

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

УТВЕРЖДАЮ

Заведующий кафедрой
общей и неорганической химии



проф. Семенов В.Н.

21. 06. 2018 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Б1.В.16 Химия дефектов

- 1. Код и наименование направления подготовки/специальности:** 04.03.01 Химия
- 2. Профиль подготовки/специализация/магистерская программа:** без профиля
- 3. Квалификация (степень) выпускника:** бакалавр
- 4. Форма обучения:** очно-заочная
- 5. Кафедра, отвечающая за реализацию дисциплины:**
кафедра общей и неорганической химии
- 6. Составитель программы:** Сушкова Татьяна Павловна, доцент кафедры общей и неорганической химии, кандидат химических наук, доцент
- 7. Рекомендована:** НМС химического факультета 24. 05. 2018, протокол № 5
- 8. Учебный год:** 2022/23 **Семестр(ы):** 9

9. Цели и задачи учебной дисциплины: основной целью изучения данной дисциплины является формирование у студентов представлений о влиянии дефектов структуры на свойства материалов и о методах управления процессами дефектообразования в кристаллах. При изучении данного курса теоретические концепции общей и неорганической химии, кристаллохимии, физической химии углубляются и развиваются применительно к твердому состоянию вещества, что способствует формированию научного подхода к анализу и решению проблем современного материаловедения.

10. Место учебной дисциплины в структуре ООП:

«Химия дефектов» является обязательной дисциплиной и относится к вариативной части блока Б1; изучается в 9 семестре.

Для успешного освоения программы дисциплины обучающиеся должны в достаточной мере владеть знаниями по базовым курсам: неорганической химии, физической химии, кристаллохимии, физике, а также по спецдисциплине Физика и химия полупроводников. У обучающихся должны быть частично сформированы компетенции ОПК-2 (Владение навыками химического эксперимента, основными синтетическими и аналитическими методами получения и исследования химических веществ и реакций), ПК-1 (Способность выполнять стандартные операции по предлагаемым методикам), ПК-2 (Владение базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований).

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

Компетенция		Планируемые результаты обучения
Код	Название	
ОПК-2	Владение навыками химического эксперимента, основными синтетическими и аналитическими методами получения и исследования химических веществ и реакций	<p><u>знать:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> - закономерности возникновения дефектов в кристалле, взаимосвязь их природы, концентрации и тех свойств, которые они определяют; <p><u>уметь:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> - теоретически оценивать концентрацию термодинамически равновесных дефектов в кристаллах как функцию внешних параметров (температуры, давления); - прогнозировать свойства материалов в зависимости от их кристаллохимического строения с учетом наличия дефектов структуры; - описывать процессы дефектообразования с помощью квазихимических реакций с использованием номенклатуры Крегера; <p><u>владеть:</u></p> <p>навыками построения диаграмм Броуэра для простых веществ и бинарных соединений.</p>
ПК-1	Способность выполнять стандартные операции по предлагаемым методикам	<p><u>владеть:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> - навыками извлечения информации о природе, концентрации и термодинамических параметрах образования дефектов из результатов экспериментальных измерений.
ПК-2	Владение базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований	<p><u>знать:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> - современные экспериментальные методы наблюдения дефектов в кристаллах и их аппаратное оформление; <p><u>уметь:</u></p> <ul style="list-style-type: none"> - выбирать оптимальные методы исследования и оборудование в зависимости от поставленной задачи.

--	--	--

12. Объем дисциплины в зачетных единицах/час (в соответствии с учебным планом) — 2 / 72.

Форма промежуточной аттестации _____зачет _____

13. Виды учебной работы

Вид учебной работы	Трудоемкость			
	Всего	По семестрам		
		9 сем.		
Аудиторные занятия	32	32		
в том числе:				
лекции	16	16		
практические	16	16		
лабораторные	-	-		
Самостоятельная работа	40	40		
Форма промежуточной аттестации (зачет – 0 час. / экзамен – __ час.)		Зачет		
Итого:	72	72		

13.1. Содержание дисциплины

п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела дисциплины
1	Введение. Химия дефектов как раздел химии твердого тела.	Предмет и задачи изучения дисциплины, связь с другими науками и современными технологиями.
2	Образование дефектов в кристаллах; их классификация и номенклатура	Представление об идеальном кристалле. Причины возникновения дефектов в реальном кристалле. Собственное и примесное разупорядочение. Классификация точечных дефектов. Номенклатура точечных дефектов. Символика Крегера. Метод квазихимических реакций. Линейные дефекты. Виды дислокаций. Контур и вектор Бюргерса. Взаимодействие дислокаций с точечными дефектами. Планарные и объемные дефекты.
3	Термодинамический подход к описанию дефектов в твердом теле	Закон действия масс для квазихимических реакций. Термодинамическая оценка температурной зависимости концентрации точечных дефектов при разупорядочении по Шоттки и по Френкелю.
4	Равновесие точечных дефектов в кристаллах простых веществ	Полное и частичное термическое равновесие дефектов в беспримесном кристалле простого вещества. Метод Броуэра. Собственные и собственно-дефектные полупроводники. Дефектообразование в кристалле простого вещества, содержащего примесные атомы.
5	Дефектообразование в кристаллах бинарных соединений	Типы собственного разупорядочения в кристаллах стехиометрических бинарных соединений. Теория нестехиометрии, основные понятия. Полное внутреннее

		равновесие дефектов в беспримесных кристаллах бинарных соединений. Примесные дефекты в кристаллах бинарных соединений. Механизмы вхождения примеси в кристалл.
6	Экспериментальные методы исследования дефектов	Экспериментальные методы исследования дефектов в кристаллах. Методы металлографии, ДТА, измерения плотности и параметров элементарной ячейки. Измерение электрофизических свойств. Методы РФА и электронной микроскопии.
7	Влияние дефектов на свойства кристаллов	Структурно-чувствительные свойства кристаллов. Дефекты и процессы диффузии в твердой фазе. Влияние дефектов на электрические свойства кристаллов. Электронная и ионная проводимость. Твердые электролиты. Влияние дефектов на теплофизические и механические свойства кристаллов. Влияние дефектов на магнитные и оптические свойства кристаллов. Процессы спекания.

13.2. Темы (разделы) дисциплины и виды занятий

№ п/п	Наименование темы (раздела) дисциплины	Виды занятий (часов)				
		Лекции	Практические	Лабораторные	Самостоятельная работа	Всего
1	Введение. Химия дефектов как раздел химии твердого тела.	-	-		2	2
2	Образование дефектов в кристаллах; их классификация и номенклатура	2	2		6	10
3	Термодинамический подход к описанию дефектов в твердом теле	1	1		4	6
4	Равновесие точечных дефектов в кристаллах простых веществ	3	3		4	10
5	Дефектообразование в кристаллах бинарных соединений	4	4		8	16
6	Экспериментальные методы исследования дефектов	4	3		8	15
7	Влияние дефектов на свойства кристаллов	2	3		8	13
	Итого:	16	16		40	72

14. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

Работа с конспектами лекций, учебниками; решение задач с использованием учебно-методического пособия.

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

а) основная литература:

№ п/п	Источник
1	Семенова Г.В. Химия дефектов : учебное пособие / Г.В. Семенова, Т.П. Сушкова ; Воронежский гос. университет. – Воронеж : Издат. дом ВГУ, 2017. – 130 с.
2	Ярославцев А.Б. Химия твердого тела / А.Б. Ярославцев.— М. : Науч. мир, 2009. — 322 с.

б) дополнительная литература:

№ п/п	Источник
3	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.
4	Кнотько А.В. Химия твердого тела / А.В. Кнотько, И.А. Пресняков, Ю.Д. Третьяков. — М. : Академия, 2006. — 301 с.
5	Третьяков Ю. Д. Введение в химию твердофазных материалов : учеб. пособие / Ю. Д. Третьяков, В. И. Путляев. – М. : Изд-во Моск. ун-та : Наука, 2006. – 399 с.
6	Ковтуненко П.В. Физическая химия твердого тела. Кристаллы с дефектами / П.В. Ковтуненко. — М. : Высш. шк., 1993. — 352 с.
7	Готтштайн Г. Физико-химические основы материаловедения / Г. Готтштайн. — М. : Бинوم. Лаборатория знаний, 2009. — 400 с.
8	Петров А.Н. Твердые материалы. Химия дефектов. Структура и свойства твердых тел : учеб. пособие / А.Н. Петров. — Екатеринбург : Изд-во Урал. ун-та, 2008. — 168 с.
9	Фистуль В.И. Физика и химия твердого тела: в 2-х т. / В.И. Фистуль. – М. : Металлургия, 1995. — Т.1. — 480 с. ; Т.2. — 320 с.
10	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.
11	Крегер Ф. Химия несовершенных кристаллов / Ф. Крегер. — М. : Мир, 1969. — 654 с.

в) информационные электронно-образовательные ресурсы:

№ п/п	Источник
1	www.lib.vsu.ru Сайт Зональной научной библиотеки ВГУ
2	www.plib.ru/library/ Публичная электронная библиотека
3	http://rushim.ru/books/books.htm Электронная библиотека по химии и технике

16. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы

№ п/п	Источник
1	Матвиенко А.А. Типовые задачи по химии твердого тела. Дефекты в кристаллах: учебно-метод. пособие / А.А. Матвиенко. – Новосибирск : изд-во Новосибирского государственного университета, 2011. – 43 с. http://window.edu.ru/resource/856/74856
2	Семенова Г.В. Химия дефектов: методические указания / Г.В. Семенова, Т.П. Сушкова – Воронеж: изд-во Воронежского государственного университета, 2000. – 28 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)
ОПК-2 Владение навыками химического эксперимента, основными синтетическими и аналитическими методами получения и исследования химических веществ и реакций	<u>знать:</u> - закономерности возникновения дефектов в кристалле, взаимосвязь их природы, концентрации и тех свойств, которые они определяют;	2. Образование дефектов в кристаллах; их классификация и номенклатура. 7. Влияние дефектов на свойства кристаллов.	Контрольная работа №1; опрос
	<u>уметь:</u> - теоретически оценивать концентрацию термодинамически равновесных дефектов в кристаллах как функцию внешних параметров (температуры, давления); - прогнозировать свойства материалов в зависимости от их кристаллохимического строения с учетом наличия дефектов структуры; - описывать процессы дефектообразования с помощью квазихимических реакций с использованием номенклатуры Крегера;	2. Образование дефектов в кристаллах; их классификация и номенклатура. 3. Термодинамический подход к описанию дефектов в твердом теле. 4. Равновесие точечных дефектов в кристаллах простых веществ. 5. Дефектообразование в кристаллах бинарных соединений. 7. Влияние дефектов на свойства кристаллов.	Контрольная работа №1; опрос
	<u>владеть:</u> навыками построения диаграмм Броуэра для простых веществ и бинарных соединений.	4. Равновесие точечных дефектов в кристаллах простых веществ. 5. Дефектообразование в кристаллах бинарных соединений.	Контрольная работа №2

ПК-1 Способность выполнять стандартные операции по предлагаемым методикам	<u>владеть:</u> - навыками извлечения информации о природе, концентрации и термодинамических параметрах образования дефектов из результатов экспериментальных измерений.	6. Экспериментальные методы исследования дефектов. 7. Влияние дефектов на свойства кристаллов.	Опрос
ПК-2 Владение базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований	<u>знать:</u> - современные экспериментальные методы наблюдения дефектов в кристаллах и их аппаратное оформление; <u>уметь:</u> - выбирать оптимальные методы исследования и оборудование в зависимости от поставленной задачи.	6. Экспериментальные методы исследования дефектов. 7. Влияние дефектов на свойства кристаллов	Опрос
Промежуточная аттестация			КИМ

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

Для оценивания результатов обучения на зачете используются следующие показатели:

- владение понятийным аппаратом химии дефектов (теоретическими основами дисциплины),
- способность иллюстрировать ответ примерами, фактами, данными научных исследований,
- применять теоретические знания для решения практических задач по оценке концентрации точечных дефектов в кристаллах,
- знание современных методов экспериментального наблюдения дефектов в кристаллах.

Для оценивания результатов обучения на дифференцированном зачете используется шкала: «зачтено», «не зачтено».

Соотношение показателей, критериев и шкалы оценивания результатов обучения.

Критерии оценивания компетенций	Уровень сформированности компетенций	Шкала оценок
Соответствие ответа обучающегося всем перечисленным критериям. Обучающийся в достаточной мере владеет понятийным аппаратом химии дефектов (теоретическими основами дисциплины), способен иллюстрировать ответ примерами, фактами, данными научных исследований, применять теоретические знания для решения практических задач по оценке концентрации точечных дефектов в кристаллах, знает основы современных методов экспериментального наблюдения дефектов в кристаллах.	Базовый уровень и выше	Зачтено

Ответ на контрольно-измерительный материал не соответствует двум из перечисленных показателей. Знания несистематические, отрывочные; в ответах допущены грубые ошибки, которые не устраняются после наводящих вопросов преподавателя.	Низкий уровень	Не зачтено
---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------	----------------	------------

Зачет по дисциплине может быть выставлен на основании положительных оценок по текущим аттестациям (контрольным работам) и устным опросам.

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:

№ п/п	Перечень вопросов к зачету
01	Модель идеального кристалла. Причины возникновения дефектов в реальном кристалле.
02	Виды собственного разупорядочения в кристаллах.
03	Структурные дефекты и их классификация.
04	Точечные дефекты. Заряженные и нейтральные дефекты. Понятие об эффективном заряде.
05	Основные типы атомного разупорядочения в гомоатомных и бинарных кристаллах (по Френкелю, по Шоттки, антиструктурное разупорядочение).
06	Виды дислокаций. Вектор Бюргера. Взаимодействие дислокаций с точечными дефектами.
07	Образование и движение дислокаций в кристалле.
08	Методы выявления дислокаций.
09	Метод атомных структурных элементов Крегера-Винка и символика точечных дефектов. Метод квазихимических реакций.
10	Химические потенциалы точечных дефектов и закон действия масс для квазихимических реакций.
11	Полное внутреннее равновесие дефектов в беспримесном кристалле простого вещества. Метод Броуэра.
12	Полное равновесие дефектов в беспримесном кристалле простого полупроводника (вакансии – акцепторы). Представление о собственных и собственно-дефектных полупроводниках.
13	Дефектообразование в кристалле простого вещества, содержащего примесные атомы. Типы твердых растворов и условия их образования.
14	Полное внутреннее равновесие дефектов в кристалле простого полупроводника, содержащего донорную примесь.

15	Типы собственного разупорядочения в стехиометрических бинарных соединениях.
16	Отклонение от стехиометрии. Область гомогенности фазы. Двусторонние и односторонние, предельные и неопредельные фазы.
17	Формирование фаз с недостатком металла.
18	Формирование фаз с избытком металла.
19	Дефекты и диффузия в твердой фазе.
20	Влияние дефектов на электронную и ионную проводимость кристаллов.
21	Влияние дефектов на процессы спекания.
22	Влияние дефектов на теплофизические свойства кристаллов.
23	Влияние дефектов на магнитные свойства кристаллов.
24	Влияние дефектов на оптические свойства кристаллов. Люминесценция.
25	Влияние дефектов на механические свойства кристаллов.
26	Методы экспериментального наблюдения дефектов в кристаллах. Метод химического травления и ионной бомбардировки поверхности кристалла.
27	Методы экспериментального наблюдения дефектов в кристаллах. Ионная микроскопия (ионный проектор).
28	Методы экспериментального наблюдения дефектов в кристаллах. Сканирующая туннельная микроскопия и атомная силовая микроскопия.
29	Методы экспериментального наблюдения дефектов в кристаллах. Просвечивающая электронная микроскопия.

19.3.2 Примеры контрольных работ

Контрольная работа №1

- Используя метод квазихимических реакций, напишите процессы разупорядочения по Шоттки и по Френкелю в кристалле InAs.
- Как изменится плотность кристаллов при легировании: кристалла NaCl – хлоридом магния; кристалла ZrO₂ – оксидом кобальта (II); кристалла Ga₂O₃ – оксидом циркония (IV)? Какие точечные дефекты при этом образуются?
- Какой тип проводимости следует ожидать в кристалле Nb₂O₃, если известно, что ее величина растет с уменьшением парциального давления кислорода P_{O₂}? Дайте квазихимическую интерпретацию механизма появления носителей зарядов.

Контрольная работа №2

Постройте температурную зависимость концентрации дефектов (диаграмму Броуэра) для простого вещества с шириной запрещенной зоны 0,8 эВ, в котором кроме электронных дефектов образуются вакансии, обладающие акцепторными свойствами, и нейтральные междоузельные атомы. $\Delta H_V=1,2$ эВ, $\Delta H_F=1,8$ эВ, $\Delta E_A=0,2$ эВ. Выведите выражение для расчета температуры перехода от первой области аппроксимации ко второй.

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 контрольных работ и практико-ориентированных заданий. 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.

