

**Программа утверждена на заседании  
Ученого Совета химического факультета  
МГУ имени М.В. Ломоносова  
Протокол № 4 от 29 мая 2014 г.**

### **Рабочая программа дисциплины**

#### **1. Наименование дисциплины: Современные концепции химии твердого тела**

Краткая аннотация:

Цель дисциплины - подготовка высококвалифицированных специалистов, знающих современное состояние химии твердого тела, ее роль в современном материаловедении; фундаментальные основы методов получения кристаллических и аморфных неорганических и органических соединений, гетерофазных систем и материалов, включая наноструктурирование; фундаментальные подходы к изучению твердофазных химических реакций, их механизмов, кинетики и термодинамики, в том числе зародышеобразования и химических реакций на границе раздела твердых фаз; фундаментальные подходы к описанию структуры и динамики дефектов, структуры и свойств поверхности и границ раздела фаз; основы квантово-химического описания и предсказания строения и свойств твердофазных соединений и композиций; фундаментальные принципы современных экспериментальных методов установления закономерностей «состав – структура – свойство» для твердофазных соединений и материалов; уметь интерпретировать собственные и опубликованные в литературе результаты на основе современных представлений о пространственном и электронном строении и реакционной способности твердофазных веществ и материалов; проводить синтез твердофазных веществ и материалов с заданными свойствами; планировать эксперимент, выбирая наиболее информативные методы исследования для решения конкретных задач; применять современное программное обеспечение для обработки экспериментальных данных и проведения теоретических расчетов; пользоваться базами данных и интернет-ресурсами; владеть методами синтеза твердофазных веществ и материалов с заданными свойствами; современными инструментальными методами исследования состава, строения и свойств твердофазных веществ и материалов; навыками проведения эксперимента и обработки экспериментальных данных; способами численного моделирования и теоретического прогнозирования реакционной способности твердофазных веществ и материалов.

2. Уровень высшего образования – подготовка научно-педагогических кадров в аспирантуре.

3. Направление подготовки 04.06.01 Химические науки.

4. Место дисциплины (модуля) в структуре ООП

Вариативная часть ООП, обязательная дисциплина по направленности программы, которую учащийся должен освоить при подготовке к сдаче экзамена кандидатского минимума, блок 1 «Дисциплины (модули)».

5. Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников)

Формируемые компетенции (код компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)
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	З1 (УК-2) <b>Знать</b> методы научно-исследовательской деятельности
ОПК-1 способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий	У1 (ОПК-1) <b>Уметь</b> выбирать и применять в профессиональной деятельности экспериментальные и расчетно-теоретические методы исследования
	В1 (ОПК-1) Владеть навыками поиска (в том числе с использованием информационных систем и баз данных) и критического анализа информации по тематике проводимых исследований
ПК-16 способность к самостоятельному проведению научно-исследовательской работы и получению научных результатов, удовлетворяющих установленным требованиям к содержанию диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук по направленности (научной специальности) 02.00.21 Химия твердого тела	З1 (ПК-16) <b>Знать</b> современное состояние науки в области химии твердого тела
	З4 (ПК-16) Знать фундаментальные подходы к описанию структуры и динамики дефектов, структуры и свойств поверхности и границ раздела фаз
	З5 (ПК-16) <b>Знать</b> основы квантово-химического описания и предсказания строения и свойств твердофазных соединений и композиций
	У1 (ПК-16) <b>Уметь</b> планировать и проводить синтез твердофазных веществ и материалов с заданными свойствами с учетом закономерностей «состав – структура – свойство»
	У2 (ПК-16) <b>Уметь</b> интерпретировать собственные и опубликованные в лите-

	ратуре результаты, на основе современных представлений о пространственном и электронном строении и реакционной способности твердофазных веществ и материалов
	<i>В1 (ПК-16) Владеть</i> методами синтеза твердофазных веществ и материалов с заданными свойствами; современными инструментальными методами исследования состава, строения и свойств твердофазных веществ и материалов
	<i>В2 (ПК-16) Владеть</i> навыками публичного представления результатов научной деятельности перед специалистами в области химии твердого тела и материаловедения

6. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества академических, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся:

*Объем дисциплины (модуля) составляет 5 зачетных единиц, всего 180 часов, из которых 74 часа составляет контактная работа аспиранта с преподавателем (36 часов - занятия лекционного типа, 16 часов – занятия семинарского типа, 20 часов - мероприятия текущей и промежуточной аттестации в виде научно-практических конференций), 106 часов составляет самостоятельная работа аспиранта..*

7. Входные требования для освоения дисциплины (модуля), предварительные условия (если есть).

В специалитете или магистратуре должны быть освоены общие курсы «Неорганическая химия», «Коллоидная химия» и «Физическая химия», на 1-2 годах аспирантуры должны быть прослушаны спецкурсы по выбору, посвященные физико-химическим методам исследования твердофазных материалов, строению кристаллических веществ, методам синтеза материалов.

8. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических или астрономических часов и виды учебных занятий

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины (модуля),  форма промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)	Всего (часы)	В том числе								
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы из них					Самостоятельная работа обучающегося, часы из них			
		Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа	Групповые консультации	Индивидуальные консультации	Учебные занятия, направленные на проведение текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации	Всего	Выполнение домашних заданий	Подготовка рефератов и т.п..	Всего
Раздел 1. Разработка новых методов синтеза и дизайн новых твердофазных материалов	56	12	4	-	-	6	22	-	34	34
Раздел 2. Исследование твердофазных химических реакций, топохимических реакций, динамики и диффузии молекул, ионов и атомов в твердофазных соединениях и материалах	52	10	4	-	-	6	20	-	32	32
Раздел 3. Исследование пространственного и электронного строения	34	6	4	-	-	4	14	-	20	20

твердофазных соединений и материалов, структуры и динамики дефектов, в том числе с привлечением квантово-химического описания										
Раздел 4. Использование современных методов исследования для установления взаимосвязи между составом, строением и свойствами твердофазных веществ и материалов, в том числе для нанокристаллических и наноструктурированных объектов	38	8	4	-	-	4	16	-	22	22
<b>Итого</b>	<b>180</b>	36	16			20	<b>72</b>		106	<b>106</b>

9. Образовательные технологии (отметить если применяется электронное обучение и дистанционные технологии).

Используются следующие технологии: лекции-демонстрации и интерактивные лекции. Преподавание дисциплины проводится в форме авторских курсов по программам, которые составлены на основе результатов исследований, проведенных научными школами МГУ.

10. Учебно-методические материалы для самостоятельной работы аспирантов.

Аспирантам предоставляется программа курса, план занятий и перечень тем рефератов. По теме каждой лекции указывается материал в источниках из списков основной и вспомогательной литературы, а также из интернет-ресурсов. Аспирантам предоставляет-

ся также программа-минимум кандидатского экзамена, а также список дополнительных вопросов и примеры контрольных заданий, предлагаемые на экзамене.

#### 11. Ресурсное обеспечение:

- Перечень основной и дополнительной учебной литературы

##### **Основная литература**

1. А.В.Кнотько, И.А.Пресняков, Ю.Д.Третьяков. Химия твердого тела. М: Академия, 2006.
2. Третьяков Ю.Д, Путляев В.И. Введение в химию твердофазных материалов. М.: Наука, 2006. Степанов Н.Ф. Квантовая механика и квантовая химия. М.: Мир, Изд-во МГУ. 2001.
3. Вест А. Химия твердого тела. Теория и приложения. В 2 частях. М.: Мир, 1988.
4. Ч.Н.Р. Рао, Дж. Гопалакришнан. Новые направления в химии твердого тела. Новосибир.1990.-520с.
5. Ю.Д. Третьяков. Твердофазные реакции. М. 1978.
6. Р. Драго. Физические методы в химии М. Мир, 1981
7. Ф. Креггер. Химия несовершенных кристаллов М, Мир, 1969.
8. В.И. Фистуль. Физика и химия твердого тела. М. 1995. т.1 -480с.. т.2 -320с.

##### **Дополнительная литература**

1. И.П. Суздалев. НАНОТЕХНОЛОГИЯ. Физико-химия нанокластеров, наноструктур и наноматериалов. Москва 2005.
2. В.Б. Фенелонов. Введение в физическую химию формирования супрамолекулярной структуры адсорбентов и катализаторов. Новосибирск, 2002.
3. А.А. Елисеев, А.В. Лукашин. Функциональные наноматериалы. М.: Физматлит, 2010
4. А.И. Гусев. Наноматериалы, наноструктуры, нанотехнологии. М.: Физматлит, 2009
5. А. Уэллс. Структурная неорганическая химия М. Изд. Мир т.1-3, 1987- 1988 гг.
6. П.В. Ковтуненко. Физическая химия твердого тела. Кристаллы с дефектами. М.1993.-352с.
7. В.М. Жуковский, А.Н. Петров. Введение в химию твердого тела. Свердловск.1978.-117с.
8. В.Н.Чеботин. Физическая химия твердого тела. М., «Химия», 1982.
9. В.А. Губанов, Э.З. Курмаев, А.Л. Ивановский. Квантовая химия твердого тела. М. 1984. -304с.
10. В.М. Смирнов. Химия наноструктур. Синтез, строение, свойства. СПб. 1996.105с.
11. А. Фельц. Аморфные и стеклообразные неорганические твердые тела. М. 1986.-558с.

## Периодическая литература

Журналы «Успехи химии», «Журнал неорганической химии», «Неорганические материалы», «Кристаллография», «Известия РАН. Серия химическая», «Доклады Академии наук. Серия химия», «Журнал структурной химии», Journal of Solid State Chemistry, Materials Chemistry, Mendeleev Communications, Scientific Reports, Journal of Materials Chemistry, Journal of Alloys and Compounds, Inorganic Chemistry, European Journal of Inorganic Chemistry, Chemistry - A European Journal, Journal of Crystal Growth, Thin Solid Films.

- Перечень используемых информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса, включая программное обеспечение, информационные справочные системы (при необходимости):

Используются следующие технологии: проблемно-ориентированные лекции, лекции-демонстрации, интерактивные лекции. Лекции читаются ведущими учеными Московского университета и приглашенными профессорами – российскими и зарубежными учеными с мировым именем, специализирующимися в области современной химии твердого тела

Интернет-ресурсы:

- Международный союз кристаллографии: [www.iucr.org](http://www.iucr.org)
- Сайт разработчиков программы PLATON: [www.cryst.chem.uu.nl/spek/platon](http://www.cryst.chem.uu.nl/spek/platon)
- Сайт разработчиков программ SHELX: [shelx.uni-ac.gwdg.de/SHELX](http://shelx.uni-ac.gwdg.de/SHELX)
- Кембриджская база структурных данных: [www.ccdc.cam.ac.uk](http://www.ccdc.cam.ac.uk)
- Сайт разработки системы CALPHAD: [www.calphad.org](http://www.calphad.org)
- Сайт международного сообщества по вычислительной термодинамике: [www.opencalphad.com](http://www.opencalphad.com)
- Доступ к различным базам данных по материаловедению: [materials.springer.com](http://materials.springer.com)
- Сайт разработки и распространения программы Thermo-Calc: [www.thermocalc.com](http://www.thermocalc.com)
- База данных ИВТАНТЕРМО: [www.ihed.ras.ru](http://www.ihed.ras.ru)

- Описание материально-технической базы.

Лекции проводятся в аудитории, оснащенной мультимедийным оборудованием.

Вспомогательный материал в виде презентаций доступен аспирантам на сайте

1. [http://www.inorg.chem.msu.ru/index\\_r.php?topic=asp](http://www.inorg.chem.msu.ru/index_r.php?topic=asp)
2. [http://www.inorg.chem.msu.ru/index\\_r.php?topic=col](http://www.inorg.chem.msu.ru/index_r.php?topic=col)
3. <http://www.chem.msu.ru/rus/teaching/general-spec.html>

12. Язык преподавания - русский

### 13. Преподаватели.

ведущий научный сотрудник, доктор химических наук Кузнецов Алексей Николаевич, e-mail [alexei@inorg.chem.msu.ru](mailto:alexei@inorg.chem.msu.ru), тел. (495)9395502

профессор, доктор химических наук Кауль Андрей Рафаилович, e-mail [kaul@inorg.chem.msu.ru](mailto:kaul@inorg.chem.msu.ru), тел. (495)9391492

профессор, доктор химических наук Дунаев Сергей Федорович, [dunaev@general.chem.msu.ru](mailto:dunaev@general.chem.msu.ru)

доцент, доктор физико-математических наук Ионов Сергей Геннадьевич, [ionov@highp.chem.msu.ru](mailto:ionov@highp.chem.msu.ru)

#### **Фонды оценочных средств, необходимые для оценки результатов обучения**

Курс является ключевым для подготовки и сдачи кандидатского минимума по специальности 02.00.21 Химия твердого тела. Программа кандидатского экзамена вынесена отдельно в связи с тем, что в учебном плане по направленности (профилю) Химия твердого тела сдача экзамена выделена отдельным структурным элементом учебного плана.

1. Планируемые результаты обучения для формирования компетенций п.5 и соответствующие им критерии оценивания приведены в Приложении 1.
2. Образцы оценочных средств для текущего контроля усвоения материала.

#### *Примерные темы рефератов*

1. Кремний в солнечной энергетике: от моно-кремния к нанокремнию.
2. Современные методы анализа материалов в атомно-силовой микроскопии.
3. Использование рентгеновской и электронной томографии для исследования структуры материалов.
4. Интеркаляционные катодные материалы для литий-ионных аккумуляторов.
5. Термоэлектрические материалы на основе халькогенидов переходных металлов.
6. Направленное формирование структуры металлических сплавов в ходе термомеханической обработки.
7. Роль квантового ограничения в формировании свойств нанокристаллов различной размерности

#### *Примерные темы устных докладов на научном семинаре*

1. Силикаты и германаты редкоземельных элементов со структурой апатита как перспективные твердые электролиты.
2. Ферриты и их газочувствительные свойства.
3. Роль оксидов металлов как компонентов электрокатализаторов для твёрдополимерных топливных элементов.

4. Современные катодные материалы для литий-ионных аккумуляторов и методы их модификации при помощи добавок.
5. Применение метода импедансной спектроскопии для исследования систем с ионным транспортом и электродных процессов.
6. Жаростойкие и жаропрочные сплавы для современных технологических применений.
7. Дизайн высококоэрцитивных металлических сплавов на основе РЗМ.

### *Примеры ПКЗ.*

Задание 1. Используя Р-Т-х фазовую диаграмму определите условия получения монокристаллов полупроводникового соединения р- или n-типа проводимости. Предложите методы определения фазового состава, химического состава, распределения элементов по объему кристаллов, типа, концентрации и подвижности носителей заряда.

Задание 2. Предложите алгоритм синтеза из жидкой фазы нанокристаллического оксидного материала с заданными параметрами микроструктуры. Укажите какие стадии этого процесса определяют параметры микроструктуры. Обоснуйте выбор параметров синтеза: температуры, давления, пересыщения, состава реагентов. Предложите методы экспериментального определения параметров микроструктуры, укажите необходимые справочные данные программное обеспечение.

Задание 3. Проведите термодинамическую оценку возможности протекания твердофазной реакции. Предложите экспериментальное оформление для ее осуществления. Предложите подходящий метод интенсификации твердофазного процесса.

### **Методические материалы для проведения процедур оценивания результатов обучения**

В рамках изучения каждого из разделов аспирантами готовятся рефераты (аналитические обзоры) по заданным темам, предложенным с учетом тематики аспирантского исследования. Разделы заканчиваются научно-практическими конференциями с участием преподавателей и научных сотрудников кафедры, на которых аспиранты делают доклады, которые обсуждаются участниками. Жюри из состава присутствующих сотрудников кафедры оценивает каждого аспиранта в аспектах качества подготовки реферата, качества доклада, корректности ответов на вопросы, а также его участие в обсуждении докладов других аспирантов. Уровень подготовки аспиранта и уровень его участия в конференции оценивается на «отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно». По итогам семестра оценку "зачтено" получают аспиранты, участвовавшие во всех конференциях и получившие оценки не ниже, чем "удовлетворительно". Ведомость приема зачета подписывается членами комиссии

Приложение 1.

Оценочные средства для промежуточной аттестации по дисциплине Современные концепции химии твердого тела на основе карт компетенций выпускников

РЕЗУЛЬТАТ ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)	КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТА ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю) и ШКАЛА оценивания					ПРОЦЕДУРЫ ОЦЕНИВАНИЯ*
	1	2	3	4	5	
<i>31 (УК-2) Знать</i> методы научно-исследовательской деятельности	Отсутствие знаний	Фрагментарные представления о методах научно-исследовательской деятельности	Неполные представления о методах научно-исследовательской деятельности	Сформированные, но содержащие отдельные пробелы представления о методах научно-исследовательской деятельности	Сформированные систематические представления о методах научно-исследовательской деятельности	Доклады на конференциях, участие в групповых дискуссиях
<i>У1 (ОПК-1) Уметь</i> выбирать и применять в профессиональной деятельности экспериментальные и расчетно-теоретические методы исследования	Отсутствие умений	Фрагментарное использование умения выбирать и использовать экспериментальные и расчетно-теоретические методы для решения научной задачи	В целом успешное, но не систематическое использование умения выбирать и использовать экспериментальные и расчетно-теоретические методы для решения научной задачи	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы использование умения выбирать и использовать экспериментальные и расчетно-теоретические методы для решения научной задачи	Сформированное умение выбирать и использовать экспериментальные и расчетно-теоретические методы для решения научной задачи	Подготовка рефератов (аналитических обзоров), участие в групповых дискуссиях на конференциях

	1	2	3	4	5	
<i>B1 (ОПК-1)</i> Владеть навыками поиска (в том числе с использованием информационных систем и баз данных) и критического анализа информации по тематике проводимых исследований	Отсутствие навыков	Отдельные навыки поиска и анализа собранной информации	Владение навыками проведения простейших видов поиска и анализа информации с использованием ограниченного числа баз данных	В целом успешные и разнообразные, но содержащие отдельные пробелы навыки поиска и критического анализа собранной информации	Сформированное и полное владение навыками поиска информации с использованием различных баз данных и его критического анализа, в том числе с применением математических методов	Подготовка рефератов и их защита в виде докладов на конференциях
<i>31 (ПК-16)</i> <b>Знать</b> современное состояние науки в области химии твердого тела	Отсутствие знаний	Фрагментарные представления о современном состоянии науки в области химии твердого тела	Неполные представления о современном состоянии науки в области химии твердого тела	Сформированные, но содержащие отдельные пробелы представления о современном состоянии науки в области химии твердого тела.	Сформированные систематические представления о современном состоянии науки в области химии твердого тела	Доклады на конференциях, ответы на вопросы, участие в групповых дискуссиях
<i>34 (ПК-16)</i> <b>Знать</b> фундаментальные подходы к описанию структуры и динамики дефектов, структуры и свойств поверхности и границ раздела фаз	Отсутствие знаний	Отрывочные не систематические знания об описании структуры и динамики дефектов, структуры и свойств поверхности и границ раздела фаз	Неглубокие знания об описании структуры и динамики дефектов, структуры и свойств поверхности и границ раздела фаз, достаточные только в простых случаях	Довольно полные, но содержащие отдельные пробелы знания об описании структуры и динамики дефектов, структуры и свойств поверхности и границ раздела фаз	Полные и систематические знания об описании структуры и динамики дефектов, структуры и свойств поверхности и границ раздела фаз	Составление и защита рефератов на научно-практических конференциях

1	2	3	4	5	6	7
<b>35 (ПК-16) Знать</b> основы квантово-химического описания и предсказания строения и свойств твердофазных соединений и композиций	Отсутствие знаний	Фрагментарные несистематические знания основ квантовохимического описания строения и свойств твердых веществ	В целом почти систематические, но неглубокие знания основ квантовохимического описания строения и свойств твердых веществ	Систематические, но содержащие отдельные пробелы знания основ квантовохимического описания строения и свойств твердых веществ	Сформированные и систематические знания основ квантовохимического описания и предсказания строения и свойств твердых веществ	Составление и защита рефератов на научно-практических конференциях
<b>У1 (ПК-16) Уметь</b> планировать и проводить синтез твердофазных веществ и материалов с заданными свойствами с учетом закономерностей «состав – структура – свойство»	Отсутствие умений	Фрагментарные способности планировать и проводить отдельные синтезы твердофазных веществ и материалов с заданными свойствами	В простых случаях успешные, но неразвитые способности планировать и проводить синтезы твердофазных веществ и материалов с заданными свойствами	Довольно полные и успешные, но содержащие отдельные пробелы способности планировать и проводить синтезы твердофазных веществ и материалов с заданными свойствами	Систематические и полные способности планировать и проводить различные синтезы твердофазных веществ и материалов с заданными свойствами	Подготовка и защита рефератов
<b>У2 (ПК-16) Уметь</b> интерпретировать собственные и опубликованные в литературе результаты, на основе современных представлений о пространственном и электронном строении и реакционной способности	Отсутствие умений	Отдельные несистематические и малоуспешные способности интерпретировать результаты научных исследований в области химии твердого тела	Относительно разнообразные, но несформированные и поверхностные умения интерпретировать результаты научных исследований в области химии твердого тела, успешные только в простых ситуациях	В целом успешные и систематические, но еще не достаточно сформированные умения интерпретировать результаты научных исследований в области химии твердого тела	Сформированные и систематические умения интерпретировать результаты научных исследований в области химии твердого тела на основе современных теоретических представлений	Подготовка и защита рефератов, доклады на конференциях

твёрдофазных веществ и материалов						
<b>В1 (ПК-16) Владеть</b> методами синтеза твёрдофазных веществ и материалов с заданными свойствами; современными инструментальными методами исследования состава, строения и свойств твёрдофазных веществ и материалов	Отсутствие умений и знаний	Отрывочные представления о современных синтетических методах химии твёрдого тела и закономерностях протекания твердофазных реакций	Содержащие пробелы представления о современных методах синтеза твёрдофазных веществ и проведения твердофазных реакций, несистематические знания о закономерностях протекания твердофазных процессов	В целом сформированные, но содержащие отдельные пробелы представления о современных методах синтеза твёрдофазных веществ и проведения твердофазных реакций, знание основных закономерностей протекания твердофазных реакций и влияние условий синтеза на свойства продуктов	Полностью сформированное систематическое знание современных методах синтеза твёрдофазных веществ и проведения твердофазных реакций; знание закономерностей протекания твердофазных реакций, позволяющее вести направленный синтез материалов	Доклады на конференциях, ответы на вопросы, участие в групповых дискуссиях
<b>В2 (ПК-16) Владеть</b> навыками публичного представления результатов научной деятельности перед специалистами в области химии твёрдого тела и материаловедения	Отсутствие умений	Владение только частичными навыками публичного представления результатов научной деятельности в области химии твёрдого тела и материаловедения	Несистематические и неуверенные навыки публичного представления результатов научной деятельности перед специалистами в области химии твёрдого тела и материаловедения	В целом успешное, хотя и не совсем свободное, владение публичным представлением результатов научной деятельности в области химии твёрдого тела и материаловедения	Полностью сформированные навыки публичного представления результатов научной деятельности перед специалистами в области химии твёрдого тела и материаловедения	Доклады на конференциях, ответы на вопросы, участие в групповых дискуссиях.