

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования  
«Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова»  
Химический факультет

УТВЕРЖДАЮ

Декан химического факультета,  
Чл.-корр. РАН, профессор



/С.Н. Калмыков/

«22» мая 2020 г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)**

**Химия и структура твердого тела**

**Уровень высшего образования:**

Магистратура

---

**Направление подготовки (специальность):**

04.04.01 Химия

**Направленность (профиль) ОПОП:**

Химия твердого тела

**Форма обучения:**

очная

---

Рабочая программа рассмотрена и одобрена  
Учебно-методической комиссией факультета  
(протокол №3 от 12.05.2020)

Москва 2020

Рабочая программа дисциплины разработана в соответствии с самостоятельно установленным МГУ образовательным стандартом (ОС МГУ) для реализуемых основных профессиональных образовательных программ высшего образования по направлению подготовки / специальности 04.04.01 «Химия» (программа магистратуры), утвержденного приказом МГУ от 30 августа 2019 года № 1033.

Год (годы) приема на обучение 2020/2021

---

1. Место дисциплины (модуля) в структуре ООП: вариативная часть ООП, блок ПД

2. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников). Соответствие результатов обучения по данному элементу ОПОП результатам освоения ОПОП (в форме компетенция – индикатор - ЗУВ) указано в Общей характеристике ОПОП.

| Компетенция  | Индикатор достижения  | Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)  |
|--|---|---|
| СПК-1.М. Способен использовать представления о взаимосвязи электронного строения, кристаллической структуры, физических и химических свойств твердых тел для синтеза новых веществ и материалов с заданными свойствами | СПК-1.М.1. объясняет физические свойства твердых тел на основе информации об их электронном строении и кристаллической структуре    | <b>Знать:</b> современные теории, описывающие структуру, электронное строение и свойства твердых тел  |
|  | СПК-1.М.2. прогнозирует физические свойства твердых тел на основе информации об их электронном строении и кристаллической структуре | <b>Уметь:</b> находить взаимосвязи между составом, строением, физическими и химическими свойствами твердых тел и объяснять их<br><b>Владеть:</b> Способами предсказания физических и химических свойств твердотельных материалов на основе их состава и структуры |

3. Объем дисциплины (модуля) составляет 4 зачетных единицы, всего 144 часа, из которых 90 часов составляет контактная работа студента с преподавателем (38 часов занятия лекционного типа, 38 часов – занятия семинарского типа, 2 часа – групповые консультации, 8 часов – текущий контроль успеваемости, 4 часа – промежуточный контроль успеваемости), 54 часов составляет самостоятельная работа студента.

4. Входные требования для освоения дисциплины (модуля), предварительные условия.

Обучающийся должен

**Знать:** общие положения, законы и теории неорганической химии, квантовой химии и строения молекул.

**Уметь:** применять математические методы для решения химических задач.

**Владеть:** навыками использования базовых физических знаний при решении химических проблем.

5. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам.

| Наименование и краткое содержание | Всего | В том числе |
|-----------------------------------|-------|-------------|
|-----------------------------------|-------|-------------|

| жание разделов и тем дисциплины (модуля),<br><br>форма промежуточной аттестации по дисциплине (модулю) | (часы)    | Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы<br>из них |                           |                        |                             |  | Самостоятельная работа обучающегося, часы<br>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    |
| Тема 1.  | <b>11</b> | 4   | 4                         |                        |                             |  | <b>8</b>  | 3                           |                             | <b>3</b> |
| Тема 2.  | <b>12</b> | 4   | 4                         |                        |                             | 2  | <b>10</b>   | 2                           |                             | <b>2</b> |
| Тема 3.  | <b>11</b> | 4   | 3                         |                        |                             | 2  | <b>9</b>  | 2                           |                             | <b>2</b> |
| Тема 4.  | <b>9</b>  | 3   | 3                         |                        |                             |  | <b>6</b>  | 3                           |                             | <b>3</b> |
| Тема 5.  | <b>10</b> | 4   | 4                         |                        |                             |  | <b>8</b>  | 2                           |                             | <b>2</b> |
| Тема 6.  | <b>12</b> | 4   | 4                         |                        |                             | 2  | <b>10</b>   | 2                           |                             | <b>2</b> |
| Тема 7.  | <b>8</b>  | 3   | 3                         |                        |                             |  | <b>6</b>  | 2                           |                             | <b>2</b> |
| Тема 8.  | <b>10</b> | 3   | 3                         |                        |                             | 2  | <b>8</b>  | 2                           |                             | <b>2</b> |
| Тема 9.  | <b>8</b>  | 3   | 3                         |                        |                             |  | <b>6</b>  | 2                           |                             | <b>2</b> |
| Тема 10.   | <b>8</b>  | 3   | 3                         |                        |                             |  | <b>6</b>  | 2                           |                             | <b>2</b> |

|   |            |    |    |   |  |    |           |    |  |           |
|---|------------|----|----|---|--|----|-----------|----|--|-----------|
| Тема 11.                                      | <b>9</b>   | 3  | 4  |   |  |    | <b>7</b>  | 2  |  | <b>2</b>  |
| Промежуточная аттестация <i>экза-<br/>мен</i> | <b>36</b>  |    |    | 2 |  | 4  | <b>6</b>  | 30 |  | <b>30</b> |
| <b>Итого</b>                                  | <b>144</b> | 38 | 38 | 2 |  | 12 | <b>90</b> | 54 |  | <b>54</b> |

Содержание тем:

Тема 1. Кристаллическая структура и кристаллическая решетка. Решетки Бравэ, сингонии. Операции симметрии.

Тема 2. Свойства металлов: электропроводность, теплоемкость, температура плавления, энтальпия атомизации, Диа-, пара-, ферро- и антиферромагнетика.

Тема 3. Три простейших структурных типа металлов, их характеристики. Металлические радиусы. Искажения простейших структурных типов.

Тема 4. Квантовомеханическое описание металлической связи. Модель Вигнера и Зейтца. Модель Фриделя. Метод псевдопотенциала. Энергетические зоны. Плотность состояний. Расщепление зон в результате искажения Пайерлса. Связь магнитных свойств металла с его зонной структурой. Квантовое объяснение эффекта сверхпроводимости.

Тема 5. Более сложные структурные типы металлов. Фазовые переходы в металлах при изменении температуры и давления. Координационные полиэдры в структурах металлов.

Тема 6. Типы твердых растворов, условия их образования. Размерные и электронные факторы. Распад твердых растворов. Твердые растворы внедрения и особенности их свойств.

Тема 7. Интерметаллиды, их классификация. Валентные соединения. Фазы Цинтля. Сверхструктуры. Топологически плотные упаковки, Франк-Касперовские фазы. Фазы Юм-Розери. Роль электронной концентрации в образовании определенного структурного типа.

Тема 8. Дефекты кристаллической структуры: точечные, линейные, двумерные. Термодинамические закономерности образования дефектов. Их подвижность и влияние на свойства металлов.

Тема 9. Диффузия, механизмы диффузии. Самодиффузия и гетеродиффузия. Взаимная диффузия. Диффузионная зона. Методы расчета коэффициентов взаимной диффузии.

Тема 10. Кинетика твердофазных реакций. Лимитирующие стадии. Твердофазные реакции, лимитируемые диффузией. Теория Вагнера-Шмальцрида. Методы активации твердых тел. Фазовые переходы. Механизмы фазовых превращений в твердом состоянии.

Тема 11. Аперриодические фазы. Несоразмерно модулированные и несоразмерные композитные фазы. Квазикристаллы.

## 6. Образовательные технологии:

Проводятся традиционные лекции с использованием мультимедийных презентаций, а также лекции-демонстрации проблемного характера, посвященные методам визуализации кристаллических структур металлов и интерметаллидов, а также прогнозированию структуры энергетических зон. В ходе семинарских занятий студенты решают задачи, нацеленные на практическое усвоение лекции-

онного материала, обсуждают предложенные преподавателем проблемы, а также отвечают на вопросы преподавателя.

#### 7. Учебно-методические материалы для самостоятельной работы по дисциплине (модулю):

Студентам предоставляется программа курса, план занятий и перечень заданий для самостоятельной работы. По каждой теме указывается материал в источниках из списков основной и вспомогательной литературы, а также из интернет-ресурсов. Дополнительные материалы (руководства к выполнению конкретных заданий) размещаются на сайте кафедры общей химии:

[www.chem.msu.ru/rus/teaching/general-spec.html](http://www.chem.msu.ru/rus/teaching/general-spec.html).

#### 8. Ресурсное обеспечение:

- Перечень основной и вспомогательной учебной литературы ко всему курсу

#### Основная литература

1. А.В. Кнотько, И.А. Пресняков, Ю.Д. Третьяков. Химия твердого тела: Учеб. пособие для студентов. – М.: Академия, 2006. – 301 с.
2. Соколовская Е.М., Гузей Л.С. Металлохимия: Учеб. пособие для студентов химических специальностей вузов. – М.: Изд-во Моск. ун-та, 1986. – 264 с.
3. Бокий Г.В. Кристаллохимия. – М.: Наука, 1971. – 399 с.
4. Миллер У. Структурная неорганическая химия. – Долгопрудный: Издательский дом «Интеллект», 2010. – 352 с.

#### Дополнительная литература

1. Хенней Н. Химия твердого тела. – М.: Мир, 1971. – 117 с.
  2. Рао Ч., Гопалакришнан Д. Новые направления в химии твердого тела. – Новосибирск, Наука, 1990. – 520 с.
  3. Мюллер У. Структурная неорганическая химия. – Долгопрудный: «Интеллект», 2010. – 352 с.
  4. Третьяков Ю. Д., Путляев В. И. Введение в химию твердофазных материалов. Классический университетский учебник. – М.: Наука, 2006. – 400 с.
  5. Хоффман Р. Строение твердых тел и поверхностей. – М.: «Мир», 1990. – 216 с.
  6. Ярославцев А.Б. Химия твердого тела. – М.: Научный мир, 2009. – 328 с.
  7. Чеботин В.Н. Физическая химия твердого тела. – М.: «Химия», 1982. – 322 с.
- Перечень используемых информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса, включая программное обеспечение, информационные справочные системы (при необходимости):
    - База структурных и термодинамических данных для бинарных систем Pauling File
    - Программа визуализации структур неорганических веществ Diamond
    - База данных: Springer Materials Landolt-Börnstein Database <http://www.springermaterials.com/docs/index.html>

**Материально-техническое обеспечение:** занятия проводятся в обычной аудитории, оснащенной доской и мелом (маркерами), персональным компьютером и мультимедийным проектором

9. Язык преподавания – русский

10. Преподаватели:

д.х.н., профессор Яценко Александр Васильевич 4959393654

к.х.н., ведущий научный сотрудник Кузнецов Виктор Николаевич 4959393538

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

Образцы оценочных средств для текущего контроля усвоения материала и промежуточной аттестации - экзамена. На экзамене проверяется достижение промежуточных индикаторов компетенций, перечисленных в п.2.

#### **Вопросы для экзамена:**

1. Классификация кристаллических решеток. Кристаллографические сингонии.
2. Прimitивные и центрированные элементарные ячейки. Решетки Бравэ. Приведение примитивных ячеек к центрированным: цель преобразования и примеры.
3. Закрытые и открытые преобразования симметрии. Взаимодействие элементов симметрии.
4. Способы обозначения узловых рядов в кристаллических структурах. Как определяют индексы узловых плоскостей?
5. Принципы построения ячейки Вигнера-Зейтца. Проведите построение ячейки Вигнера-Зейтца для двумерной решетки.
6. Обратное пространство. Принципы построения обратной решетки. Соотношения между базисными векторами прямого и обратного пространства.
7. Волновой вектор, его связь с решением уравнения Шредингера для электрона в трехмерном ящике.
8. Какие физические свойства характерны для элементов-металлов? Для веществ-металлов?
9. Три структурных типа, типичные для металлов. Какие из них можно описать как плотнейшие упаковки шаров? Какое координационное окружение имеют атомы металла в каждом из этих трех структурных типов?
10. Типы и размеры пустот в важнейших структурных типах металлов. Плотность упаковки атомов.
11. В каких группах Периодической системы наиболее часто встречается каждый из этих трех важнейших структурных типов?
12. Сравните плотность упаковки атомов в структурах  $\alpha$ - и  $\gamma$ -железа. Почему растворимость углерода в  $\gamma$ -железе выше, чем в  $\alpha$ -железе?

13. Металлические радиусы атомов. Как их определяют? Какой из радиусов больше – ковалентный, металлический или ионный (катионный)?
14. В структуре индия (тетрагональная объемноцентрированная решетка) каждый атом имеет координационное число 12. Объясните, как такая структура образуется в результате искажения гранецентрированной кубической структуры.
15. Структуру ртути можно рассматривать как результат искажения кубической гранецентрированной решетки – сплющивания ее вдоль одной из телесных диагоналей. Что происходит при этом с примитивной ячейкой? Какую центрированную ячейку можно получить из этой деформированной примитивной ячейки?
16. Упорядоченные твердые растворы (соединения Курнакова). Факторы, благоприятствующие их образованию. Примеры упорядоченных твердых растворов замещения.
17. Валентные соединения. Фазы Цинтля. Условия их образования и примеры.
18. Что такое сверхструктуры? Приведите примеры их образования.
19. Топологически плотные упаковки и общие принципы строения полиэдров Франка-Каспера.
20. Опишите строение полиэдров Франка-Каспера, отвечающих координационным числам 12, 14, 15 и 16.
21. Приведите 3 примера фаз Лавеса. Каковы условия (предпосылки) их образования? Какие координационные окружения имеют атомы в типичных фазах Лавеса?
22. Приведите примеры металлических систем, в которых образуются  $\sigma$ -фазы. От каких факторов зависит возможность образования  $\sigma$ -фаз? Какой из металлов имеет структуру, аналогичную структуре  $\sigma$ -фазы?
23. Факторы, определяющие возможность образования фаз Юм-Розери (на примере латуни и родственных систем).
24. Что такое несоразмерная модуляция? Что образуется, если модуляция становится соразмерной?
25. Что такое несоразмерная композитная структура?
26. Что такое квазикристаллы? Какие оси симметрии имеются у квазикристаллов и отсутствуют у периодических кристаллов?
27. Как соотносятся квазикристалл и периодический аппроксимант? Может ли аппроксимант иметь такой же состав, как и квазикристалл? Такую же структуру?
28. Каков тип связи в следующих веществах: сера  $S_8$ ; красный фосфор; SiC;  $Li_3N$ ;  $Be_2C$ ;  $Al_4C_3$ ;  $\sigma$ -CrFe;  $MgB_2$ . Необходимые для ответа сведения о структуре веществ, а также их физических и химических свойствах возьмите из справочников.
29. Ковалентные кристаллы (примеры). Длина и энергия связи. Образование зон в результате перекрывания  $sp^3$ -гибридных орбиталей (тетраэдрические полупроводники). Уровень Ферми.
30. Структура ковалентных кристаллов элементов 15 группы (черного фосфора, As и Sb) как результат искажения Пайерлса простой кубической структуры.
31. Металлическая связь. Простые металлы: модель Вигнера и Зейтца. Плотность состояний.



32. Связь в переходных металлах: модель Фриделя.
33. Как объяснить, что при расчете электронной структуры Na методом Вигнера-Зейтца уровень Ферми кристалла почти совпадает с уровнем 3s-орбитали атома?
34. В системе Pt–Cr размерный фактор является благоприятным для растворения как Cr в Pt, так и Pt в Cr. Предложите объяснение наблюдаемой асимметрии растворимостей.
35. Оцените растворимость Ga, Ge и As в серебре и сопоставьте ваше предсказание с экспериментальными фазовыми диаграммами этих систем.
36. Какую валентность необходимо приписать атомам Ni и Co, если считать соединения NiAl и CoAl, имеющие структуру типа CsCl,  $\beta$ -фазами Юм-Розери?
37. Объясните, почему карбидные фазы с ГЦК-металлической подрешеткой (карбиды Ti, Zr, Nb, V и др.) имеют состав  $MC_{1-x}$ , а фазы с ГПУ-металлической подрешеткой (карбиды Mo, W) –  $M_2C_{1-x}$ , если количество и размеры октаэдрических пустот в ГЦК- и ГПУ-плотнейших шаровых упаковках одинаковы.
38. Дефекты кристаллической структуры. Классификация дефектов по размерности. Ассоциация дефектов.
39. Точечные дефекты. Виды точечных дефектов. Взаимодействие точечных дефектов.
40. Влияние точечных дефектов на свойства кристаллических веществ.
41. Линейные дефекты. Дислокации. Краевая и винтовая дислокация. Вектор Бюргерса. Влияние дислокаций на механические свойства кристаллов.
42. Нестехиометричность и дефекты. Описание в рамках модели Шоттки-Вагнера.
43. Основные механизмы диффузии.
44. Диффузионные характеристики: коэффициент диффузии, энергия активации диффузии. Зависимость от температуры и от механизма диффузии.
45. Влияние характеристик образца (размеры зерен, плотность дислокаций и т.п.) на диффузию. Относительная роль объемной, зернограничной и поверхностной диффузии в зависимости от состояния образца и температуры.
46. Движущая сила диффузии. Законы Фика.
47. Самодиффузия и гетеродиффузия.
48. Взаимная диффузия. Коэффициенты взаимной диффузии. Эффект Киркендалла. Эффекты Френкеля.
49. Особенности кинетики превращений в твердых телах.
50. Закономерности зародышеобразования в твердых телах. Критическое пересыщение. Механизмы роста кристаллов.
51. Фазовые переходы. Механизмы фазовых превращений в твердых телах.
52. . Бездиффузионные механизмы фазовых превращений. Мартенситные превращения.

53. Кинетика твердофазных реакций. Лимитирующие стадии. Твердофазные реакции, лимитируемые диффузией. Теория Вагнера-Шмальцрида.

54. Факторы, влияющие на реакционную способность твердых тел. Методы активации твердых тел.

### Методические материалы для проведения процедур оценивания результатов обучения

Шкала оценивания знаний, умений и навыков является единой для всех дисциплин (приведена в таблице ниже)

| <b>ШКАЛА И КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТА ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)</b> |                    |  |   |  |
|---|--------------------|--|---|--|
| Оценка \ Результат  | 2                  | 3  | 4   | 5  |
| Знания  | Отсутствие знаний  | Фрагментарные знания                           | Общие, но не структурированные знания   | Сформированные систематические знания                |
| Умения  | Отсутствие умений  | В целом успешное, но не систематическое умение | В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы умение (допускает неточности непринципиального характера) | Успешное и систематическое умение                    |
| Навыки (владения)   | Отсутствие навыков | Наличие отдельных навыков                      | В целом, сформированные навыки, но не в активной форме  | Сформированные навыки, применяемые при решении задач |

| <b>РЕЗУЛЬТАТ ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)</b>  | <b>ФОРМА ОЦЕНИВАНИЯ</b>  |
|---|--|
| Знать: современные теории, описывающие структуру, электронное строение и свойства твердых тел                             | мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на экзамене |
| Уметь: находить взаимосвязи между составом, строением, физическими и химическими свойствами твердых тел и объяснять их    | мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на экзамене |
| Владеть: Способами предсказания физических и химических свойств твердотельных материалов на основе их состава и структуры | мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на экзамене |