

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.05 Физико-химические основы управления процессами
дефектообразования в твердом теле**

1. Шифр и наименование специальности: 04.06.01 химия
2. Направленность : неорганическая химия
3. Квалификация (степень) выпускника: исследователь, преподаватель-исследователь
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: 2021-2022

Семестр: 7

9. Цели и задачи учебной дисциплины: Целью дисциплины является формирование представлений о методах управления процессами дефектообразования в твердотельных материалах. Изучение основных закономерностей возникновения дефектов в кристалле позволяет вскрыть связь между их природой, концентрацией и определяемыми ими свойствами. Это развивает более глубокое пред-

ставление о природе твердофазного состояния, способствует формированию научного подхода к решению важных практических задач современной неорганической химии. Задачи дисциплины – систематизация знаний о гетерогенных равновесиях в многокомпонентных системах; выявление природы процессов, приводящих к отклонению от стехиометрии; определение факторов, формирующих структуру и свойства неорганических материалов.

10. Место учебной дисциплины в структуре ППО: дисциплина относится к вариативной части блока 1, обязательные дисциплины. Необходимо владеть целостным представлением о природе химической связи в неорганических соединениях, их кристаллохимическом строении, уметь использовать знания для интерпретации процессов синтеза и свойств материалов, владеть навыками самостоятельной работы по получению и изучению свойств материалов.

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 самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий	<u>знать:</u> основные понятия и законы физико-химического анализа; <u>уметь:</u> - использовать данные о фазовых диаграммах для прогнозирования условий синтеза материалов с заданными свойствами <u>владеть:</u> навыками квазихимического подхода для процессов дефектообразования
УК-1	способность к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях	<u>знать:</u> - теорию строения твердых тел; основные причины появления дефектов <u>уметь:</u> использовать основные понятия и законы химии твердого тела,; <u>владеть</u> навыками описания процессов дефектообразования
УК-4	готовность использовать современные методы и технологии научной коммуникации на государственном и иностранном языках	<u>уметь:</u> определять энергии и энтропии образования дефектов, оценивать уровень дефектообразования на основе данных литературы <u>владеть</u> навыками сопоставления имеющихся данных о дефектах и их оценки
ПК1	Способность к самостоятельному проведению научно-исследовательской работы и получению научных результатов, удовлетворяющих установленным требованиям к содержанию диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук по научной специаль-	<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> навыками описания процессов дефектообразования в зависимости от температуры, давления собственного пара, наличия примесей

	ности 02.00.01 неорганическая химия	
ПК-2	Владение основами теории фундаментальных разделов химии	<u>знать</u> : - основные понятия и законы физико-химического анализа; <u>уметь</u> : - использовать данные о фазовых диаграммах для прогнозирования условий синтеза материалов с заданными свойствами <u>владеть</u> : навыками квазихимического подхода для процессов дефектообразования

12. Объем дисциплины в зачетных единицах/час.(в соответствии с учебным планом) — 4 / 144.

Форма промежуточной аттестации(зачет/экзамен) зачет

13. Виды учебной работы

Вид учебной работы	Трудоемкость			
	Всего	По семестрам		
		№ семестра	№ семестра	...
Аудиторные занятия	4	7		
в том числе:	4	7		
лекции				
практические	-			
лабораторные	-			
Самостоятельная работа	140	7		
Форма промежуточной аттестации (зачет – 0 час. / экзамен – ___ час.)	-			
Итого:	144	7		

13.1. Содержание дисциплины

п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела дисциплины
1. Лекции		
1.1	P-T-x диаграммы фазовых состояний как основа выбора условий синтеза и термообработки кристаллических фаз	Гетерогенные равновесия с участием синтезируемого кристаллического соединения, содержащие сведения о границах областей устойчивости фаз в координатах экспериментальных параметров. Фазовые диаграммы многокомпонентных систем
1.2	Термодинамическая природа нестехиометрических кристаллов как фаз переменного состава	Управление типом и концентрацией собственных дефектов кристалла Легирующие как дополнительная возможность модифицирования свойств с помощью нестехиометрии еще по одному компоненту

2. Самостоятельная работа		
2.1	Твердые тела со структурной разупорядоченностью. Протяженные дефекты	Протяженные дефекты. Структуры кристаллографического сдвига. Дефекты упаковки. Границы блоков и антифазные домены (границы). Гетерогенные включения. Дислокации в кристаллах, основные виды. Контур и вектор Бюргерса. Причины возникновения дислокаций. Движение дислокаций. Влияние дислокаций на свойства кристаллов. Экспериментальные методы исследования дислокаций
2.2	Химические реакции твердых веществ	Общие закономерности скорости гетерогенных химических процессов с участием твердых тел. Роль массопереноса. Процессы, лимитируемые диффузионными и кинетическими стадиями.
2.3	Основные факторы, влияющие на реакционную способность твердых тел.	Методы управления развитием процессов с участием твердых тел. Роль примесей и дефектов. Нетермические способы повышения реакционной способности твердых тел
2.4	Твердофазные материалы	Классификация твердофазных материалов по функциональным свойствам. Ионная проводимость и твердые электролиты. Полупроводники. Классификация полупроводниковых материалов. Диэлектрики. Сегнетоэлектрики, пьезоэлектрики и пьезоэлектрики. Магнитные материалы. Классификация магнитных материалов, основные структуры и свойства. Оптические материалы. Люминесцентные материалы и люминофоры.

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	Р-Т-х диаграммы фазовых состояний как основа выбора условий синтеза и термообработки кристаллических фаз	2			30	32
1.2	Термодинамическая природа нестехиометрических кристаллов как фаз переменного состава	2			30	32
2.1	Твердые тела со структурной разупорядоченностью. Протяженные дефекты				20	20

2. 2	Химические реакции твердых веществ				20	20
2. 3	Основные факторы, влияющие на реакционную способность твердых тел.				20	20
2. 4	Твердофазные материалы				20	20
	Итого:	4			140	144

14. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

Организация изучения дисциплины предполагает:

- изучение основных и дополнительных литературных источников;
- работа с конспектами лекций;
- текущий контроль успеваемости в форме индивидуальной беседы.

15. Перечень основной и дополнительной литературы, ресурсов интернет, необходимых для освоения дисциплины (список литературы оформляется в соответствии с требованиями ГОСТ и используется общая сквозная нумерация для всех видов источников)

а) основная литература:

№ п/п	Источник
1	Ярославцев А.Б. Химия твердого тела / А.Б. Ярославцев.— М. : Науч. мир, 2009. — 322 с.

б) дополнительная литература:

№ п/п	Источник
2	Кнотько А.В. Химия твердого тела/ А.В. Кнотько, И.А.Пресняков, Ю.Д. Третьяков. - М. : Академия, 2006. – 301 с.
3	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.
4	Синельников Б.М. Физическая химия кристаллов с дефектами/ Б.М.Синельников – М. : Высш. шк., 2005. – 137 с.
5	Крегер Ф. Химия несовершенных кристаллов / Ф. Крегер. - М. : Мир, 1969. - 654 с.
6	Захаров А.М. Многокомпонентные металлические системы с промежуточными фазами/ А.М. Захаров. - М. : Metallurgia. 1985. 134 с.

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

№ п/п	Ресурс
1.	www.lib.vsu.ru
2.	http://publ.lib.ru
3.	www.nglib.ru
4.	http://newlibrary.ru

* Вначале указываются ЭБС, с которыми имеются договора у ВГУ, затем открытые электронно-образовательные ресурсы

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	Афиногенов Ю.П. Физико-химический анализ многокомпонентных систем / Ю.П. Афиногенов, Е.Г. Гончаров, Г.В. Семенова, В.П. Зломанов - Учебное пособие. М.: МФТИ, 2006. – 332 с.
2	Зломанов В.П. Фазовые равновесия. Химия дефектов в кристалле.: учеб. пособие / В.П. Зломанов. – М. : 2011. – 114 с.
3	Семенова Г.В. Линейные дефекты./ Г.В. Семенова, Т.П. Сушкова // Учебно - методическое пособие. Воронеж: Изд-во Воронеж. ун-та, 2011. – 42 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 наименование)	ФОС* (средства оценивания)
УК-2 - способность проектировать и осуществлять комплексные исследования, в том числе междисциплинарные, на основе целостного системного научного мировоззрения с использованием знаний в области истории и философии науки	<u>знать</u> : - теорию строения твердых тел; основные причины появления дефектов	Термодинамическая природа нестехиометрических кристаллов как фаз переменного состава	индивидуальная беседа
	<u>уметь</u> : использовать основные понятия и законы химии твердого тела,;	Твердофазные материалы	
	<u>владеть</u> навыками описания процессов дефектообразования	Химические реакции твердых веществ	
УК-4 - готовность использовать современные методы и технологии науч-	<u>уметь</u> : определять энергии и энтропии образования дефектов, оценивать уровень дефектообразо-	Термодинамическая природа нестехиометрических кристаллов как фаз переменного	индивидуальная беседа

ной коммуникации на государственном и иностранном языках	вания на основе данных литературы	состава	
	<u>владеть</u> навыками сопоставления имеющихся данных о дефектах и их оценки	Твердые тела со структурной разупорядоченностью. Протяженные дефекты	
ОПК-1 - способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий	<u>знать:</u> основные понятия и законы физико-химического анализа;	Р-Т-х диаграммы фазовых состояний как основа выбора условий синтеза и термообработки кристаллических фаз	индивидуальная беседа
	<u>уметь:</u> - использовать данные о фазовых диаграммах для прогнозирования условий синтеза материалов с заданными свойствами	Термодинамическая природа нестехиометрических кристаллов как фаз переменного состава	
	<u>владеть:</u> навыками квази-химического подхода для процессов дефектообразования	Термодинамическая природа нестехиометрических кристаллов как фаз переменного состава	
ПК1 - Способность к самостоятельному проведению научно-исследовательской работы и получению научных результатов, удовлетворяющих установленным требованиям к содержанию диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук по научной специальности 02.00.01 неорганическая химия	<u>знать:</u> - взаимосвязь природы и концентрации дефектов в твердом теле с внешними параметрами	Р-Т-х диаграммы фазовых состояний как основа выбора условий синтеза и термообработки кристаллических фаз	индивидуальная беседа
	<u>уметь:</u> целенаправленно влиять на отклонение от стехиометрии за счет изменения внешних параметров;	Основные факторы, влияющие на реакционную способность твердых тел.	
	<u>владеть</u> навыками описания процессов дефектообразования в зависимости от температуры, давления собственного пара, наличия примесей	Термодинамическая природа нестехиометрических кристаллов как фаз переменного состава	
ПК-2 Владение основами теории фундаментальных разделов химии	<u>знать:</u> - основные понятия и законы физико-химического анализа;	Диаграммы фазовых состояний как основа выбора условий синтеза и термообработки кристаллических фаз	индивидуальная беседа
	<u>уметь:</u> - использовать данные о фазовых диаграммах для прогнозирования условий синтеза материалов с заданными свойствами	Термодинамическая природа нестехиометрических кристаллов как фаз переменного состава	
	<u>владеть:</u> навыками квази-химического подхода для процессов дефектообразования	Термодинамическая природа нестехиометрических кристаллов как фаз переменного состава	

Промежуточная аттестация	КИМ
--------------------------	-----

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

Для оценивания результатов обучения на экзамене/зачете используются следующие показатели (ЗУНы из 19.1): владение понятийным аппаратом химии дефектов, физико-химического анализа; теоретическими основами неорганической химии, способность иллюстрировать ответ фактами, данными научных исследований, применять теоретические знания для решения практических задач .

Для оценивания результатов обучения на зачете используется – зачтено, не зачтено. Соотношение показателей, критериев и шкалы оценивания результатов обучения.

Критерии оценивания компетенций	Уровень сформированности компетенций	Шкала оценок
Обучающийся хорошо владеет теоретическим материалом: четко формулирует определения, законы, понимает их суть, правильно записывает все основные формулы, применяет их к решению практических задач, приводит примеры. Умеет находить связи между различными разделами, при ответе привлекает знания из других дисциплин. Правильно отвечает на все дополнительные вопросы. Ответ соответствует всем перечисленным компетенциям.	Повышенный Базовый Пороговый уровни	Зачтено
Ответ на контрольно-измерительный материал не соответствует перечисленным показателям. Обучающийся демонстрирует отрывочные, фрагментарные знания, допускает грубые ошибки. Компетенции не освоены.	–	Не зачтено

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. Структурные дефекты и их классификация. Точечные дефекты, их характеристика.
3. Номенклатура точечных дефектов. Основные типы разупорядочения в кристаллах простых веществ.
4. Метод квазихимических реакций. Термодинамическая оценка температурной зависимости концентрации точечных дефектов

5. Дефектообразование в беспримесных кристаллах простых веществ.. Метод Броуэра.
6. Дефектообразование в кристаллах простых веществ, содержащих примесь. Механизм вхождения примеси в решетку кристалла простого вещества.
7. Теория нестехиометрии, основные понятия. Отображение отклонения от стехиометрии на фазовых диаграммах. Природа процессов, лежащих в основе образования фаз переменного
8. Полное равновесие дефектов в беспримесных кристаллах бинарных соединений: концентрация дефектов как функция давления пара летучего компонента- зависимость концентрации дефектов в кристалле полупроводника.
9. Примесные дефекты в кристаллах бинарных соединений. Механизмы введения примеси.
10. Дислокации. Контур и вектор Бюргерса. Геометрические свойства дислокаций. Типы дислокаций.
11. Движение дислокаций. Образование и размножение дислокаций
12. Твердофазные реакции
13. Условия равновесия фаз в гетерогенной системе. Принцип равновесия Гиббса. Условия стабильного равновесия. Правило фаз Гиббса. Термодинамическая вариантность.
14. Двухкомпонентные системы. Образование двух или нескольких кристаллических форм компонентов. Ограниченная растворимость в жидком состоянии. Синтектика, монотектика
15. Р-Т-х диаграммы двухкомпонентных систем. Сечения и проекции.
16. Системы с непрерывным рядом твердых растворов. Конденсированные и неконденсированные системы. Р-Т-х диаграмма
17. Системы с ограниченной растворимостью в твердом состоянии. Эвтектическое и перитектическое равновесие. Р-Т-х диаграмма
18. Образование химических соединений между компонентами. Системы с конгруэнтно плавящимися соединениями. Р-Т-х диаграмма
19. Системы с образованием инконгруэнтно плавящихся соединений
20. Термический анализ – общая характеристика методов. Метод ДТА. Определение границ фазовых областей с помощью диаграмм «состав – свойство»
21. Двухфазное, трехфазное и четырехфазное равновесия в тройных системах
22. Тройные диаграммы с неограниченной растворимостью.
23. Диаграмма состояния системы с тройной эвтектикой. Изотермические и политермические сечения фазовой диаграммы
24. Триангуляция тройных систем. Квазибинарные сечения Особенности триангуляции в металлических системах.

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 госу-

дарственного университета. Текущая аттестация проводится в форме индивидуальной беседы.

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, позволяющее оценить степень сформированности умений. При оценивании используются качественные шкалы оценок. Критерии оценивания приведены выше.