

МИНОБРНАУКИ РОССИИ  
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования  
«Тверской государственный технический университет»  
(ТвГТУ)

УТВЕРЖДАЮ  
Проректор по НИИД



А.А. Артемьев  
2022 г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА**  
дисциплины образовательного компонента  
«Материаловедение (химические науки)»

Научная специальность подготовки научных и  
научно-педагогических кадров в аспирантуре  
**2.6.17. Материаловедение (химические науки)**

Форма обучения – очная.

Химико-технологический факультет.  
Кафедра «Биотехнологии, химии и стандартизации».  
Семестры 6, 7.

Тверь 2022

Рабочая программа дисциплины соответствует ОХОП подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре в части требований к результатам обучения по дисциплине и учебному плану.

Разработчик программы:  
заведующий кафедрой БХС



М.Г. Сульман

Программа рассмотрена и одобрена на заседании кафедры БХС  
«29» августа 2022 г., протокол № 1.

Заведующий кафедрой БХС



М.Г. Сульман

Согласовано  
Начальник отдела аспирантуры  
и докторантуры



О.И. Туманова

Начальник отдела  
комплектования  
зональной научной библиотеки



О.Ф. Жмыхова

## 1. Цели и задачи дисциплины

**Целью** дисциплины является углубленное изучение теоретических и методологических основ химии твердого тела.

**Задачами** дисциплины являются:

- формирование способности к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач;
- углубленное изучение основ строения и структуры твердых материалов;
- формирование представления о методах синтеза и исследования твердофазных материалов;
- развитие и закрепление навыков профессиональной деятельности исследователя, способного адекватно решать исследовательские и практические задачи в своей профессиональной деятельности;
- приобретение навыков анализа и интерпретации данных, полученных в процессе исследований.

## 2. Место дисциплины в структуре ОП

Дисциплина относится к Компоненту 2 ОП ВО «Образовательный компонент» в соответствии с приказом Министерства науки и высшего образования Российской Федерации от 20.10.2021 № 951 «Об утверждении федеральных государственных требований к структуре программ подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре (адъюнктуре), условиям их реализации, срокам освоения этих программ с учетом различных форм обучения, образовательных технологий и особенностей отдельных категорий аспирантов (адъюнктов)» (Зарегистрирован в Минюсте РФ 23.11.2021 № 65943).

Приобретенные знания в рамках данной дисциплины необходимы для подготовки к сдаче кандидатского экзамена, а также при подготовке к итоговой аттестации.

Промежуточная аттестация осуществляется в 6 и 7 семестрах.

## 3. Планируемые результаты обучения

### 3.1 Компетенции, закрепленные в ОХОП:

ОК-5: готов к преподавательской деятельности по основным образовательным программам высшего образования.

### 3.2. Показатели достижения компетенций:

**Знать:**

- 31.1. Современные направления развития химического материаловедения;
- 31.2. Основы химического строения твердых тел;
- 31.3. Основы химической термодинамики и кинетики формирования твердофазных материалов.

**Уметь:**

- У1.1. Выбирать метод синтеза и исследования твердых материалов.

У1.2. Использовать основные методы трактовки, графического представления и анализа полученных экспериментальных данных.

### 3.3. Технологии, обеспечивающие формирование компетенций

Проведение лекционных и практических занятий, самостоятельная работа под руководством преподавателя.

### 3. Трудоемкость и виды учебной работы

Таблица 1. Распределение трудоемкости по видам учебной работы

Вид учебной работы	Зачетные единицы	Академические часы
<b>6 семестр</b>		
<b>Общая трудоемкость</b>	2	72
<b>Аудиторные занятия (всего)</b>		
В том числе:		
Лекции		16
Практические занятия (ПЗ)		16
Лабораторные работы (ЛР)		не предусмотрены
<b>Самостоятельная работа обучающихся (всего)</b>		40
В том числе:		
Курсовая работа		не предусмотрена
Курсовой проект		не предусмотрен
Расчетно-графические работы		не предусмотрены
Реферат		не предусмотрен
Другие виды самостоятельной работы: - подготовка к практическим занятиям		30
Текущий контроль успеваемости и промежуточная аттестация (зачет)		10
<b>7 семестр</b>		
<b>Общая трудоемкость</b>	3	108
<b>Аудиторные занятия (всего)</b>		
В том числе:		
Лекции		16
Практические занятия (ПЗ)		16
Лабораторные работы (ЛР)		не предусмотрены
<b>Самостоятельная работа обучающихся (всего)</b>		40
В том числе:		
Курсовая работа		не предусмотрена
Курсовой проект		не предусмотрен
Расчетно-графические работы		не предусмотрены
Реферат		не предусмотрен
Другие виды самостоятельной работы: - подготовка к практическим занятиям		40
Текущий контроль успеваемости и промежуточная аттестация (экзамен)		36



## 5. Структура и содержание дисциплины

### 5.1. Структура дисциплины

Таблица 2. Модули, трудоемкость в часах и виды учебной работы

№	Наименование модуля	Труд-ть часы	Лекции	Практич. занятия	Лаб. работы	Сам. работа
<b>6 семестр</b>						
1	Основы химического материаловедения	14	2	2	-	10
2	Строение твердых веществ	18	4	4	-	10
3	Химическая связь и электронное строение твердых веществ	18	4	4	-	10
4	Реальная структура кристаллов	22	6	6	-	10
	<b>6 семестр</b>	<b>72</b>	<b>16</b>	<b>16</b>	<b>-</b>	<b>40</b>
<b>7 семестр</b>						
5	Фазовые переходы в твердых веществах	23	2	2	-	10+9(экз)
6	Методы синтеза твердых веществ	31	6	6	-	10+9(экз.)
7	Методы исследования твердых веществ	31	6	6	-	10+9(экз.)
8	Твердофазные материалы	23	2	2	-	10+9(экз.)
	<b>7 семестр</b>	<b>108</b>	<b>16</b>	<b>16</b>	<b>-</b>	<b>40+36(экз)</b>
	<b>Всего</b>	<b>180</b>	<b>32</b>	<b>32</b>	<b>-</b>	<b>80+36(экз)</b>

### 5.2. Содержание дисциплины

#### МОДУЛЬ 1. «ОСНОВЫ ХИМИЧЕСКОГО МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ»

Современные проблемы химического материаловедения. Классификационные признаки в химическом материаловедении. Классификация материалов по этапу переработки; по их назначению; по наиболее важным для определенных условий свойствам или их совокупности; по условиям применения материала; по структурным признакам; по макроструктуре (агрегатному состоянию). Классификация твердых материалов по количеству фаз и масштабу неоднородностей структуры; по микроструктуре; по атомно-молекулярной структуре. Физико-химические, функциональные, целевые свойства и характеристики материалов.

#### МОДУЛЬ 2. «СТРОЕНИЕ ТВЕРДЫХ ВЕЩЕСТВ»

Строение кристаллических твердых веществ. Понятие о симметрии кристаллической решетки. Кристаллографические пространственные группы симметрии. Выбор и типы элементарных ячеек. Молекулярные кристаллы.

Кристаллы с ионными и ковалентными решетками. Правила Полинга. Металлы и сплавы. Интерметаллические соединения. Кристаллы с участием водородных и ван-дер-ваальсовых связей. Супрамолекулярные образования. Размеры атомов или ионов. Координационные числа.

Способы организации структур. Структуры с гексагональной и кубической плотнейшими упаковками. Тетрагональная упаковка. Дефекты упаковок, политипизм. Полиэдрическое описание кристаллических структур. Изоморфизм. Некоторые наиболее важные структурные типы. Структуры каменной соли ( $\text{NaCl}$ ) и хлорида цезия ( $\text{CsCl}$ ), сфалерита и вюрцита ( $\text{ZnS}$ ), флюорита ( $\text{CaF}_2$ ) и антифлюорита ( $\text{Na}_2\text{O}$ ). Структурные типы арсенида никеля ( $\text{NiAs}$ ), иодида кадмия ( $\text{CdI}_2$ ) и рутила ( $\text{TiO}_2$ ). Структурные типы перовскита ( $\text{CaTiO}_3$ ) и шпинели ( $\text{MgAl}_2\text{O}_4$ ). Соединения со слоистой структурой. Общие сведения о структурах силикатов и алюмосиликатов. Соединения внедрения и клатраты. Органические кристаллические структуры.

Твердые растворы замещения, внедрения и вычитания. Изовалентное и гетеровалентное замещение. Нестехиометричные соединения. Структура аморфных твердых тел. Функция радиального распределения. Нерегулярные плотнейшие упаковки. Описание аморфных структур в полиэдрах. Кластерная модель. Стеклообразное состояние вещества. Факторы, влияющие на стеклообразование. Кинетическая природа стеклообразования. Ближний порядок. Структурные единицы. Топология сочленения структурных единиц на примере кварцевого стекла. Структура квазикристаллов. Несоразмерные структуры. Структура жидких кристаллов.

### **МОДУЛЬ 3. «ХИМИЧЕСКАЯ СВЯЗЬ И ЭЛЕКТРОННОЕ СТРОЕНИЕ ТВЕРДЫХ ВЕЩЕСТВ»**

Типы химической связи в твердом теле. Ван-дер-ваальсово взаимодействие в молекулярных кристаллах, клатраты. Ионная модель строения кристаллов, константа Моделунга, энергия ионной решетки. Цикл Борна-Габера и термодимические расчеты. Основы теорий кристаллического поля и поля лигандов применительно к твердым телам. Влияние d-электронов. Энергия стабилизации кристаллическим полем и катионное распределение. Эффект Яна-Теллера. Сравнение тетраэдрического и октаэдрического окружений. Эффект неподеленных электронных пар.

Зонная структура кристаллов. Образование зон в результате перекрывания орбиталей. Уровень Ферми. Химический потенциал. Заселенность зон, ее влияние на электрофизические свойства кристаллов. Валентная зона, запрещенная зона, зона проводимости. Металлы и диэлектрики. Собственные и примесные полупроводники. Электронная и дырочная проводимость. Общие представления о методах расчета зонной структуры кристаллов. Границы применимости зонной модели. Цепочечные структуры и одномерная проводимость. Двумерные проводники и интеркаляты. Пайерлсовское искажение. Слабые невалентные взаимодействия в твердых супрамолекулярных образованиях. Наноструктуры, объемные кластеры.



## **МОДУЛЬ 4. «РЕАЛЬНАЯ СТРУКТУРА КРИСТАЛЛОВ»**

Совершенные и несовершенные кристаллы. Типы дефектов. Электронные дефекты. Собственные точечные дефекты. Термодинамические причины образования точечных дефектов. Дефектообразование и нестехиометрия кристаллов. Дефекты по Шоттки и Френкелю. Примесные точечные дефекты. Нейтральные и заряженные точечные дефекты. Квазихимическая модель описания равновесия точечных дефектов. Взаимодействие точечных дефектов. Ассоциаты дефектов. Центры окраски. Взаимосвязь концентрации примесей и собственных точечных дефектов. Влияние точечных дефектов на свойства неорганических веществ. Методы создания неравновесных концентраций точечных дефектов: закалка, механическое и радиационное воздействие.

Подвижность точечных дефектов. Диффузия и самодиффузия в твердых телах. Основные механизмы самодиффузии. Коэффициент диффузии, энергия активации диффузии. Диффузия, обусловленная градиентом концентраций, законы Фика. Диффузия точечных дефектов в электрическом поле. Уравнение Нернста-Эйнштейна. Методы исследования диффузии. Ионная проводимость. Подвижность, числа переноса. Температурная зависимость ионной проводимости. Собственная и примесная проводимость. Суперионные проводники (твердые электролиты).

Твердые тела со структурной разупорядоченностью. Протяженные дефекты. Структуры кристаллографического сдвига. Дефекты упаковки. Границы блоков и антифазные домены (границы). Гетерогенные включения. Нейтральные и заряженные протяженные дефекты. Дислокации в кристаллах, основные виды. Причины возникновения дислокаций. Движение дислокаций. Влияние дислокаций на свойства кристаллов. Экспериментальные методы исследования дислокаций.

Поверхность как дефект строения твердого тела. Поверхностная энергия кристалла. Искажение структуры и электронного строения в приповерхностных слоях. Роль поверхности в химических реакциях твердых тел. Роль соотношения объем-поверхность в свойствах твердых тел. Общие особенности химии твердых наноразмерных частиц. Экспериментальные методы изучения поверхности.

## **МОДУЛЬ 5. «ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В ТВЕРДЫХ ВЕЩЕСТВАХ»**

Термодинамическая классификация фазовых переходов. Стабильные и метастабильные фазы. Представление фазовых переходов на диаграммах состояния. Структурные изменения при фазовых переходах. Изменения структуры с ростом температуры и давления. Мартенситные превращения. Механизмы фазовых переходов. Кинетика фазовых переходов. Скорость зародышеобразования. Общая скорость превращения, уравнение Авраами. Факторы, влияющие на кинетику фазовых переходов. Мартенситные превращения. Переходы типа порядок-беспорядок. Несоразмерные фазы. Жидкокристаллическое состояние. Некристаллическое состояние и фазовые переходы в стеклах.

## **МОДУЛЬ 6. «МЕТОДЫ СИНТЕЗА ТВЕРДЫХ ВЕЩЕСТВ»**

Термодинамические основы синтеза твердых веществ. Р-Т-х фазовые диаграммы двухкомпонентных систем как геометрическое представление термодинамических данных. Правило фаз Гиббса. Работа с проекциями и сечениями



P-T-x диаграмм. Основные типы конденсированных фазовых диаграмм двухкомпонентных систем: с простой эвтектикой, с образованием конгруэнтно и инконгруэнтно плавящихся промежуточных соединений, с расслаиванием в жидкой фазе, с неограниченными и ограниченными твердыми растворами, с полиморфизмом компонентов и соединений. Конденсированные диаграммы трехкомпонентных систем. Фазовые равновесия в субсолидусной области. Использование фазовых диаграмм для выбора условий синтеза.

Синтез путем твердофазных реакций. Основные термодинамические и кинетические закономерности. Экспериментальное осуществление, роль температуры. Методы интенсификации твердофазных процессов: диспергирование исходных веществ, методы химической гомогенизации. Совместное соосаждение компонентов из растворов. Криохимический синтез и распылительная сушка. Кристаллизация из гелей. Золь-гельпроцесс. Механохимическое стимулирование твердофазных процессов. Основные закономерности и возможности механохимических процессов. Саморазвивающийся высокотемпературный синтез. Твердофазный синтез при высоких давлениях.

Кристаллизация из растворов и расплавов. Использование фазовых диаграмм. Кривые растворимости. Основные кинетические закономерности. Особенности зародышеобразования. Возможность образования метастабильных фаз. Политермические и изотермические процессы синтеза. Экспериментальное оформление. Методы электрохимического синтеза.

Кристаллизация из паровой фазы. Основные термодинамические и кинетические закономерности. Процессы сублимации-конденсации. Управление составом внутри области гомогенности отжигом в паре компонентов. Синтез и очистка веществ с помощью химических транспортных реакций в паровой фазе. Теоретические основы, основные закономерности и возможности.

Гидротермальные методы синтеза твердых веществ. Применение различных физических (ультразвукового, микроволнового и др.) воздействий при синтезе твердофазных веществ.

Выращивание монокристаллов. Общие кинетические особенности. Механизмы роста кристаллов. Выращивание из расплавов и растворов. Методы Чохральского и Бриджмена-Стокбаргера. Зонная плавка. Рост из раствора в расплаве. Выращивание из газовой фазы. Газоплазменный метод Вернейля.

Получение твердых веществ в виде тонких слоев и пленок. Поликристаллические и эпитаксиальные пленки. Физические методы: лазерная абляция, магнетронное распыление, электронно-лучевое испарение. Химическое осаждение из паровой фазы, использование гидридов, галогенидов, металлоорганических соединений. Метод молекулярного наслаивания. Получение пленок из растворов и расплавов. Жидкофазная эпитаксия. Электрохимическая кристаллизация пленок и покрытий.

Керамика. Основные закономерности и способы спекания. Способы получения твердых аморфных веществ и стекол. Методы получения твердых фаз в наноразмерном состоянии.



## **МОДУЛЬ 7. «МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ ТВЕРДЫХ ВЕЩЕСТВ»**

Методы изучения кристаллического строения твердых тел. Дифракция рентгеновских лучей. Закон Брэгга, расчет межплоскостных расстояний. Метод порошка, научные основы и применение. Метод Гинье. Индицирование рентгенограмм. Идентификация веществ по рентгенограммам, рентгенофазовый анализ. Общие представления о структурном анализе по порошковым данным. Метод Ритвельда. Рентгенографическое исследование монокристаллов, общие представления о ходе структурного анализа. Получение структурных данных с помощью электронной и нейтронной дифракции. Особенности и возможности методов.

Другие методы изучения строения твердых веществ. Кристаллооптический анализ. Электронная микроскопия: принципы и возможности сканирующей электронной микроскопии, туннельной электронной микроскопии, электронной микроскопии высокого разрешения. Спектральные методы: колебательная спектроскопия, ИК- и КР- спектры; спектроскопия видимого излучения и УФ-спектроскопия; спектроскопия ядерного магнитного резонанса (ЯМР), ядерного квадрупольного резонанса (ЯКР) и электронного парамагнитного резонанса (ЭПР); ядерная  $g$ -резонансная (мессбауэровская) спектроскопия.

Методы определения химического состава. Химический элементный анализ. Рентгенофлуоресцентный анализ. Локальный рентгеноспектральный анализ, массспектрометрические методы, атомно-эмиссионная спектроскопия. Методы исследования поверхности. Оже-электронная спектроскопия, РФЭС, обратное резерфордское рассеяние. Методы исследования ближнего окружения атомов. Рентгеновская абсорбционная спектроскопия (EXAFS, XANES).

Исследования термических свойств веществ. Термогравиметрический анализ. Дифференциально-термический анализ и дифференциальная сканирующая калориметрия. Методы исследования электрических и магнитных свойств.

## **МОДУЛЬ 8. «ТВЕРДОФАЗНЫЕ МАТЕРИАЛЫ»**

Классификация твердофазных материалов по функциональным свойствам. Ионная проводимость и твердые электролиты. Суперионные проводники. Катионные проводники. Кислород-ионные проводники. Галогенид-ионные проводники. Применение твердых электролитов (источники тока, топливные элементы, химические датчики).

Полупроводники. Классификация полупроводниковых материалов. Элементарные полупроводники: германий и кремний. Полупроводниковые соединения  $A_3B_5$  и  $A_2B_6$ . Кристаллохимические особенности. Арсенид галлия. Нитрид галлия. Химические основы легирования полупроводников. Гетероструктуры и сверхрешетки. Основные области применения полупроводников.

Диэлектрики. Химическая и физическая природа диэлектриков. Наведенная и спонтанная поляризация. Сегнетоэлектрики, пироэлектрики и пьезоэлектрики. Примеры. Области применения сегнетоэлектриков, пироэлектриков и пьезоэлектриков. Магнитные материалы. Функциональные параметры. Классификация магнитных материалов, основные структуры и свойства (металлы и сплавы, оксиды переходных металлов, шпинели, гранаты, перовскиты,

гексаферриты). Области применения, взаимосвязь структуры и свойств. Материалы с эффектом гигантского (ГМС) и колоссального (КМС) магнитного сопротивления.

Оптические материалы. Люминесцентные материалы и люминофоры. Фосфоресцирующие материалы. Твердотельные источники лазерного излучения (рубиновый и неодимовый лазеры). Нелинейные оптические материалы. Основные области применения.

Сверхпроводящие материалы. Традиционные (металлы и интерметаллиды) и высокотемпературные (оксиды) сверхпроводники. Взаимосвязь состав - структура - свойство для высокотемпературных сверхпроводников на основе купратов. Области и перспективы применения.

Тугоплавкие материалы. Металлы и сплавы, оксиды, карбиды, бориды, нитриды, силициды. Композиционные материалы, их классификация и методология создания. Металлсодержащие композиционные материалы.

Аморфные материалы и стекла. Факторы, влияющие на стеклообразование. Оксидные и халькогенидные стекла. Электропроводящие стекла. Металлические стекла. Стеклокерамика. Ситаллы. Различные области применения стекол. Жидкие кристаллы. Органические функциональные материалы. Основные типы и области применения. Биоматериалы.

### 5.3. Лабораторные работы

Учебным планом лабораторные работы не предусмотрены.

### 5.4. Практические занятия

Таблица 3. Тематика практических занятий и их трудоемкость

Порядковый номер модуля. Цели практических занятий	Примерная тематика практического занятия	Трудоемкость в часах
<b>Модуль 1</b> <b>Цель:</b> расширить знания в области проблем химического материаловедения	Классификационные признаки в химическом материаловедении.	2
<b>Модуль 2</b> <b>Цель:</b> расширить знания в области строения твердых веществ	Полиэдрическое описание кристаллических структур. Твердые растворы замещения, внедрения и вычитания. Описание аморфных структур в полиэдрах. Структура жидких кристаллов.	4
<b>Модуль 3</b> <b>Цель:</b> расширить знания в области химической связи в твердых материалах	Цикл Борна-Габера и термохимические расчеты. Сравнение тетраэдрического и октаэдрического окружений. Зонная структура кристаллов. Общие представления о методах расчета зонной структуры кристаллов.	4
<b>Модуль 4</b> <b>Цель:</b> расширить знания в области строения и структуры кристаллов	Дефектообразование и нестехиометрия кристаллов. Квазихимическая модель описания равновесия точечных дефектов.	6



	<p>Диффузия точечных дефектов в электрическом поле.          Методы исследования диффузии.          Структуры кристаллографического сдвига.          Экспериментальные методы исследования дислокаций.          Экспериментальные методы изучения поверхности.</p>	
<p><b>Модуль 5</b>  <b>Цель:</b> расширить знания в области кинетики и термодинамики фазовых переходов</p>	<p>Представление фазовых переходов на диаграммах состояния.          Кинетика фазовых переходов.          Переходы типа порядок-беспорядок.</p>	2
<p><b>Модуль 6</b>  <b>Цель:</b> расширить знания в области методов синтеза твердых материалов</p>	<p>Синтез путем твердофазных реакций.          Кристаллизация из растворов и расплавов.          Кристаллизация из паровой фазы.          Гидротермальные методы синтеза твердых веществ.          Получение твердых веществ в виде тонких слоев и пленок.</p>	6
<p><b>Модуль 7</b>  <b>Цель:</b> расширить знания в области методов исследования твердых материалов</p>	<p>Идентификация веществ по рентгенограммам, рентгенофазовый анализ.          Электронная микроскопия          Спектральные методы          Рентгенофлуоресцентный анализ          Оже-электронная спектроскопия, РФЭС          Рентгеновская абсорбционная спектроскопия          Термогравиметрический анализ</p>	6
<p><b>Модуль 8</b>  <b>Цель:</b> расширить знания в области твердых материалов</p>	<p>Ионная проводимость и твердые электролиты.          Полупроводники.          Диэлектрики.          Оптические материалы.          Сверхпроводящие материалы.          Аморфные материалы и стекла.</p>	2

## 6. Самостоятельная работа обучающихся и текущий контроль успеваемости

### 6.1. Цели самостоятельной работы

Формирование способностей к самостоятельному познанию и обучению, поиску литературы, обобщению, оформлению и представлению полученных результатов, их критическому анализу, поиску новых и неординарных решений, аргументированному отстаиванию своих предложений, умений подготовки выступлений и ведения дискуссий.

### 6.2. Организация и содержание самостоятельной работы

Самостоятельная работа заключается в проработке отдельных тем курса по заданию преподавателя по рекомендованной им учебной и научной литературе, методическим разработкам кафедры; подготовке докладов и презентации; подготовке к зачету и экзамену.

Тематика самостоятельной работы определяется ведущим преподавателем и имеет профессионально-ориентированный характер и непосредственную связь изучаемых вопросов с последующей профессиональной деятельностью выпускника.

В рамках промежуточной аттестации выполняется подготовка презентации и текста доклада по заданной теме. После вводных лекций, в которых обозначается содержание дисциплины, ее проблематика и практическая значимость, аспирантам выдаются возможные темы докладов в рамках предметной области дисциплины, из которых аспиранты выбирают тему своего доклада, при этом аспирантом может быть предложена и своя тематика. Тематика доклада должна иметь проблемный и профессионально ориентированный характер, требующей самостоятельной творческой работы аспиранта.

## **7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины**

### **7.1. Основная литература**

1. Ярославцев, А.Б. Химия твердого тела / А.Б. Ярославцев. - Москва : Научный мир, 2009. - 323 с. - Текст : непосредственный. - ISBN 978-5-91522-133-7 : 280 p. - (ID=135564-1)

2. Кнотько, А.В. Химия твердого тела : учеб. пособие для вузов / А.В. Кнотько, И.А. Пресняков, Ю.Д. Третьяков. - Москва : Академия, 2006. - 302 с. : ил. - (Высшее профессиональное образование). - Библиогр. в конце гл. - Текст : непосредственный. - ISBN 5-7695-2262-3 : 204 p. 25 к. - (ID=59187-2)

3. Шрайвер, Д. Неорганическая химия = Inorganic Chemistry : [учебник] : в 2 т. : пер. с англ. Т. 1 / Д. Шрайвер, П. Эткинс. - Москва : Мир, 2004. - 679 с. : ил. - (Лучший зарубежный учебник). - Библиогр. в конце гл. - Текст : непосредственный. - ISBN 5-03-003628-8 (рус.) : 400 p. - (ID=57081-1)

4. Басалаев, Ю.М. Кристаллофизика и кристаллохимия : учебное пособие / Ю.М. Басалаев; Кемеровский государственный университет. - Кемерово : Кемеровский государственный университет, 2014. - ЭБС Лань. - Текст : электронный. - Режим доступа: по подписке. - Дата обращения: 03.10.2022. - ISBN 978-5-8353-1712-7. - URL: <https://e.lanbook.com/book/61407> . - (ID=149897-0)

5. Егоров-Тисменко, Ю.К. Кристаллография и кристаллохимия : учебник для вузов по спец "Геология" : в составе учебно-методического комплекса / Ю.К. Егоров-Тисменко; [под ред. В.С. Урусова]. - Москва : КД Университет, 2005. - 587 с. : ил. - (УМК-У). - Библиогр. : с. 583 - 585. - Текст : непосредственный. - ISBN 5-98227-095-4 : 418 p. - (ID=59740-10)

### **7.2. Дополнительная литература**

1. Казин, В.Н. Физическая химия : учебное пособие для вузов / В.Н. Казин, Е.М. Плисс, А.И. Русаков. - 2-е изд. ; доп. и испр. - Москва : Юрайт, 2022. - (Высшее образование). - Образовательная платформа Юрайт. - Текст : электронный. - Режим доступа: по подписке. - Дата обращения: 07.07.2022. - ISBN 978-5-534-11119-4. - URL: <https://urait.ru/book/fizicheskaya-himiya-495081> . - (ID=134410-0)

2. Фахльман, Б.Д. Химия новых материалов и нанотехнологии : учеб. пособие : в составе учебно-методического комплекса / Б.Д. Фахльман; пер. с англ.:



Д.О. Чаркина, В.В. Уточниковой ; под ред.: Ю.Д. Третьякова, Е.А. Гудилина. - Долгопрудный : Интеллект, 2011. - 463 с. : ил., табл. - (УМК-У). - Текст : непосредственный. - ISBN 978-5-91559-029-7 : 1045 p. 20 к. - (ID=87789-3)

3. Кузьмичева, Г.М. Кристаллохимия наноразмерных объектов : учебное пособие / Г.М. Кузьмичева; МИРЭА - Российский технологический университет. - Москва : МИРЭА - Российский технологический университет, 2020. - Библиогр. : с. - ЭБС Лань. - Текст : электронный. - Режим доступа: по подписке. - Дата обращения: 19.09.2022. - URL: <https://e.lanbook.com/book/167579> . - (ID=149898-0)

4. Пугачев, В.М. Кристаллохимия : учебное пособие : в составе учебно-методического комплекса / В.М. Пугачев; Кемеровский государственный университет. - Кемерово : Кемеровский государственный университет, 2013. - (УМК-У). - ЭБС Лань. - Текст : электронный. - Дата обращения: 10.10.2022. - Режим доступа: по подписке. - ISBN 978-5-8353-1322-8. - URL: <https://e.lanbook.com/book/44382> . - (ID=149896-0)

5. Кристаллография : лаб. практикум : учеб. пособие для вузов / Ю.Н. Сафьянов [и др.]. - Москва : Физматлит, 2005. - 412 с. : ил. - Библиогр. в конце гл. - Текст : непосредственный. - ISBN 5-94052-103-7 : 209 p. - (ID=59694-2)

6. Экспериментальные методы физической химии. Лабораторный практикум : в составе учебно-методического комплекса : учебное пособие для химических спец. / В.А. Рогов [и др.]; под ред. В.Н. Парамона и В.А. Рогова. - 2-е изд. - Долгопрудный : Интеллект, 2018. - ил. - (УМК-ЛР). - Текст : непосредственный. - ISBN 978-5-91559-255-0 : 1490 p. - (ID=136264-3)

7. Математическое моделирование композиционных объектов / РАН, Вычислит. центр. - Москва : Вычислительный центр РАН, 1994. - 138 с. - ISBN 5-201-09914-9 : 1500 p. - (ID=1346-1)

8. Кирилловский, В.К. Современные оптические исследования и измерения : учебное пособие для вузов по направлению подготовки "Оптехника" и оптическим специальностям / В.К. Кирилловский. - Санкт-Петербург [и др.] : Лань, 2022. - ЭБС Лань. - Текст : электронный. - Режим доступа: по подписке. - Дата обращения: 07.07.2022. - ISBN 978-5-8114-0989-1. - URL: <https://e.lanbook.com/book/210458> . - (ID=137097-0)

9. Матвеева, В.Г. Современные металлополимерные катализаторы : монография : в составе учебно-методического комплекса / В.Г. Матвеева, Э.М. Сульман; Тверской гос. техн. ун-т. - Тверь : ТвГТУ, 2001. - 93 с. : ил. - (УМК-У). - Текст : непосредственный. - ISBN 5-7995-0168-3 : 44 p. - (ID=7480-10)

10. Термические методы анализа : метод. указания к практ. занятиям и самостоятельной работе по курсу "Теорет. и эксперимент. методы исследования в химии" по направлению подготовки магистров 020100 Химия и 240100 Хим. технология : в составе учебно-методического комплекса / А.В. Быков [и др.]; Тверской гос. техн. ун-т, Каф. БТиХ. - Тверь : ТвГТУ, 2014. - (УМК-У). - Сервер. - Текст : электронный. - 0-00. - URL: <https://elib.tstu.tver.ru/MegaPro/GetDoc/Megapro/104030> . - (ID=104030-1)

11. Термические методы анализа : метод. указания к практ. занятиям и самостоятельной работе по курсу "Теорет. и эксперимент. методы исследования в химии" по направлению подготовки магистров 020100 Химия и 240100 Хим.



технология / А.В. Быков [и др.]; Тверской гос. техн. ун-т, Каф. БТиХ. - Тверь : ТвГТУ, 2014. - 47 с. : ил. - Текст : непосредственный. - 49 р. 80 к. - (ID=103811-95)

12. Физические методы исследования : учеб. пособие : в составе учебно-методического комплекса / А.В. Быков [и др.]; Тверской гос. техн. ун-т. - 1-е изд. - Тверь : ТвГТУ, 2010. - 159 с. : ил. - (УМК-У). - Библиогр.: с. 156 - 157. - Текст : непосредственный. - ISBN 978-5-7995-0517-2 : 101 р. - (ID=81497-115)

### **7.3 Методические материалы**

1. Молекулярная спектроскопия : метод. указ. к практ. и лаб. занятиям по курсу "Физич. химия" для студентов спец. 240901 Биотехнология, 250500 Хим. технология высокомолекулярных соединений, 011000 Химия, 320700 Охрана окружающей среды / Тверской гос. техн. ун-т, Каф. БТиХ ; сост.: И.П. Шкилева, Е.А. Клиндер, Э.М. Сульман. - Тверь : ТвГТУ, 2009. - 22 с. - Текст : непосредственный. - 14 р. 42 к. - (ID=79244-96)

2. Молекулярная спектроскопия : метод. указ. к практ. и лаб. занятиям по курсу «Физическая химия» для студентов специальностей 240901 Биотехнология 250500 Химическая технология высокомолекулярных соединений, 011000 Химия, 320700 Охрана окружающей среды : в составе учебно-методического комплекса / Тверской гос. техн. ун-т, Каф. БТиХ ; сост.: И.П. Шкилева, Е.А. Клиндер, Э.М.Сульман. - Тверь : ТвГТУ, 2009. - (УМК-М). - Сервер. - Текст : электронный. - 0-00. - URL: <https://elib.tstu.tver.ru/MegaPro/GetDoc/Megapro/103090> . - (ID=103090-1)

3. Учебно-методический комплекс дисциплины, в том числе элективных, факультативных дисциплин и направленных на подготовку к сдаче кандидатских экзаменов образовательного компонента "Химическое материаловедение". Научная специальность подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре 2.6.17 Материаловедение (химические науки) : ФГОС 3++ / сост.: М.Г. Сульман ; Каф. Биотехнология, химия и стандартизация. - 2022. - (УМК). - Текст : электронный. - URL: <https://elib.tstu.tver.ru/MegaPro/GetDoc/Megapro/157495> . - (ID=157495-0)

### **7.4 Программное обеспечение дисциплины**

1. Операционная система Microsoft Windows: лицензии № ICM-176609 и № ICM-176613 (Azure Dev Tools for Teaching).

2. Microsoft Office 2019 Russian Academic: OPEN No Level: лицензия № 41902814.

### **7.5. Специализированные базы данных, справочные системы, электронно-библиотечные системы, профессиональные порталы в Интернет**

ЭБС и лицензионные ресурсы ТвГТУ размещены:

1. Ресурсы: <https://lib.tstu.tver.ru/header/obr-res>

2. ЭКТвГТУ: <https://elib.tstu.tver.ru/MegaPro/Web>

3. ЭБС "Лань": <https://e.lanbook.com/>

4. ЭБС "Университетская библиотека онлайн": <https://www.biblioclub.ru/>

5. ЭБС «IPRBooks»: <https://www.iprbookshop.ru/>

6. Электронная образовательная платформа "Юрайт" (ЭБС «Юрайт»): <https://urait.ru/>

7. Научная электронная библиотека eLIBRARY: <https://elibrary.ru/>

8. Информационная система "ТЕХНОРМАТИВ". Конфигурация "МАКСИМУМ" : сетевая версия (годовое обновление): [нормативно-технические, нормативно-правовые и руководящие документы (ГОСТы, РД, СНиПы и др.). Диск 1,2,3,4. - М. :Технорматив, 2014. - (Документация для профессионалов). - CD. - Текст : электронный. - 119600 р. – (105501-1)
9. База данных учебно-методических комплексов:  
<https://lib.tstu.tver.ru/header/umk.html>

УМК размещен: <https://elib.tstu.tver.ru/MegaPro/GetDoc/Megapro/157495>

## **8. Материально-техническое обеспечение дисциплины**

При изучении дисциплины «Химическое материаловедение» используются современные средства обучения, возможна демонстрация лекционного материала с помощью проектора. Аудитория для проведения лекционных и практических занятий оснащена современной компьютерной и офисной техникой, необходимым программным обеспечением, электронными учебными пособиями и законодательно-правовой поисковой системой, имеющий выход в глобальную сеть.

## **9. Оценочные средства для проведения промежуточной аттестации**

### **9.1. Оценочные средства для проведения промежуточной аттестации в форме экзамена**

1. Экзаменационный билет соответствует форме, утвержденной Положением о рабочих программах дисциплин и в соответствии с приказом Министерства науки и высшего образования Российской Федерации от 20.10.2021 № 951 «Об утверждении федеральных государственных требований к структуре программ подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре (адъюнктуре), условиям их реализации, срокам освоения этих программ с учетом различных форм обучения, образовательных технологий и особенностей отдельных категорий аспирантов (адъюнктов)» (Зарегистрирован в Минюсте РФ 23.11.2021 № 65943).

Число экзаменационных билетов – 10. Число вопросов (заданий) в экзаменационном билете – 3 (1 вопрос для категории «знать» и 2 вопроса для категории «уметь»).

Продолжительность экзамена – 60 минут.

2. Шкала оценивания промежуточной аттестации в форме экзамена – «отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно».

3. Критерии оценки за экзамен:

для категории «знать»:

выше базового – 2;

базовый – 1;

ниже базового – 0;

критерии оценки и ее значения для категории «уметь»:

отсутствие умения – 0 баллов;

наличие умения – 2 балла.

«отлично» - при сумме баллов 5 или 6;



«хорошо» - при сумме баллов 4;

«удовлетворительно» - при сумме баллов 3;

«неудовлетворительно» - при сумме баллов 0, 1 или 2.

4. Вид экзамена – письменный экзамен, включающий решение задач с использованием справочного материала и непрограммируемого калькулятора.

**5. База заданий, предъявляемая обучающимся на экзамене:**

- 1) Термодинамическая классификация фазовых переходов. Стабильные и метастабильные фазы.
- 2) Представление фазовых переходов на диаграммах состояния.
- 3) Структурные изменения при фазовых переходах. Изменения структуры с ростом температуры и давления.
- 4) Механизмы фазовых переходов.
- 5) Кинетика фазовых переходов. Скорость зародышеобразования.
- 6) Общая скорость превращения, уравнение Аврами. Факторы, влияющие на кинетику фазовых переходов.
- 7) Переходы типа порядок-беспорядок. Несоразмерные фазы. Жидкокристаллическое состояние.
- 8) Некристаллическое состояние и фазовые переходы в стеклах.
- 9) Термодинамические основы синтеза твердых веществ. Р-Т-х фазовые диаграммы двухкомпонентных систем как геометрическое представление термодинамических данных. Правило фаз Гиббса.
- 10) Работа с проекциями и сечениями Р-Т-х диаграмм.
- 11) Основные типы конденсированных фазовых диаграмм двухкомпонентных систем: с простой эвтектикой, с образованием конгруэнтно и инконгруэнтно плавящихся промежуточных соединений, с расслаиванием в жидкой фазе, с неограниченными и ограниченными твердыми растворами, с полиморфизмом компонентов и соединений.
- 12) Конденсированные диаграммы трехкомпонентных систем.
- 13) Фазовые равновесия в субсолидусной области.
- 14) Использование фазовых диаграмм для выбора условий синтеза.
- 15) Синтез путем твердофазных реакций. Основные термодинамические и кинетические закономерности. Экспериментальное осуществление, роль температуры.
- 16) Методы интенсификации твердофазных процессов: диспергирование исходных веществ, методы химической гомогенизации.
- 17) Совместное соосаждение компонентов из растворов.
- 18) Криохимический синтез и распылительная сушка.
- 19) Кристаллизация из гелей. Золь-гель процесс.
- 20) Механохимическое стимулирование твердофазных процессов. Основные закономерности и возможности механохимических процессов.
- 21) Саморазвивающийся высокотемпературный синтез.
- 22) Твердофазный синтез при высоких давлениях.
- 23) Кристаллизация из растворов и расплавов. Использование фазовых диаграмм. Кривые растворимости. Основные кинетические закономерности. Особенности зародышеобразования.



- 24) Политермические и изотермические процессы синтеза. Экспериментальное оформление.
- 25) Методы электрохимического синтеза.
- 26) Кристаллизация из паровой фазы. Основные термодинамические и кинетические закономерности. Процессы сублимации-конденсации.
- 27) Управление составом внутри области гомогенности отжигом в паре компонентов.
- 28) Синтез и очистка веществ с помощью химических транспортных реакций в паровой фазе.
- 29) Теоретические основы, основные закономерности и возможности.
- 30) Гидротермальные методы синтеза твердых веществ.
- 31) Применение различных физических (ультразвукового, микроволнового и др.) воздействий при синтезе твердофазных веществ.
- 32) Выращивание монокристаллов. Общие кинетические особенности.
- 33) Механизмы роста кристаллов.
- 34) Выращивание из расплавов и растворов. Методы Чохральского и Бриджмена-Стокбаргера.
- 35) Зонная плавка. Рост из раствора в расплаве.
- 36) Выращивание из газовой фазы. Газоплазменный метод Вернейля.
- 37) Получение твердых веществ в виде тонких слоев и пленок. Поликристаллические и эпитаксиальные пленки.
- 38) Физические методы: лазерная абляция, магнетронное распыление, электронно-лучевое испарение.
- 39) Химическое осаждение из паровой фазы, использование гидридов, галогенидов, металлоорганических соединений.
- 40) Метод молекулярного наслаивания.
- 41) Получение пленок из растворов и расплавов.
- 42) Электрохимическая кристаллизация пленок и покрытий.
- 43) Керамика. Основные закономерности и способы спекания.
- 44) Способы получения твердых аморфных веществ и стекол.
- 45) Методы получения твердых фаз в наноразмерном состоянии.
- 46) Дифракция рентгеновских лучей. Закон Брэгга, расчет межплоскостных расстояний.
- 47) Метод порошка, научные основы и применение. Метод Гинье. Индексирование рентгенограмм.
- 48) Идентификация веществ по рентгенограммам, рентгенофазовый анализ.
- 49) Общие представления о структурном анализе по порошковым данным. Метод Ритвельда.
- 50) Рентгенографическое исследование монокристаллов, общие представления о ходе структурного анализа.
- 51) Получение структурных данных с помощью электронной и нейтронной дифракции.
- 52) Кристаллооптический анализ.

- 53) Электронная микроскопия: принципы и возможности сканирующей электронной микроскопии, туннельной электронной микроскопии, электронной микроскопии высокого разрешения.
- 54) Спектральные методы: колебательная спектроскопия, ИК- и КР-спектры; спектроскопия видимого излучения и УФ-спектроскопия; спектроскопия ядерного магнитного резонанса (ЯМР), ядерного квадрупольного резонанса (ЯКР) и электронного парамагнитного резонанса (ЭПР); ядерная  $g$ -резонансная (мессбауэровская) спектроскопия.
- 55) Химический элементный анализ.
- 56) Рентгенофлуоресцентный анализ.
- 57) Локальный рентгеноспектральный анализ, массспектрометрические методы, атомно-эмиссионная спектроскопия.
- 58) Оже-электронная спектроскопия, РФЭС, обратное резерфордское рассеяние.
- 59) Рентгеновская абсорбционная спектроскопия (EXAFS, XANES).
- 60) Термогравиметрический анализ.
- 61) Дифференциально-термический анализ и дифференциальная сканирующая калориметрия.
- 62) Методы исследования электрических и магнитных свойств.
- 63) Классификация твердофазных материалов по функциональным свойствам.
- 64) Ионная проводимость и твердые электролиты. Суперионные проводники. Катионные проводники.
- 65) Кислород-ионные проводники. Галогенид-ионные проводники.
- 66) Применение твердых электролитов (источники тока, топливные элементы, химические датчики).
- 67) Полупроводники. Классификация полупроводниковых материалов.
- 68) Элементарные полупроводники: германий и кремний.
- 69) Полупроводниковые соединения A<sub>3</sub>B<sub>5</sub> и A<sub>2</sub>B<sub>6</sub>. Кристаллохимические особенности.
- 70) Химические основы легирования полупроводников.
- 71) Гетероструктуры и сверхрешетки.
- 72) Основные области применения полупроводников.
- 73) Диэлектрики. Химическая и физическая природа диэлектриков. Наведенная и спонтанная поляризация.
- 74) Сегнетоэлектрики, пироэлектрики и пьезоэлектрики. Примеры.
- 75) Области применения сегнетоэлектриков, пироэлектриков и пьезоэлектриков.
- 76) Магнитные материалы. Функциональные параметры. Классификация магнитных материалов, основные структуры и свойства (металлы и сплавы, оксиды переходных металлов, шпинели, гранаты, перовскиты, гексаферриты).
- 77) Области применения, взаимосвязь структуры и свойств.
- 78) Материалы с эффектом гигантского (ГМС) и колоссального (КМС) магнитного сопротивления.



79) Оптические материалы. Люминесцентные материалы и люминофоры. Фосфоресцирующие материалы.

80) Твердотельные источники лазерного излучения (рубиновый и неодимовый лазеры).

81) Нелинейные оптические материалы. Основные области применения.

82) Сверхпроводящие материалы. Традиционные (металлы и интерметаллиды) и высокотемпературные (оксиды) сверхпроводники.

83) Взаимосвязь состав - структура - свойство для высокотемпературных сверхпроводников на основе купратов. Области и перспективы применения.

84) Тугоплавкие материалы. Металлы и сплавы, оксиды, карбиды, бориды, нитриды, силициды.

85) Композиционные материалы, их классификация и методология создания. Металлсодержащие композиционные материалы.

86) Аморфные материалы и стекла. Факторы, влияющие на стеклообразование.

87) Оксидные и халькогенидные стекла. Электропроводящие стекла. Металлические стекла.

88) Стеклокерамика. Ситаллы. Различные области применения стекол.

89) Жидкие кристаллы.

90) Органические функциональные материалы. Основные типы и области применения.

91) Биоматериалы.

Типовой образец задания приведен в Приложении 1.

Пользование различными техническими устройствами, кроме ЭВМ компьютерного класса и программным обеспечением, необходимым для решения поставленных задач, не допускается. При желании аспиранта покинуть пределы аудитории во время экзамена экзаменационный билет после его возвращения заменяется.

Преподаватель имеет право после проверки письменных ответов на экзаменационные вопросы и решенных на компьютере задач задавать аспиранту в устной форме уточняющие вопросы в рамках содержания экзаменационного билета, выданного аспиранту.

Иные нормы, регламентирующие процедуру проведения экзамена, представлены в Положении о текущем контроле успеваемости и промежуточной аттестации студентов.

## **9.2. Оценочные средства для проведения промежуточной аттестации в форме зачета**

1. Вид промежуточной аттестации в форме зачета.

Вид промежуточной аттестации устанавливается преподавателем:

по результатам текущего контроля успеваемости обучающегося без дополнительных контрольных испытаний;

по результатам дополнительного итогового контрольного испытания при наличии у аспирантов задолженностей по текущему контролю.

2. При промежуточной аттестации без выполнения дополнительного итогового контрольного испытания аспиранту в обязательном порядке описываются критерии проставления зачёта:

«зачтено» - выставляется обучающемуся при условии выполнения им всех контрольных мероприятий: посещение лекций в объеме не менее 80% контактной работы с преподавателем, выполнения и защиты заданий на практических занятиях.

При промежуточной аттестации с выполнением заданий дополнительного итогового контрольного испытания аспиранту выдается билет с вопросами и задачами.

Число заданий для дополнительного итогового контрольного испытания – 10.

Число вопросов – 3 (2 вопроса для категории «знать» и 1 вопрос для категории «уметь»).

Продолжительность 60 минут.

3. Шкала оценивания промежуточной аттестации - «зачтено», «не зачтено».

4. Критерии выполнения контрольного испытания и условия проставления зачета:

Для категории «знать» (бинарный критерий)

Ниже базового – 0 баллов;

Базовый уровень – 1 балл;

Критерии оценки и ее значение для категории «уметь» (бинарный критерий):

Отсутствие умения – 0 баллов;

Наличие умения – 1 балл.

Критерии итоговой оценки за зачет:

«зачтено» - при сумме баллов 2 или 3;

«не зачтено» - при сумме баллов 0 или 1.

5. Для дополнительного итогового испытания аспиранту в обязательном порядке предоставляется:

База заданий, предназначенных для предъявления обучающемуся на дополнительном итоговом контрольном испытании (типовой образец задания приведен в Приложении 2);

Методические материалы, определяющие процедуру проведения дополнительного итогового испытаний и проставления зачета.

6. Задание выполняется письменно и с использованием ЭВМ.

**7. База заданий, предъявляемая обучающимся на зачете:**

1) Современные проблемы химического материаловедения. Классификационные признаки в химическом материаловедении.

2) Классификация материалов по этапу переработки; по их назначению; по наиболее важным для определенных условий свойствам или их совокупности; по условиям применения материала; по структурным признакам; по макроструктуре (агрегатному состоянию).

3) Классификация твердых материалов по количеству фаз и масштабу неоднородностей структуры; по микроструктуре; по атомно-молекулярной структуре.

4) Физико-химические, функциональные, целевые свойства и характеристики материалов.



- 5) Строение кристаллических твердых веществ. Понятие о симметрии кристаллической решетки. Кристаллографические пространственные группы симметрии. Выбор и типы элементарных ячеек.
- 6) Молекулярные кристаллы.
- 7) Кристаллы с ионными и ковалентными решетками. Правила Полинга.
- 8) Металлы и сплавы. Интерметаллические соединения.
- 9) Кристаллы с участием водородных и ван-дер-ваальсовых связей.
- 10) Супрамолекулярные образования. Размеры атомов или ионов. Координационные числа.
- 11) Способы организации структур. Структуры с гексагональной и кубической плотнейшими упаковками. Тетрагональная упаковка.
- 12) Дефекты упаковок, политипизм.
- 13) Полиэдрическое описание кристаллических структур. Изоморфизм.
- 14) Некоторые наиболее важные структурные типы.
- 15) Структуры каменной соли ( $\text{NaCl}$ ) и хлорида цезия ( $\text{CsCl}$ ), сфалерита и вюрцита ( $\text{ZnS}$ ), флюорита ( $\text{CaF}_2$ ) и антифлюорита ( $\text{Na}_2\text{O}$ ).
- 16) Структурные типы арсенида никеля ( $\text{NiAs}$ ), иодида кадмия ( $\text{CdI}_2$ ) и рутила ( $\text{TiO}_2$ ).
- 17) Структурные типы перовскита ( $\text{CaTiO}_3$ ) и шпинели ( $\text{MgAl}_2\text{O}_4$ ).
- 18) Общие сведения о структурах силикатов и алюмосиликатов.
- 19) Соединения внедрения и клатраты.
- 20) Органические кристаллические структуры.
- 21) Твердые растворы замещения, внедрения и вычитания. Изовалентное и гетеровалентное замещение.
- 22) Структура аморфных твердых тел. Функция радиального распределения.
- 23) Нерегулярные плотнейшие упаковки. Описание аморфных структур в полиэдрах. Кластерная модель.
- 24) Стеклообразное состояние вещества. Факторы, влияющие на стеклообразование.
- 25) Кинетическая природа стеклообразования. Ближний порядок. Структурные единицы.
- 26) Топология сочленения структурных единиц на примере кварцевого стекла.
- 27) Структура квазикристаллов. Несоразмерные структуры. Структура жидких кристаллов.
- 28) Типы химической связи в твердом теле.
- 29) Ван-дер-ваальсово взаимодействие в молекулярных кристаллах, клатраты.
- 30) Ионная модель строения кристаллов, константа Моделунга, энергия ионной решетки.
- 31) Цикл Борна-Габера и термохимические расчеты.
- 32) Основы теорий кристаллического поля и поля лигандов применительно к твердым телам. Влияние d-электронов.
- 33) Энергия стабилизации кристаллическим полем и катионное распределение. Эффект Яна-Теллера.

- 34) Сравнение тетраэдрического и октаэдрического окружений. Эффект неподделенных электронных пар.
- 35) Зонная структура кристаллов. Образование зон в результате перекрывания орбиталей. Уровень Ферми.
- 36) Заселенность зон, ее влияние на электрофизические свойства кристаллов. Валентная зона, запрещенная зона, зона проводимости.
- 37) Металлы и диэлектрики. Собственные и примесные полупроводники. Электронная и дырочная проводимость.
- 38) Общие представления о методах расчета зонной структуры кристаллов. Границы применимости зонной модели.
- 39) Цепочечные структуры и одномерная проводимость. Двумерные проводники и интеркаляты. Пайерлсовское искажение.
- 40) Слабые невалентные взаимодействия в твердых супрамолекулярных образованиях. Наноструктуры, объемные кластеры.
- 41) Совершенные и несовершенные кристаллы. Типы дефектов.
- 42) Электронные дефекты. Собственные точечные дефекты. Термодинамические причины образования точечных дефектов.
- 43) Дефектообразование и нестехиометрия кристаллов. Дефекты по Шоттки и Френкелю.
- 44) Примесные точечные дефекты. Нейтральные и заряженные точечные дефекты.
- 45) Квазихимическая модель описания равновесия точечных дефектов.
- 46) Взаимодействие точечных дефектов. Ассоциаты дефектов. Центры окраски.
- 47) Взаимосвязь концентрации примесей и собственных точечных дефектов.
- 48) Влияние точечных дефектов на свойства неорганических веществ.
- 49) Методы создания неравновесных концентраций точечных дефектов: закалка, механическое и радиационное воздействие.
- 50) Подвижность точечных дефектов. Диффузия и самодиффузия в твердых телах. Основные механизмы самодиффузии. Коэффициент диффузии, энергия активации диффузии.
- 51) Диффузия, обусловленная градиентом концентраций, законы Фика.
- 52) Диффузия точечных дефектов в электрическом поле. Уравнение Нернста-Эйнштейна.
- 53) Методы исследования диффузии. Ионная проводимость. Подвижность, числа переноса. Температурная зависимость ионной проводимости.
- 54) Собственная и примесная проводимость. Суперионные проводники (твердые электролиты).
- 55) Твердые тела со структурной разупорядоченностью. Протяженные дефекты.
- 56) Структуры кристаллографического сдвига. Дефекты упаковки.
- 57) Границы блоков и антифазные домены (границы). Гетерогенные включения.
- 58) Нейтральные и заряженные протяженные дефекты.



- 59) Дислокации в кристаллах, основные виды. Причины возникновения дислокаций. Движение дислокаций.
- 60) Влияние дислокаций на свойства кристаллов. Экспериментальные методы исследования дислокаций.
- 61) Поверхность как дефект строения твердого тела. Поверхностная энергия кристалла.
- 62) Искажение структуры и электронного строения в приповерхностных слоях.
- 63) Роль поверхности в химических реакциях твердых тел.
- 64) Роль соотношения объем-поверхность в свойствах твердых тел.
- 65) Общие особенности химии твердых наноразмерных частиц.
- 66) Экспериментальные методы изучения поверхности.

Преподаватель имеет право после проверки письменных ответов задавать аспиранту в устной форме уточняющие вопросы в рамках задания, выданного аспиранту.

### **9.3. Оценочные средства для проведения промежуточной аттестации в форме курсового проекта или курсовой работы**

Учебным планом курсовая работа (проект) по дисциплине не предусмотрены.

### **10. Методические рекомендации по организации изучения дисциплины**

Аспиранты перед началом изучения дисциплины ознакомлены с системами кредитных единиц и балльно-рейтинговой оценки, которые должны быть опубликованы и размещены на сайте вуза или кафедры.

В учебный процесс внедрена субъект-субъектная педагогическая технология, при которой в расписании каждого преподавателя определяется время консультаций аспирантов по закрепленному за ним модулю дисциплины.

Аспиранты, изучающие дисциплину, обеспечены учебной и научной литературой для выполнения всех видов самостоятельной работы, и учебно-методическим комплексом по дисциплине.

### **11. Внесение изменений и дополнений в рабочую программу дисциплины**

Кафедра ежегодно обновляет содержание рабочих программ дисциплин, которые оформляются протоколами заседаний дисциплин, форма которых утверждена Положением о рабочих программах дисциплин.

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования  
«Тверской государственный технический университет»

Научная специальность – 2.6.17 Материаловедение (химические науки)  
Кафедра Биотехнологии, химии и стандартизации  
Дисциплина «Химическое материаловедение»  
Семестр 7


**ЭКЗАМЕНАЦИОННЫЙ БИЛЕТ № 1**

1. Задание для категории «знать» – или 0, или 1, или 2 балла:  
Выращивание из расплавов и растворов. Методы Чохральского и Бриджмена-Стокбаргера.
3. Задание для категории «уметь» – или 0, или 2 балла:  
Опишите принципы рентгенфлуоресцентного анализа.
4. Задача для категории «уметь» – или 0, или 2 балла:  
Предложите не менее трех направлений использования биоматериалов.

**Критерии итоговой оценки за экзамен:**

- «отлично» – при сумме баллов 5 или 6;
- «хорошо» – при сумме баллов 4;
- «удовлетворительно» – при сумме баллов 3;
- «неудовлетворительно» – при сумме баллов 0, 1 или 2.

Составитель: д.х.н., профессор кафедры БХС  М.Г. Сульман

Заведующий кафедрой БХС, д.х.н., профессор  М.Г. Сульман



Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования  
«Тверской государственный технический университет»

Научная специальность – 2.6.17 Материаловедение (химические науки)  
Кафедра Биотехнологии, химии и стандартизации  
Дисциплина «Химическое материаловедение»  
Семестр 6

**ЗАДАНИЕ ДЛЯ ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ИТОГОВОГО  
КОНТРОЛЬНОГО ИСПЫТАНИЯ № 1**

1. Задание для категории «знать» – или 0, или 1 балл:  
Способы организации структур. Структуры с гексагональной и кубической плотнейшими упаковками. Тетрагональная упаковка
2. Задание для категории «знать» – или 0, или 1 балл:  
Роль поверхности в химических реакциях твердых тел.
3. Задача для категории «уметь» – или 0, или 1 балл:  
Приведите сравнение тетраэдрического и октаэдрического окружений в твердых материалах.

**Критерии итоговой оценки за зачет:**

«зачтено» - при сумме баллов 2 или 3;

«не зачтено» - при сумме баллов 0 или 1.

Составитель: д.х.н., профессор кафедры БХС  М.Г. Сульман

Заведующий кафедрой БХС, д.х.н., профессор  М.Г. Сульман