

1. Цель и планируемые результаты освоения дисциплины

Целью освоения дисциплины является формирование следующих компетенций:

– ОПК-1. Способен анализировать, интерпретировать и обобщать результаты экспериментальных и расчетно-теоретических работ химической направленности.

– ОПК-2. Способен проводить химический эксперимент с использованием современного оборудования, соблюдая нормы техники безопасности.

– ПК-1. Способен планировать работу и выбирать адекватные методы решения научно-исследовательских задач в выбранной области химии, химической технологии или смежных с химией науках.

Результатами освоения дисциплины являются следующие индикаторы достижения компетенций:

ИОПК-1.1. Систематизирует и анализирует результаты химических экспериментов, наблюдений, измерений, а также результаты расчетов свойств веществ и материалов.

ИОПК-1.2. Предлагает интерпретацию результатов собственных экспериментов и расчетно-теоретических работ с использованием теоретических основ традиционных и новых разделов химии.

ИОПК-1.3. Формулирует заключения и выводы по результатам анализа литературных данных, собственных экспериментальных и расчетно-теоретических работ химической направленности.

ИОПК-2.1. Работает с химическими веществами с соблюдением норм техники безопасности.

ИОПК-2.2. Использует существующие и разрабатывает новые методики получения и характеристики веществ и материалов для решения задач профессиональной деятельности.

ИОПК-2.3. Проводит исследования свойств веществ и материалов с использованием серийного научного оборудования.

ИПК-1.1. Разрабатывает стратегию научных исследований, составляет общий план и детальные планы отдельных стадий.

ИПК-1.2. Выбирает экспериментальные и расчетно-теоретические методы решения поставленной задачи, используя достижения современной химической науки, и исходя из имеющихся, материальных, информационных и временных ресурсов.

2. Задачи освоения дисциплины

– сформировать у студентов представления о развитии химии твердого тела, а также ее роли в науке, практике для решения задач профессиональной деятельности;

– научить применять теоретические представления описания химической связи и химических превращений твердых тел и соотносить свойства твердых тел и материалов с их структурой и дефектностью;

– научить применять фундаментальные физико-химические принципы для создания материалов;

– научить обосновывать выбор методик получения и методов исследования твердых веществ и материалов на их основе.

3. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина относится к профессиональному циклу, части, формируемой участниками образовательных отношений. Дисциплина по выбору.

4. Семестр освоения и форма промежуточной аттестации по дисциплине

Семестр 8, экзамен.

5. Входные требования для освоения дисциплины

Для успешного освоения дисциплины требуются результаты обучения по следующим дисциплинам: «Неорганическая химия», «Физическая химия» и «Кристаллохимия».

6. Язык реализации

Русский

7. Объем дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 з.е., 144 часа, из которых:

- лекции: 16 ч.;
- семинарские занятия: 0 ч.;
- практические занятия: 0 ч.;
- лабораторные работы: 48 ч.

в том числе практическая подготовка: 48 ч.

Объем самостоятельной работы студента определен учебным планом.

8. Содержание дисциплины, структурированное по темам

Тема 1. Основные понятия и предмет химии твердых веществ (ХТВ)

Спецификация химии твердого состояния как раздела химической науки. Методология науки о твердофазном веществе. История развития ХТВ. Классификация твердых веществ. Химический и физический подход к описанию природы твердого вещества. Химическая связь в твердых телах. Электронная и остовная подсистемы твердого тела. Основные модели твердых веществ: зонная, остовная.

Тема 2. Кристаллохимические основы ХТВ. Кристаллическое и некристаллическое состояние вещества. Реальные кристаллы

Строение твердых веществ. Кристаллохимические основы ХТВ. Кристаллическое состояние вещества. Идеальный кристалл. Формы кристаллов. Ионные, металлические, ковалентные, молекулярные кристаллы. Свойства кристаллов. Расчет энергии кристаллической решетки. Поляризация.

Реальные кристаллы. Дефекты в твердом теле. Символика дефектов, причины возникновения, типы дефектов. Точечные дефекты. Расчет равновесной концентрации дефектов (термодинамический и квазихимический подход). Квазихимические реакции. Влияние дефектов на свойства твердых веществ. Линейные дефекты. Химические соединения, твердые растворы, нестехиометрические соединения (соединения переменного состава), механические смеси.

Некристаллические твердые вещества: аморфные, стеклообразные, полимеры, ситаллы, керамика.

Тема 3. Факторы, определяющие реакционную способность твердых веществ. Поверхность твердого тела

Термодинамический и кинетический аспект существования стабильного и метастабильного состояния вещества. Реакционная способность твердых веществ. Факторы, определяющие реакционную способность твердых веществ. Дисперсные, тонкопленочные и макроскопические твердые тела. Поверхность твердого тела. Поверхностные явления и процессы. Влияние состояния поверхности на свойства веществ. Методы изучения свойств поверхности.

Тема 4. Твердофазные реакции

Реакции твердых веществ, классификация и типы. Реакции, инициируемые тепловой энергией: термодинамическое описание, механизмы таких реакций. Фотохимические реакции, основные модели и механизмы. Реакции, инициируемые электрическим полем. Методы исследования твердофазных реакций.

Тема 5. Фундаментальные физико-химические принципы создания материалов

Роль фазового состава и фазовых равновесий в формировании материала. Физическая и химическая совместимость материалов. Физико-химические основы технологии материалов, системный анализ в химическом материаловедении.

Тема 6. Основные методы синтеза материалов

Методология создания новых материалов с заданными свойствами: классический синтез, направленный и целенаправленный синтез (ЦНС) веществ и материалов (алгоритм ЦНС). Вещество как предшественник материала, взаимосвязь фундаментальных, функциональных и целевых свойств. Современные методы синтеза материалов: химическая сборка, матричный синтез, эпитаксия, общетехнологические методы, самораспространяющийся высокотемпературный синтез (СВС), плазмохимический, криохимический, механохимический, метод взрыва. Особенности синтеза монокристаллических, пленочных, порошкообразных материалов, стекла и керамики.

Тема 7. Состояние и свойства поверхности твердых веществ на примере оксидов

Структура кристаллов в поверхностном слое оксида. Термин «поверхностный центр» и их типы: электронодонорные ионы кислорода, электроноакцепторные катионы металлов, гидроксильно-гидратный покров. Образование на поверхности оксидов групп «металл-кислород», за счет адсорбции кислорода воздуха на катионах металла. Прочность связи поверхностных ионов. Льюисовские кислотные центры. Бренстедовские кислотные центры. Сила центров. Влияние валентности катионов на силу льюисовских и бренстедовских центров. Акцепторная способность катионов в различных степенях окисления. Закономерности в изменении кислотно-основных свойств поверхности по периодической системе.

Тема 8. Методы изучения поверхности оксидов

Изучение состояния поверхности оксидов методом ИК-спектроскопии. Классический метод обнаружения на поверхности бренстедовских и льюисовских центров. Молекулы-зонды. Изучение кислотно-основных свойств поверхности методом рН-метрии.

9. Текущий контроль по дисциплине

Текущий контроль по дисциплине проводится путем контроля посещаемости, входного теста по остаточным знаниям дисциплин: «Неорганическая химия», «Физическая химия» «Кристаллохимия»; устного коллоквиума, включающего теоретические вопросы и практические задания по теме: «Кристаллохимические основы ХТВ. Реальные кристаллы.»; выполнения лабораторных работ и написания отчетов по лабораторным работам, и фиксируется в форме контрольной точки не менее одного раза в семестр.

Текущий контроль позволяет проверить приобретенные знания по ОПК-1 (ИОПК-1.1., ИОПК-1.2., ИОПК-1.3.), ОПК-2 (ИОПК-2.1, ИОПК-2.2, ИОПК-2.3.), ПК-1 (ИПК-1.1., ИПК-1.2.).

10. Порядок проведения и критерии оценивания промежуточной аттестации

Экзамен проводится в устной форме по билетам. Билет содержит два теоретических вопроса и 1 практическую задачу. Содержание экзаменационных билетов позволяет проверить сформированность компетенций ОПК-1 и ОПК-2. Продолжительность подготовки ответа по билетам 45 минут, ответ 20 минут.

Примерное содержание экзаменационных билетов:

1. Основные состояния твердого вещества (кристаллическое, некристаллическое, стеклообразное состояние вещества, ситаллы, керамика, ультрадисперсные вещества).
2. Точечные дефекты. Дефекты замещения. Дефекты внедрения. Дефекты вычитания.
3. Запишите цикл Борна-Габера для ионных, ковалентных, атомных, молекулярных кристаллов и дайте аналитическую запись энергии для каждого цикла. Проведите анализ величин, входящих в уравнения.

Критерии оценивания:

- студент определяет основные особенности состояния вещества (1 задание);
- оценивает особенности дефектов замещения, внедрения, вычитания. Приводит примеры (задание 2);
- владеет навыками написания цикла Борна-Габера для ионных, ковалентных, атомных, молекулярных кристаллов и дает аналитическую запись энергии для каждого цикла. Проводит анализ величин (3 задание).

Результаты экзамена определяются оценками «отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно».

Отлично – студент самостоятельно, в логической последовательности и исчерпывающе отвечает на все вопросы билета, подчеркивая при этом самое существенное, умеет анализировать, сравнивать, классифицировать, обобщать, конкретизировать и систематизировать изученный материал, выделять в нем главное: устанавливать причинно-следственные связи;

Хорошо – студент в логической последовательности и исчерпывающе отвечает на все вопросы билета с помощью наводящих вопросов экзаменатора, подчеркивая при этом самое существенное, умеет анализировать, сравнивать, классифицировать, обобщать, конкретизировать и систематизировать изученный материал, выделять в нем главное: устанавливать причинно-следственные связи;

Удовлетворительно – студент в логической последовательности и исчерпывающе отвечает на все вопросы билета с помощью наводящих вопросов экзаменатора, но допускает не более 3 ошибок, подчеркивая при этом самое существенное, умеет анализировать, сравнивать, классифицировать, обобщать, конкретизировать и систематизировать изученный материал, выделять в нем главное: устанавливать причинно-следственные связи;

Неудовлетворительно – студент не может в логической последовательности и исчерпывающе отвечать на все вопросы билета с помощью наводящих вопросов экзаменатора, не умеет анализировать, сравнивать, классифицировать, обобщать, конкретизировать и систематизировать изученный материал, выделять в нем главное, устанавливать причинно-следственные связи.

11. Учебно-методическое обеспечение

а) Электронный учебный курс по дисциплине в электронном университете «Moodle» - <https://moodle.tsu.ru/course/view.php?id=23446>

б) Кузнецова С. А. УМК «Оксиды в химическом материаловедении» // Электронно-образовательный ресурс, Томск, 2009, на CD – диске. (ido.tsu.ru/tsu_res/res30/)

в) Козик В. В., Борило Л. П., Кузнецова С. А., Лютова Е. С. Химия твердого тела и химическое материаловедение: учебно-методическое пособие: Томск : Издательский Дом ТГУ. 2018. – 53 с.

12. Перечень учебной литературы и ресурсов сети Интернет

а) основная литература:

- Фахльман Б. Д. Химия новых материалов и нанотехнологии. / под ред. Ю. Д. Третьякова и Е. А. Гудилина // М. : Интеллект. 2011. – 463 с.
- Владимирова Г. Г. Физика поверхности твердых тел. Санкт-Петербург : Лань, 2016. – 348 с.

б) дополнительная литература:

- Ярославцев А. Б. Химия твердого тела. М. : Научный мир, 2009. – 322 с.
- Епифанов Г. И. Физика твердого тела. Санкт-Петербург : Лань, 2011. – 288 с.
- Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. / пер. под общ. ред. А. А. Гусева // М. : Альянс, 2013. – 790 с.
- Волынский А., Бакеев Н. Роль поверхностных явлений в структурно-механическом поведении твердых полимеров. М. : Изд-во ФИЗМАТЛИТ, 2014. – 536 с.
- Гусев А. И. Нестехиометрия, беспорядок, ближний и дальний порядок в твердом теле. М. : Физматлит, 2007. – 855 с.

в) ресурсы сети Интернет:

- Электронно-библиотечная система Znanium.com [Электронный ресурс] / Научно-издательский центр Инфра-М. – Электрон. дан. – М., 2012. URL: <http://znanium.com/>
- РХТУ Менделеева базы данных <http://crystal.imet-db.ru/>
- Образовательная программа «Кристаллическая и реальная структуры неорганических материалов» МГУ <http://www.chem.msu.ru/rus/teaching/education-program/spec-inorg/2.html>
- Образовательная программа «Физика твердого тела» МГУ <http://www.chem.msu.ru/rus/teaching/education-program/spec-inorg/6.html>
- Образовательная программа «Физика твердого тела» МГУ <http://www.chem.msu.ru/rus/teaching/education-program/spec-inorg/6.html>
- Образовательная программа «Физика твердого тела» МГУ <http://www.chem.msu.ru/rus/teaching/education-program/spec-inorg/6.html>
- Издательство «Лань» [Электронный ресурс]: электрон.-библиотечная система. – Электрон. дан. – СПб., 2010- . – URL: <http://e.lanbook.com/>
- Общероссийская Сеть КонсультантПлюс Справочная правовая система. <http://www.consultant.ru>

13. Перечень информационных технологий

а) лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение:

- Microsoft Office Standart 2013 Russian: пакет программ. Включает приложения: MS Office Word, MS Office Excel, MS Office PowerPoint, MS Office OneNote, MS Office Publisher, MS Outlook, MS Office Web Apps (Word Excel MS PowerPoint Outlook);
- публично доступные облачные технологии (Google Docs, Яндекс диск и т.п.).

б) информационные справочные системы:

- Электронный каталог Научной библиотеки ТГУ – <http://chamo.lib.tsu.ru/search/query?locale=ru&theme=system>
- Электронная библиотека (репозиторий) ТГУ – <http://vital.lib.tsu.ru/vital/access/manager/Index>
- ЭБС Лань – <http://e.lanbook.com/>
- ЭБС Консультант студента – <http://www.studentlibrary.ru/>
- Образовательная платформа Юрайт – <https://urait.ru/>
- ЭБС ZNANIUM.com – <https://znanium.com/>

– ЭБС IPRbooks – <http://www.iprbookshop.ru/>

14. Материально-техническое обеспечение

Обучение дисциплине осуществляется с использованием следующих площадей и оборудования:

– лекционная аудитория, оснащенная мультимедийным оборудованием для демонстрации презентаций, слайдов и компьютерной анимации; интерактивной доской (аудитория № 402 6-го учебного корпуса ТГУ);

– лабораторные аудитории (№ 102, 6-го учебного корпуса ТГУ).

Лаборатории оснащены вытяжными и сушильными шкафами, муфелями, весами, электроплитками, дистилляторами, центрифугами, термометрами; стеклянной и фарфоровой посудой; необходимыми для выполнения лабораторных работ реактивами.

15. Информация о разработчиках

Кузнецова Светлана Анатольевна, канд. хим. наук, доцент, кафедра неорганической химии Национального исследовательского Томского государственного университета, доцент.