

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РФ
Федеральное государственное бюджетное образовательное
учреждение высшего образования
«ДАГЕСТАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

«УТВЕРЖДЕНА»

На ученом совете ФГБОУ ВО
«Дагестанский государственный
университет»

Протокол № 7 от 31.03.2022,

Ректор университета

 М.Х. Рабаданов



**Программа минимум
кандидатского экзамена по специальности**

1.4.15 Химия твердого тела

Направления подготовки 04.06.01 «Химические науки»

Махачкала, 2022 год

Программа кандидатского экзамена по специальности 1.4.15 Химия твердого тела составлена в 2022 на основе паспорта научной специальности и учебного плана ДГУ по основной образовательной программе аспирантской подготовки.

Разработчик: д.т.н., профессор кафедры физической и органической химии Абдулагатов И.М.

Программа обсуждена и одобрена на заседании кафедры физической и органической химии от «26» февраля 2022 г, протокол № 6.

Зав. кафедрой И. Абдулагатов Абдулагатов И.М.

Программа кандидатского экзамена по специальности 1.4.15 Химия твердого тела утверждена на заседании Совета химического факультета от «25» марта 2022 г., протокол № 7.

Председатель Совета, декан ХФ М.А. Бабуев Бабуев М.А.

Программа кандидатского экзамена согласована с управлением аспирантуры и докторантуры

«30» марта 2022 г. Э.Т. Рамазанова Рамазанова Э.Т.

Введение

Программа предназначена для подготовки к сдаче кандидатского экзамена по научной специальности 1.4.15 Химия твердого тела.

В основу настоящей программы положены следующие дисциплины: химическая связь и структура твердых веществ, электронные свойства твердых тел, дефекты в твердом теле, диффузия и ионная проводимость твердых тел, поверхность и структурные (фазовые) превращения в твердом теле, химические реакции твердых химических соединений, методы направленного синтеза твердых веществ и материалов, химия материалов и оборудование в технологии твердых веществ и материалов.

1. Химическая связь и структура твердых веществ

1.1 Взаимосвязь состав-строение-свойство.

Типы межатомных связей и классификация твердых веществ. Ионная связь и ионные кристаллы. Энергия связи и полная энергия кристалла. Кристаллографическое и кристаллохимическое описание твердых тел. Типы кристаллических решеток. Эффективный радиус. Полиморфизм. Изоморфизм. Геометрия ковалентных кристаллов. Трехмерные и двухмерные структуры. Структура алмаза. Силикаты - кристаллы с кремнекислородным скелетом. Металлы. Некоторые теории металлической связи. Основные структуры металлов. Кристаллы с промежуточным характером связи, их особые свойства. Некристаллические твердые тела. Характеристики некристаллических веществ. Стеклообразование. Строение стекла.

1.2 Невалентные силы сцепления в твердых телах.

Ван-дер-ваальсовское взаимодействие и основные типы структур с Ван-дер-ваальсовским взаимодействием.

1.3 Твердые растворы.

Условия образования твердых растворов (рентгенография порошков, определение плотности, определение температур фазовых переходов). Твердые растворы замещения. Твердые растворы внедрения. Другие механизмы образования твердых растворов.

2. Электронные свойства твердых тел

2.1 Квантово-химическое описание твердого тела.

Особенности образования связи в молекуле и в твердом теле. Образование энергетических зон в диэлектриках (на примере NaCl) и полупроводниках (на примере кремния) с точки зрения химической связи (ММО). Классификация твердых тел с точки зрения зонной теории.

2.2 Зонные и кластерные методы квантовой химии твердого тела.

Классификация, области применения. Современные квантово-химические методы описания природы химической связи в конденсированных веществах.

3. Дефекты в твердом теле

Общие представления о дефектах в кристаллах. Электронные дефекты. Атомные дефекты: точечные дефекты, примесные точечные дефекты. Заряженные и незаряженные дефекты. Дислокационные (линейные) дефекты. Макроскопические дефекты. Виды объемных дефектов: трещины, поры и др. Нестехиометрия и дефекты. Описание дефектообразования с помощью квазихимических реакций. Поверхность как дефект в строении твердого тела.

4. Диффузия и ионная проводимость твердых тел

Диффузия. Объемная и поверхностная диффузия. Законы Фика. Коэффициент диффузии. Механизм диффузии: вакансионный, междоузельный и эстафетный. Диффузия при облучении. Ионная проводимость твердых веществ и материалов.

5. Структурные (фазовые) превращения в твердом теле

Фазовые превращения (переходы) в кристаллических твердых телах. Фазовые диаграммы. Классификация фазовых превращений на основе изменения термодинамических свойств. Переходы первого и второго рода. Кинетика фазовых переходов. Зародышеобразование. Гомогенное и гетерогенное образование зародышей новой фазы. Энергия образования критического зародыша.

6. Поверхность твердых тел

Соотношение объем-поверхность для твердого тела. Структурные элементы поверхности кристаллов: молекулярно-гладкие и молекулярно-шероховатые грани, ступени роста, вершины и ребра кристаллов. Структура приповерхностной зоны кристалла, межатомные расстояния в ней. Поверхностный потенциал и двойной электрический слой на поверхности кристаллов. Поверхностная локализация электронов. Поверхность аморфных твердых тел. Физическая адсорбция. Хемосорбция. Поверхностная диффузия. Явление смачивания и растекания. Роль дисперсности в свойствах твердого вещества. Минимальные размеры частиц индивидуального твердого соединения.

7. Химические реакции твердых химических соединений

7.1 Два типа гетерогенных реакций твердых химических соединений.

Реакции с разрушением кристаллической решетки (остова). Реакции функциональных групп - поверхностные химические реакции. Общие закономерности гетерогенных реакций с разрушением остова. Кинетические

характеристики процессов превращения твердых тел. Методы экспериментального исследования кинетики гетерогенных реакций. Типы гетерогенных реакций: реакции, для которых характерно постепенное падение скорости процесса и топохимические реакции. Топохимические гетерогенные реакции. Зародышеобразование. Кинетика образования зародышей (ядер) фаз твердых продуктов. Диффузионный и кинетический пределы протекания гетерогенных реакций. Реакции с участием только твердых фаз (твердофазные реакции). Классификация. Экспериментальное изучение твердофазных реакций. Кинетика твердофазных реакций. Транспортные реакции.

7.2 Факторы, влияющие на реакционную способность твердых тел.

Примеси. Дефекты структуры. Облучение. Фотографический процесс. Поверхностные химические реакции. Влияние химического состава поверхности на реакционную способность твердых веществ.

8. Методы направленного синтеза твердых веществ и материалов

8.1 Переход вещества в твердую фазу. Условия образования твердых атомных соединений.

Устойчивость твердого тела. Термодинамические условия синтеза твердых веществ. Процессы осаждения. Жидкофазное осаждение гидроксидов. Газофазное осаждение. Теоретические основы. Механизм конденсации вещества. Гетерогенное образование зародышей. Термодинамическая и статическая теория зародышеобразования. Эпитаксиальный рост пленок. Механизм роста кристаллов. Выращивание монокристаллов из расплава, раствора, газовой фазы (обзор методов). Получение пленок испарением.

8.2 Химические методы осаждения. Газотранспортные реакции.

Жидкофазная эпитаксия. Методы прецизионного, организуемого синтеза. Метод молекулярного наслаивания. Молекулярная эпитаксия. Планарная технология. Атомная послойная эпитаксия. Молекулярно-лучевая эпитаксия. Наноструктуры. Квантовые размерные ограничения. Квантовые эффекты.

9. Методы исследования свойств веществ и материалов

Дифракционные методы. Рентгенография порошков. Электронография. Нейтронография. Микроскопические методы. Спектральные методы. Оптическая спектроскопия. ИК-, УФ-, КР- спектры. Радиоспектроскопические методы исследования (ЯМР, ЭПР, ЯКР). Электронная спектроскопия. ЭСХА, РФС, УФС, Оже-спектроскопия.

10. Химия материалов

10.1 Роль химии в науке о материалах.

Химический индивид, вещество, материал. Классификация материалов по составу, структуре, свойствам. Химические соединения постоянного и переменного состава. Дальтониды, бертоллиды, мнимые соединения.

10.2 Методы очистки и их классификация. Кристаллизационная очистка.

Равновесный и эффективный коэффициенты распределения. Метод направленной кристаллизации. Зонная плавка и распределение примесей.

10.3 Классификация полупроводниковых материалов.

Элементарные полупроводники. Германий и кремний. Физико-химические основы получения германия и кремния. Их основные свойства и применение.

10.4 Полупроводниковые соединения A2B5

Кристаллохимические особенности этих соединений. Фазовые диаграммы. Взаимосвязь характера связи и основных свойств этих соединений.

10.5 Полупроводниковые соединения A2B6, природа связи в этих соединений

Структура и основные свойства этих соединений. Сульфид цинка, его свойства и применение. Полупроводниковые сверхрешетки.

2.10.6 Поликристаллические и многофазные материалы.

Примеры. Спекание дисперсной смеси. Рост зерен, фазовый состав материалов. Диаграммы состояния. Композиционные материалы. Свойства материалов. Электрические свойства. Магнитные свойства. Сверхпроводимость

10.7 Композиционные материалы, их классификация.

Химические и физические свойства компонентов композиционных материалов.

11. Оборудование в технологии твердых веществ и материалов

11.1 Типовые процессы химической технологии, их место в технологии твердофазных материалов.

Химические реакторы, их классификация. Высокотемпературные процессы (плазмохимия, пирогенные синтезы).

11.2 Высокодисперсные оксиды кремния, титана, алюминия, циркония.

Технология получения. Сырьевая база. Методы исследования качества конечного продукта. Жидкофазное и газофазное модифицирование: особенности аппаратно-технического оформления.

11.3 Математическое моделирование химико-технологических процессов и материалов.

Кинетические модели гетерогенных реакций. Оптимизация химикотехнологических процессов.

Рекомендуемая литература

а) печатные издания

1. Барановский, В.И. Квантовая механика и квантовая химия: учебное пособие / В.И. Барановский. - Москва: Academia, 2008. - 383 с. - ISBN 978-5-7695-3961-9

2. Ермаков, А.И. Квантовая механика и квантовая химия: учебное пособие для вузов / А.И. Ермаков. - Москва: Юрайт, 2010. – 555 с. - ISBN 978-5-9916-0587-8

3. Матухин, В.Л. Физика твердого тела: Учебное пособие / В.Л.Матухин, В.Л.Ермаков. – Санкт-Петербург; Москва; Краснодар: Лань, 2010. - 218 с. - ISBN 978-5-8114-0923-5

4. Суздалев, И.П. Нанотехнология: Физико-химия нанокластеров, наноструктур и наноматериалов / И.П.Суздалев. – Изд. 2-е испр. – Москва: Книжный дом «ЛИБРОМ», 2009. – 592 с. - ISBN 978-5-397-00217-2

5. Химическая диагностика материалов / В.Г.Корсаков, М.М.Сычев, С.В.Мякин, Л.Б. Сватовская. – Санкт-Петербург: ПГУПС, 2010. - 224 с. – ISBN 978-5-7641-0254-2

б) электронные издания

1. Артемов, А.В. Физическая химия: учебник для учреждений высшего профессионального образования / А. В. Артемов - Электрон. текстовые дан. - М. : Академия, 2013. - 288 с.- ISBN 978-5-7695-9550-9 // СПбГТИ(ТУ). Электронная библиотека. - URL: <https://technolog.bibliotech.ru> (дата обращения: 01.02.2022). - Режим доступа: для зарегистрированных пользователей.

2. Каллистер, У. Д. Материаловедение: от технологии к применению (металлы, керамика, полимеры) / У. Д. Каллистер, Д. Дж. Ретвич; пер. с англ. под ред. А. Я. Малкина. - СПб. : НОТ, 2011. - 895 с.- ISBN 978-5-91703-022-7 //Лань: электронно-библиотечная система. - URL: <https://e.lanbook.com> (дата обращения: 01.02.2022). - Режим доступа: по подписке.

3. Афанасьев, Б.Н. Физическая химия: учеб.пособие для вузов / Б.Н. Афанасьев, Ю.П. Акулова. – СПб.: Лань, 2012. – 464 с. -ISBN 978-5-8114-1402-4//Лань: электронно-библиотечная система. - URL: <https://e.lanbook.com> (дата обращения: 01.02.2022). - Режим доступа: по подписке.

4. Горшков, В. И. Основы физической химии: учебник / В. И. Горшков, И. А. Кузнецов. – М. : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2021. – 407 с.- ISBN 978-5-906828-87-3//Лань: электронно-библиотечная система. - URL: <https://e.lanbook.com> (дата обращения: 01.02.2022). - Режим доступа: по подписке.

5. Барановский, В. И. Квантовая механика и квантовая химия: учебное пособие / В. И. Барановский. - М.: Краснодар : Лань, 2019. - 428 с. - ISBN 978-5-8114-3961-4// Лань: электронно-библиотечная система. - URL: <https://e.lanbook.com> (дата обращения: 01.02.2022). - Режим доступа: по подписке.