

Министерство образования и науки Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
«Кемеровский государственный университет»
Кафедра «Химии твердого тела»



УТВЕРЖДАЮ
Проректор по НРИИ
К.Е. Афанасьев
2012 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
ОД.А.03 «ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ ТВЕРДОГО ТЕЛА»

*для аспирантов специальности
02.00.04 – Физическая химия*

*Квалификация (степень)
Кандидат наук*

Кемерово 2012 г.

Рабочая программа составлена на основании паспорта научной специальности 02.00.04 - физическая химия, в соответствии с Программой-минимум кандидатского экзамена по специальности 02.00.04 – «Физическая химия» по физико-математическим и химическим наукам, утвержденной приказом Министерства образования и науки РФ №274 от 08.10.2007 г., и учебным планом КемГУ по основной образовательной программе аспирантской подготовки.

Составитель рабочей программы: Кригер В.Г., профессор кафедры «Химия твердого тела», доктор физико-математических наук.

Рабочая программа дисциплины
обсуждена на заседании кафедры химии твердого тела

Протокол № 10 от « 31 » мая 201 2 г.
Зав. кафедрой ХТТ _____ Захаров Ю.А.
(подпись) Ф. И. О

Рабочая программа утверждена на заседании ученого совета химического факультета
протокол № 11 от 28.05.2012

Декан химического факультета

 А.А. Мороз

Начальник отдела аспирантуры и докторантуры

 М.И. Рябова

« 25 » 06 2012 г.

1. Цели освоения дисциплины

Целью освоения дисциплины "Физическая химия твердого тела" является углубленное изучение теоретических и прикладных основ физической химии твердого тела, необходимых для самостоятельной научно-исследовательской деятельности аспиранта, требующей широкой фундаментальной подготовки в современных направлениях техники и технологии.

2. Место дисциплины в структуре ООП

Дисциплина "Физическая химия твердого тела" относится к циклу обязательных дисциплин.

Физическая химия твердого тела является разделом физической химии, изучает природу взаимодействий в твердых телах, их строение, свойства и реакционную способность. Объектами изучения являются твердые тела, в частности энергетические материалы, дефекты и электронные возбуждения кристаллической решетки.

3. Требования к знаниям и умениям

В результате освоения дисциплины обучающийся должен демонстрировать следующие результаты образования:

Знать:

- основные понятия физической химии;
- характеристики ионных и электрон-дырочных стадии процессов в твердых телах;
- основы процессов с участием дефектов и методов их регистрации, связь зарядового состояния дефектов с энергетическим положением их уровней в запрещенной зоне.

Уметь:

- рассчитывать и оценивать константы скоростей и времен релаксации диффузионных и дрейфовых стадий
- анализировать вопросы, связанные с физико-химическими методами исследования строения и реакционной способности твердых тел.

Владеть:

- стратегией применения расчетных методов к исследованию структуры и свойств твердых тел;
- общими основами применения физико-химических методов в физической химии твердого тела.

4. Структура и содержание дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 зачетную единицу, 36 часов.

4.1 Лекционные (теоретические) занятия

№ раздела	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела дисциплины	Трудоемкость, часов
1	2	3	4
1	Виды взаимодействия в природе	Электромагнитное взаимодействие. Оценка расстояний между атомами в различных агрегатных состояниях. Размеры атомов. Типы связи в твердых телах. Ионная, ковалентная, металлическая, водородная и связь Ван-дер-Ваальса. Перенос заряда, энергия. Примеры.	2
2		Ионный тип связи. Потенциал	2

	Ионный тип связи.	парного взаимодействия. Природа сил отталкивания. Энергия решетки ионного кристалла в приближении ближайших соседей. Постоянная Моделунга. Модуль объёмного сжатия. Расчет энергии решетки и определение параметров потенциала взаимодействия ионов в кристалле.	
• 3	Определение физико-химических параметров ионных соединений	Сравнение равновесных межионных расстояний в кристаллах и молекулах щелочно-галогидных соединений. Определение параметров потенциала, энергии связи и модуля объёмного сжатия. Цикл Борна-Габера для ионного кристалла. Определение ширины запрещенной зоны и локальных уровней дефектов в 3D ионных кристаллах.	2
• 4	Связь Ван-дер-Ваальса.	Связь Ван-дер Ваальса. Природа сил связи. Потенциал Ленарда-Джонсона. Расчет энергии связи кристаллов инертных элементов. Металлический тип связи. Потенциал Томаса-Ферми.	2
• 5	Дефекты твердых тел	Точечные дефекты, центры окраски, дислокации. Процессы с участием дефектов и методы их регистрации: диффузия, ионная проводимость. Дефекты по Френкелю и по Шоттки.	2
• 6	Расчет концентрации дефектов в кристалле.	Расчет концентрации дефектов в беспримесном одновалентном кристалле. Расчет равновесной концентрации дефектов при разупорядочении по Френкелю. Закон действующих масс. Расчет концентрации дефектов в кристаллах с примесью.	2
• 7	Подвижность дефектов в кристаллах. Определение констант скоростей ионных стадий	Расчет подвижности дефектов в кристаллах. Соотношение Эйнштейна. Ионная проводимость, числа переноса, собственная и примесная проводимость. Изотерма относительной проводимости. Определение параметров ионного разупорядочения. Расчет констант скоростей и времен релаксации диффузионных и дрейфовых стадий. Определение скоростей термической генерации и рекомбинации дефектов	2
• 8	Элементы зонной теории твердого	Процессы генерации, рекомбинации и миграции носителей. Эффективная масса носителей заряда. Закон сохранения импульса при движении	2

	дела	электронов в кристаллах. Поляризация кристаллической решетки носителями заряда. Подвижности электронов и дырок в ионных кристаллах	
9	Оценка констант скоростей электронно – дырочных стадий	Рассеяние на примесях. Сечение захвата электронов и дырок на заряженных и нейтральных центрах. Оценка констант и характерных времен релаксации стадий. Расчет констант термического возбуждения электронов и дырок с локальных уровней.	2
Итого			18

4.2. Практические (семинарские) занятия - нет

4.3. Лабораторные занятия - нет

4.4. Самостоятельная работа аспиранта

Наименование раздела дисциплины	Вид самостоятельной работы	Трудоемкость, часов
1	2	3
1. Типы связей в кристаллах	Основные виды связей в кристалле, их геометрические и энергетические параметры. Влияние характера связи на реакционную способность, физические свойства кристаллов (Проработка учебного материала по учебной и научной литературе).	4
2. Ионный тип связи.	Расчет физико-химических параметров соединений с ионной связью. Учет энергии отталкивания вторых соседей. Взаимосвязь параметров потенциала взаимодействия ионов в кристаллах и молекулах с преимущественной ионной связью (Проработка учебного материала по учебной и научной литературе).	4
3. Определение физико-химических параметров ионных соединений	Методика расчета равновесных расстояний в кристаллах и молекулах с преимущественно ионной связью. Связь параметров молекулы и кристалла. Модуль упругости. Частота колебания. Влияние вклада ковалентной связи. (Проработка учебного материала по учебной и научной литературе).	4
4. Связь Ван-дер-Ваальса.	Классификация Ван-дер-ваальсовых сил. Геометрические и энергетические параметры связи. Молекулярные кристаллы. Металлический тип связи. Физико-химические методы исследования строения кристаллов (Проработка учебного материала по учебной и научной литературе).	4
5. Реальная структура твердых тел	Макроскопические и микроскопические дефекты кристалла. Основные типы дефектов. Структурные и химические дефекты. Свойства дефектов, физико-химические методы исследования. Методы наблюдения дислокаций, типы дислокаций. (Проработка учебного материала по учебной и научной литературе).	4
6. Расчет концентрации дефектов в кристалле.	Связь зарядового состояния дефектов с энергетическим положением их уровней в запрещенной зоне. Влияние температуры, давления и состава газовой фазы на концентрации дефектов в твердом теле и электронную проводимость	4

	кристалла. (Проработка учебного материала по учебной и научной литературе).	
7. Подвижность дефектов в кристаллах. Определение констант скоростей ионных стадий	Ионные, электрон-дырочные стадии процессов. Роль дефектов в твердофазном разложении. Диффузно-контролируемые реакции. Приближенное решение. Стационарный режим. Нестационарные условия. (Проработка учебного материала по учебной и научной литературе).	4
8. Элементы зонной теории твердого тела	Оценка ширины запрещенной зоны. Расчет положения уровня Ферми ионных кристаллов в зависимости от температуры и дефектности ионного кристалла, положение уровня Ферми при протекании в кристалле химической реакции. (Проработка учебного материала по учебной и научной литературе).	4
9. Оценка констант скоростей электронно – дырочных стадий	Физико-химические, математические методы оценки констант скоростей химических реакций. Влияние величин констант отдельных стадий на кинетику процесса. Анализ систем дифференциальных уравнений, отражающих кинетику многостадийного процесса. (Проработка учебного материала по учебной и научной литературе).	4
Итого		36

5. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

5.1. Учебно-методическое обеспечение дисциплины

№ п/п	Библиографическое описание рекомендуемого источника литературы	Шифр библиотеки КемГУ	Планируемое число пользователей	Число экз., выделяемое библиотекой
1	2	3	4	5
	Основная			
1.	Ярославцев А.Б. Химия твердого тела [Текст] М. : Научный мир , 2009 .- 327 с.	521 Я 76	7	10
2.	Захаров Ю.А., Рябых С.М., Сечкарев Б.А. Химия твердого тела: учеб. пособие [Текст] ; Кемеровский гос. ун-т, Кафедра химии твердого тела .- Кемерово : Кузбассвузиздат , 2006 .- 123 с.	Г521я73 3-38	7	10
	Методические разработки кафедры			
3.	Кригер, В.Г., Каленский, А.В. Рабочая программа по курсу «Избранные главы ХТТ» для специальности 020101 - «Химия» ДС // ГОУ ВПО «Кемеровский государственный университет». - Кемерово, 2010. - 27 с.	Г5/К 82- 627191	7	25

Список учебников (кафедраальный фонд)

- 1 Киттель, Ч. Введение в физику твердого тела. / Ч. Киттел. – М. – 1978. – 792 с.
- 2 Рыбкин, С. М. Фотоэлектрические явления в полупроводниках. / С. М. Рыбкин. – М.: Наука. – 1963. – 495 с.
- 3 Эммануэль, Н.М. Курс химической кинетики. / Н. М. Эммануэль, Д. Г. Кнорре. – М.: Высшая школа. – 1974. – 495 с.
- 4 Барре, П. Кинетика гетерогенных процессов. / П. Борре. – М.: Мир. – 1976. – 400 с.
- 5 Смит, Р. Полупроводники. / Р. Смит – М.: Мир. – 1982. – 562 с.

- 6 Джеймс, Т. Теория фотографического процесса. / Т. Джеймс. – Л: Химия. – 1980. – 672 с.
- 7 Креггер, Ф. Химия несовершенных кристаллов. / Ф. Креггер – М.: Мир. –1969. – 654 с.
- 8 Николис, Г. Самоорганизация в неравновесных системах. / Г. Николис, И. Пригожий. – М.: Мир. – 1979. –512 с.
- 9 Бутягин, П. Ю. Химическая физика твердого тела. / П. Ю. Бутягин. – М.: МГУ. – 2007. – 310 с.
- 10 Вест, А. Химия твердого тела. Теория и приложения: 2-х ч. / А. Вест. – М.: Мир. – 1988. Ч. 1. – 588 с., Ч. 2 – 336 с.
- 11 Вест, А. Химия твердого тела. Теория и приложения: 2-х ч. / А. Вест. – М.: Мир. – 1988. Ч. 2 – 336 с.
12. Фистуль, В. И. Физика и химия твердого тела, т. 1. / В. И. Фистуль. – М.: Металлургия. – 1995. – 480 с.
13. Фистуль, В. И. Физика и химия твердого тела, т. 2. / В. И. Фистуль. – М.: Металлургия. – 1995. – 320 с.
- 14 Боуден, Ф. Быстрые реакции в твердых веществах. / Ф. Боуден, А. Иоффе. – М.: Мир. – 1969. – 247 с.
- 15 Янг, Д. Кинетика разложения твердых веществ. / Д. Янг. – М.: Мир. – 1969. – 263 с.
16. Бутягин П.Ю. Химическая физика твердого тела / П.Ю. Бутягин. – М.: МГУ. – 2006. – 272 с.

5.2. Информационное обеспечение дисциплины

Программное обеспечение и Интернет-ресурсы:

1. Учебные материалы химического факультета МГУ <http://www.chem.msu.ru/rus/teaching/inorg.html>.
2. Википедия, химия твердого тела http://en.wikipedia.org/wiki/Solid-state_chemistry.
3. Учебные материалы сайта университета г. Огайя, химия твердого тела http://www.chemistry.ohio-state.edu/~woodward/chem_754.htm ()
4. Электронная библиотека РФФИ <http://elibrary.ru/defaultx.asp>
5. Сайт о химии для химиков <http://xumuk.ru>
6. Открытый доступ к вузовской электронной библиотеке на <http://e-lib.kemtip.ru> на платформе Web-ИРБИС-64.2009, ЭБС «Инфра-М» <http://www.znaniium.com/> (договор №130 эбс от 02.11.2011), «Лань» <http://e.lanbook.com/> (контракт 1/11-2011 от 07.11.2011), к виртуальному читальному залу Электронной Библиотеки Диссертаций РГБ <http://www.diss.rsl.ru/>, к удаленным сетевым ресурсам консорциума НЭИКОН <http://www.neicon.ru/>