз переменного состава - фазы с избытком металла.
16. Полное равновесие дефектов в беспримесных кристаллах бинарных соединений: концентрация дефектов как функция давления пара летучего компонента - зависимость концентрации дефектов в кристалле полупроводника.
17. Полное равновесие дефектов в беспримесных кристаллах бинарных соединений: концентрация дефектов как функция давления пара летучего компонента - частичное равновесие, процессы закалки в кристаллах бинарных соединений.
18. Полное равновесие дефектов в беспримесных кристаллах бинарных соединений: концентрация дефектов как функция давления пара летучего компонента - зависимость концентрации дефектов в кристалле широкозонного материала.
19. Полное равновесие дефектов в беспримесных кристаллах бинарных соединений: концентрация дефектов как функция давления пара летучего компонента отклонение от стехиометрии как функция давления пара летучего компонента
20. Примесные дефекты в кристаллах бинарных соединений. Механизмы введения примеси

21. Дефектообразование в кристаллах бинарных соединений, легированных гетеровалентной примесью в зависимости от давления пара примеси - случай широкозонного материала.
22. Дефектообразование в кристаллах бинарных соединений, легированных гетеровалентной примесью в зависимости от давления пара примеси: - случай узкозонного материала

19.3.4 Перечень заданий для контрольных работ

1. Напишите с использованием систем Крегера и Риза и учетом возможной ионизации дефектов следующие процессы разупорядочения в кристаллах:

а. по Шоттки Fe_2O_3 ; HgIn_2Te_4 б. по Френкелю CuCl_2

2. Какие типы дефектов можно ожидать у фазы, состав которой описывается формулой $\text{ZnTe}_{0,975}$, если известно, что плотность ее повышена по сравнению со стехиометрическим ZnTe . Напишите развернутую формулу.

3. Полагая, что K_0 в выражениях констант дефектообразования невелики сравнительно с экспонентой, расположите имеющиеся в кристалле дефекты в порядке убывающей концентрации при низкой температуре. Кристалл простого вещества ($\Delta E_0 = 2,2$ эВ), собственные вакансии являются акцепторами ($\Delta H_V = 0,6$ эВ, $\Delta E_A = 0,1$ эВ), легируется донорной примесью ($\Delta H_D = 0,8$ эВ, $\Delta E_D = 0,1$ эВ).

4. При получении ZnNi_2O_4 ZnO был взят в избытке. Составьте развернутую формулу конечного продукта.

5. Чему равна концентрация вакансий в Co_2O_3 , если $[\text{Co}^{3+}]/[\text{Co}^{2+}] = 18 : 1$?

6. Соединение MX ($\Delta E_0 = 1,2$ эВ) находится в равновесии с паром компонента X. В подрешетке X происходит разупорядочение по Френкелю ($\Delta H_F = 2,7$ эВ). Как упростить уравнение электронейтральности при различных значениях P_X ? Постройте (схематично) диаграмму Броуэра в координатах $\ln [i] - \ln P_X$ (i- тип точечных дефектов). Постройте зависимость отклонения от стехиометрии соединения MX от давления пара компонента X при постоянной температуре.

7. Напишите уравнения, отражающие введение примеси (1) в матрицу (2) по методу КАД и методу КЭД:

$\text{InCl}_3 \rightarrow \text{PbCl}_2$ $\text{FeCl}_3 \rightarrow \text{Fe}_2\text{O}_3$ $\text{ZnS} \rightarrow \text{Bi}_2\text{S}_3$

8. Построить диаграммы Броуэра (схематично) для случая вхождения акцепторной примеси в полупроводник MX (дефектообразование по Шоттки).

19.4. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций

Оценка знаний, умений и навыков, характеризующая этапы формирования компетенций в рамках изучения дисциплины осуществляется в ходе текущей и промежуточной аттестаций.

Текущая аттестация проводится в соответствии с Положением о текущей аттестации обучающихся по программам высшего образования Воронежского государственного университета. Текущая аттестация проводится в форме *письменных работ (контрольные, работы)*. Критерии оценивания приведены выше.

Промежуточная аттестация проводится в соответствии с Положением о промежуточной аттестации обучающихся по программам высшего образования.

Контрольно-измерительные материалы промежуточной аттестации включают в себя теоретические вопросы, позволяющие оценить уровень полученных знаний. При оценивании используются качественные шкалы оценок. Критерии оценивания приведены выше.