

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего профессионального образования  
«Кемеровский государственный университет»

*Химический факультет*

УТВЕРЖДАЮ

Декан  
химического факультета  
\_\_\_\_\_ Мороз /  
« 25 » \_\_\_\_\_ марта 2013 г.



**Рабочая программа дисциплины**  
***Химия твердого тела в XXI веке***

для специальности **020101.65-Химия** (цикл ОПД.В1.2),

факультет	химический		
курс	3		
семестр	6		
лекции	34 часов	зачет	6 семестр
самостоятельные занятия	30 часов		
Всего часов:	64		

Составитель: к.х.н., доцент каф. ХТТ Д.Г. Якубик

Кемерово  
2013

Рабочая программа дисциплины «Химия твердого тела в XXI веке» цикла общепрофессиональных дисциплин ОПД.В1.2 составлена в соответствии с требованиями Государственного образовательного стандарта второго поколения по специальности 020101.65 «Химия»

Рабочая программа дисциплины  
обсуждена на заседании кафедры химии твердого тела

Рабочая программа дисциплины  
обсуждена на заседании кафедры химии твердого тела

Протокол № 12 от «12» декабря 2013 г.

Зав. кафедрой  Ю.А. Захаров

Одобрено методической комиссией химического факультета

Протокол № 7 от «20» марта 2013 г.

Председатель  О.Н. Булгакова

## 1. ПОЯСНИТЕЛЬНАЯ ЗАПИСКА

### **Актуальность:**

Развитие новых технологий и создание новых материалов требует понимания связи реальной структуры веществ с их составом и свойствами, что и изучает химия твердого тела.

Дисциплина "Химия твердого тела" для студентов третьего курса химического факультета является дисциплиной по выбору.

Рабочая программа составлена на основании Государственного образовательного стандарта высшего профессионального образования для специальности 020101 "Химия."

### **Цель преподавания дисциплины:**

Основной целью данной дисциплины является подготовка студентов к осознанному пониманию превращений и взаимодействий, происходящих внутри твердого тела, на его поверхности, на межфазных границах, в контактах твердых тел с другими средами при различных внешних воздействиях (температура, давление, облучение и т.п.). Для этого, с единых позиций современных представлений рассмотрены: кристаллическая и электронная структура твердых тел с разной природой химической связи; динамика кристаллической решетки и дефекты в твердых телах. На основе этих представлений показаны особенности физико-химических явлений на внешних и внутренних границах твердых тел. Рассмотрены особенности аморфного, стеклообразного и жидкого состояния вещества. Перечисленные общие вопросы должны служить фундаментом трактовки свойств конкретных видов твердых тел, широко применяемых в технике и в современных технологиях. Поэтому в структуру дисциплины включено рассмотрение свойств ряда важнейших материалов: полупроводников, магнетиков, сегнетоэлектриков, пьезоэлектриков, сверхпроводников, наноматериалов.

### **Задачи изучения дисциплины**

Основными задачами дисциплины является: изучение электронной структуры твердых тел, динамики кристаллической решетки, дефектной структуры твердых тел, явлений на поверхности, объемных превращений в твердых телах, реакционной способности твердых тел; изучение физико-химических свойств практически значимых твердых тел.

**Структура дисциплины:** лекционная часть (36 часов), на которой представляется основной теоретический материал; самостоятельная работа (36 часов). Для проверки знаний предусмотрены коллоквиум, контрольные работы, выполнение тестовых заданий и зачет.

**В результате изучения предмета,** студенты должны быть ознакомлены с: электронной структурой твердых тел, динамикой кристаллической решетки, дефектной структурой твердых тел, явлениями на поверхности, объемными превращениями в твердых телах, реакционной способностью твердых тел; физико-химическими свойствами практически значимых твердых тел.

Для изучения и успешного усвоения дисциплины необходимо знание следующих предметов: высшая математика, общая и теоретическая физика, общая химия, кристаллохимия, квантовая химия.

**Контроль знаний** студента осуществляется проведением контрольной работы (5 семестр), выполнения тестовых заданий, коллоквиума и зачета (семестр 5).

**Критерий оценки знаний студентов:**

Работа студента оценивается “зачет” и “незачет”.

“Зачет” ставится при:

- правильном, полном или логично построенном ответе;
- умении оперировать специальными терминами;
- умении приводить примеры.

Либо, если в полном и логичном ответе:

- имеются негрубые ошибки или неточности;
- делаются не вполне законченные выводы или обобщения.

Ошибки при ответе могут быть отредактированы постановкой дополнительного вопроса или решением ситуационной задачи по теме.

“Не зачтено” ставится при:

- ответе на вопрос с грубыми ошибками;
- неумении оперировать специальной терминологией;
- неумении приводить примеры практического использования научных знаний.

## 2. ТЕМАТИЧЕСКИЙ ПЛАН

№	Темы	Объем часов	Лекции	Практ	Лаб	Самостоятельная работа студентов *	Формы контроля
1	Введение: Цели и задачи. Место среди других наук. Классификация твердых тел	2	2				
2	Электронная структура твердых тел	6	4			2	
3	Динамика кристаллической решетки	4	2			2	
4	Дефекты в твердых телах	4	2			2	
5	Линейные и плоские дефекты в твердых телах	4	2			2	
6	Объемные дефекты в твердых телах	4	2			2	Коллоквиум №1
7	Явления на поверхности твердых тел	4,5	2,5			2	
8	Объемные превращения в твердых телах	4	2			2	
9	Реакционная способность твердых тел	4,5	2,5			2	Контрольная №1
10	Твердые тела с металлическим характером связи	7	3			4	
11	Керамические твердые тела	6	2			4	

12	Физика и химия полупроводниковых материалов	8	4			4	
13	Принципы построения композиционных материалов	6	3			3	Коллоквиум №2
14	Свойства наноматериалов	8	3			5	Контрольная №2
							Зачет

**\*Задания для самостоятельного выполнения студентами:**

По теме 1. Стекло. Структура. Свойства. Применение.

По теме 2. Экспериментальное подтверждение существования зонной структуры твердых тел.

По теме 3. Упругие характеристики твердых тел. Экспериментальные определения модулей упругости твердых тел.

По теме 4. Миграция вакансий и самодиффузия атомов в кристалле.

По теме 5. Свойства твердых тел, определяемые дислокациями.

По теме 6. Проявление объемных дефектов в свойствах твердых тел.

По теме 7. Поверхностная диффузия.

По теме 8. Схема дефектообразования при облучении.

По теме 9. Твердофазные реакции с тугоплавкими соединениями.

По теме 10. Перспективы развития новых металлических материалов.

По теме 11. Огнеупорные материалы.

По теме 12. Интегральные схемы, сверхрешетки, варизоны.

По теме 13. Прогноз свойств упорядоченных композитов.

По теме 14. Применение в наностройствах различных наноструктур.

### 3. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

#### 3.1. Введение.....2 часа

Цели и задачи ХТТ. Место среди других наук. Основные химические понятия. Классификация твердых тел. Симметрия в природе и твердых телах. Кристаллографическое и кристаллохимическое описание твердых тел.

#### 3.2. Электронная структура твердых тел .....4 часа

Зонный характер энергетического спектра электронов в твердом теле. Заполнение зон электронами. Плотность квантовых состояний в зонах и их распределение по энергиям. Экспериментальные подтверждения зонной структуры твердых тел. Свойства твердых тел, формируемые энергетическим спектром электронов.

#### 3.3. Динамика кристаллической решетки.....2 часа

Два вида динамики. Дуализм описания колебаний атомов кристаллической решетки. Свойства твердых тел, формируемые фононным спектром.

### **3.4. Дефекты в твердых телах.....2 часа**

Общие представления о дефектах в кристалле. Вакансии в твердых телах. Антиструктурные дефекты. Примесные точечные дефекты. Свойства, определяемые точечными дефектами. Взаимодействие точечных дефектов. Радиационные дефекты.

### **3.5. Линейные и плоские дефекты в твердых телах.....2 часа**

Общие представления о дислокационных дефектах в кристаллах. Энергетика дислокаций. Взаимодействие дислокаций с дефектами. Плоские дефекты.

### **3.6. Объемные дефекты в твердых телах.....2 часа**

Виды объемных дефектов. Макронапряжения. Трещины. Поры.

### **3.7. Явления на поверхности твердых тел.....2,5 часа**

Общие представления о поверхности твердых тел. Структура поверхности. Энергетика поверхности. Явления смачивания и растекания. Электронная эмиссия и поверхностная ионизация. Физическая адсорбция газов на поверхности твердых тел. Хемосорбция. Адсорбционные изменения свойств твердых тел.

### **3.8. Объемные превращения в твердых телах.....2 часа**

Виды объемных превращений. Аллотропические превращения. Мартенситные превращения. Практическое использование объемных превращений в твердых телах.

### **3.9. Реакционная способность твердых тел.....2,5 часа**

Типы твердотельных реакций. Реакции твердое тело-жидкость. Реакции твердое тело-газ. Реакции твердое тело-твердое тело. Активация твердых тел. Внутритвердотельные реакции. Примеры практически важных твердотельных реакций.

### **3.10. Твердые тела с металлическим характером химической связи.....3 часа**

Интерметаллические твердые тела. Пластические свойства металлов. Пластичность металлов и сплавов. Явления ползучести и усталости в металлах. Прочность и жаропрочность металлов. Сверхпроводящие металлы и сплавы. Магнетизм. Оптические свойства металлов.

### **3.11. Керамические твердые тела.....2 часа**

Общие сведения о керамических материалах. Конструкционная керамика. Керамика для контейнеров хранения радиоактивных материалов и отходов. Керамические ферриты. Сверхпроводящая керамика.

### **3.12. Физика и химия полупроводниковых материалов 4 часа**

Общие сведения о полупроводниках. Оптические свойства полупроводников. Фотоэлектрические и фотолюминесцентные свойства полупроводников. Магнитные свойства полупроводников. Очистка и легирование полупроводников - пути формирования их свойств.

### **3.13. Принципы построения композитов..... 3 часа**

Классификация композиционных материалов. Принципы выбора материала матрицы и волокон. Принципы выбора структуры композита и способа его изготовления.

### **3.14. Свойства наноматериалов.....3 часа**

Строение и свойства наноструктур. Твердотельные нанокластеры и наноструктуры. Пленки. Тепловые и механические свойства. Электрические, магнитные и оптические свойства наноструктур.

## **4. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКИЕ ОБЕСПЕЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ**

### **4.1. Список основной литературы**

1. *Вест, А.* Химия твердого тела. Теория и приложения, в 2-х частях. / *А. Вест* - М.: Мир. 1988. - 558 с.(ч.1), 336 с. (ч.2).
2. *Ковтуненко, П. В.* Физическая химия твердого тела. Кристаллы с дефектами. / *П. В. Ковтуненко.* - М.: Высшая школа. 1993. - 352 с.
3. *Орлов, А. Н.* Введение в теорию дефектов в кристаллах. / *А. Н. Орлов* - М.: Высшая школа. 1983. - 144 с.
4. *Третьяков, Ю.Д.* Твердофазные реакции. / *Ю. Д. Третьяков* М.: Изд-во "Химия". 1978. - 360 с.
5. Физическая химия быстрых реакций, под ред. *И.С. Заслонко* - М.: Мир. 1976. - 395 с.
6. *Фистуль, В. И.* Физика и химия твердого тела, в 2-х томах. / *В. И. Фистуль* - М.: Металлургия. 1995. - (т.1) 480 с, (т.2) 320 с.
7. *Фистуль, В.И.* Введение в физику полупроводников / *В. И. Фистуль* - М.: Вш. Шк. 1975. – 319 с.
8. *Павинский, П. П.* Введение в теорию твердого тела./ *П. П. Павинский* – Л.: Изд. Ленинградского университета. 1987. – 255 с.
9. *Лысов, В.Ф.* Практикум по физике полупроводников: Учеб.пособие. / *В.Ф. Лысов.* - М.:Просвещение. 1976. – 208 с.
10. *Волькенштейн, Ф. Ф.* Электронные процессы на поверхности полупроводников при хемосорбции. / *Ф. Ф. Волькенштейн.* — М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит. 1987. — 432 с.
11. *Гегузин, Я. Е.* Живой кристалл.-2-е изд., испр. и доп. / *Я. Е. Гегузин.* - М.:Наука. Гл. ред. Физ.-мат. лит. 1987. – 192 с.
12. *Давыдов, А.С.* Теория твердого тела: Учеб. пособие для вузов. / *А. С. Давыдов* - М.: Наука. 1976. – 639 с.



13. *Вавилов, В. С.* Действие излучений на полупроводники: Учеб. Руководство / *В. С. Вавилов.* - М.:Наука. Физ.-мат.лит. 1988. - 192 с.
14. *Ашкрофт, Н.* Физика твердого тела в. 2-х т. Т.2. :Пер.с англ./ *Н. Ашкрофт, Н. Мермин.* - М.:Мир. 1979. – 422 с.
15. *Гусев, А. И.* Нанокристаллические материалы. / *А. И. Гусев, А. А. Ремпель.* - М.: Физматгиз. 2001. – 242 с.

#### **4.2. Дополнительная литература**

16. *Блейкмор, Дж.* Физика твердого тела. / *Дж. Блейкмор.* - М.: Мир. 1988. - 608 с.
17. *Киттель, Ч.* Введение в физику твердого тела. / *Ч. Киттель* - М.:Наука. 1978. - 791 с.
18. *Смит, Р.* Полупроводники. / *Р. Смит.* - М.: Мир. 1982.- 560 с.
19. *Фридель, Ж.* Дислокации./ *Ж. Фридель.* - М.: Мир. 1967. - 643 с.
20. *Шалимова, К. В.* Физика полупроводников. / *К. В. Шалимова* - М.: Энергия. 1976. - 426 с.
21. *Бонч-Бруевич, В. Л.* Физика полупроводников:Учеб. пос. для вузов.-2-е изд., перераб. и доп./ *В. Л. Бонч-Бруевич, С. Г Калашиников* - М.:Наука. Гл. ред. физ.-мат.лит. 1990. – 688 с.

<i>Сведения об учебниках</i>			Кол-во экз. в библиотеке на момент утверждения программы
Наименование, гриф	Автор	Год издания	
Введение в физику твердого тела: Учеб. пособие для вузов	Киттель Ч.	1978	2
Физика полупроводников: Учеб. пособие для вузов	Бонч-Бруевич В.Л., Калашников С.Г.	1977, 1990	4
Химия твердого тела. Теория и приложения: Учеб. пособие для вузов	Вест А.	1988	4
Физика и химия твердого тела. Т. 1.,2: Учебник для ВУЗов	Фистуль В.И.	1995	10
Действие излучений на полупроводники: Учеб. Рук-во для студентов вузов	Вавилов В.С. и др.	1988	2
Теория твердого тела: Учеб. пособие для вузов	Давыдов А.С.	1976	4
Физика полупроводников: Учеб. пособие для вузов.	Зеегер К.	1977	3
Практикум по физике полупроводников: Учеб. пособие	Лысов В.Ф.	1976	2
Физика полупроводников и диэлектриков: Учеб. пособие для вузов	Орешкин П.Т.	1977	4
Физика твердого тела: Учебник	Павлов П.В., Хохлов А.Ф.	1985	2
Химия твердого тела. Учеб. пособие	Захаров Ю.А. и др.	2006	100

## **5. ФОРМЫ КОНТРОЛЯ**

### **5.1. Вопросы к зачету**

1. Классификация твердых тел.
2. Кристаллохимическое и кристаллографическое описание твердых тел.
3. Зонный характер энергетического спектра электронов в твердых телах.
4. Заполнение зон электронами.
5. Плотность квантовых состояний в зонах.
6. Свойства твердых тел, формируемые энергетическим спектром.
7. Два вида динамики кристаллической решетки.
8. Свойства твердых тел, формируемые фононным спектром.
9. Общие представления о дефектах в твердых телах. Примесные дефекты.
10. Общие представления о дислокациях: энергетика, взаимодействия. Источники образования.
11. Плоские дефекты.
12. Методы определения плотности дислокаций.
13. Виды объемных дефектов.
14. Поверхность твердого тела. Структура.
15. Явления на поверхности: смачивание, адсорбция, хемосорбция, эмиссия.
16. Объемные превращения: аллотропные, мартенситные.
17. Типы твердотельных реакций.
18. Активация твердых тел.
19. Внутри твердотельные реакции.
20. Характеристика твердых тел с металлическим типом связи.
21. Интерметаллические соединения.
22. Явления ползучести и усталости в металлах. Прочность и жаропрочность металлов.
23. Сверхпроводящие металлы.
24. Магнетизм металлов.
25. Оптические свойства металлов.
26. Электропроводность металлов.
27. Общие сведения о керамических материалах.
28. Общие сведения о полупроводниках.
29. Оптические свойства полупроводников.
30. Фотоэлектрические и фотолюминесцентные свойства полупроводников.
31. Магнитные свойства полупроводников.
32. Классификация композиционных материалов.
33. Принципы выбора материалов матриц и волокон.
34. Твердотельные нанокластеры и наноструктуры.
35. Пленки.

### **5.2. Темы рефератов**

1. Практически важные твердотельные реакции.
2. Перспективы развития новых металлических материалов.
3. Свойства стеклокерамики.

4. Полупроводниковые материалы в интегральных схемах.
5. Фуллериды и нанотрубки.
6. Металлические стекла.

### 5.3. Задания контрольных работ ( типовые)

#### Контрольная работа №1

1. На паратурбинной электростанции температура пара на входе  $T_1=810\text{K}$ , а воды на выходе  $T_2=370\text{K}$ . Определить КПД.
2. Найти напряженность поля, удерживающего валентный электрон на орбите.
3. Напишите константу равновесия в случае реакции  $\text{NaCl} \rightleftharpoons \text{Na} + \text{Cl}$  и покажите ее постоянство при  $T=\text{const}$ .
4. Чем отличается энергия свободного электрона от энергии электрона в кристалле.
5. Вычислите положение уровня Ферми в собственном кремнии при 77, 800 К.
6. Найдите выражение для плотности состояний.
7. Выведите общее выражение для ширины запрещенной зоны, расположенной между двумя соседними зонами  $n$  и  $n+1$ .
8. Выведите уравнение движения атома, пользуясь законом Ньютона  $F=m \cdot a$ .
9. Как измениться форма капли на твердой поверхности в космосе в условиях отсутствия силы тяжести?
10. Проанализируйте трансформацию капли на твердой поверхности при увеличении краевого угла смачивания в случае выполнения условия  $\sigma_{12} + \sigma_{13} \cos\alpha > \sigma_{23}$ .
11. Проанализируйте твердотельную реакцию образования шпилели  $\text{MgAl}_2\text{O}_4$  из смеси оксидов  $\text{MgO}$  и  $\text{Al}_2\text{O}_3$ . Написать схему реакции. Определить вид и заряд катионов, диффундирующих в решетке шпилели.
12. Как взаимосвязаны компоненты деформаций и напряжений в пределах справедливости закона Гука?
13. Каким образом макродефекты сказываются на упругих колебаниях в твердых телах?
14. Каково общее условие возникновения макронапряжений в твердых телах?

#### Контрольная работа №2.

1. Привести примеры материалов, которые целесообразно использовать в качестве конструкционных.
2. Привести примеры материалов, которые целесообразно использовать в качестве деталей в бытовых приборах.
3. Привести примеры материалов, которые целесообразно использовать для изготовления контейнеров ядерных отходов.
4. Какие общие требования предъявляются к твердым материалам, используемым в лазерах?
5. Сформулируйте требования, диктующие выбор матрицы, армирующих волокон композиционного материала.
6. Каковы принципы выбора структуры композита?

## 5.4. Задания к коллоквиуму

### Коллоквиум №1

1. Поясните различие между ближним и дальним порядком в твердых телах.
2. Чем отличается энергетический спектр электронов в кристалле от спектра в изолированном атоме?
3. Что такое квазиимпульс электрона?
4. В чем заключается физический смысл понятия эффективной массы в кристалле?
5. Где в энергетическом спектре собственного полупроводника расположен уровень химического потенциала?
6. В чем заключается различие континуального и атомистического подхода к анализу кристаллической решетки?
7. Что такое фононы? Какой функции распределения подчиняются
8. Как качественно объяснить температурную зависимость теплоемкости по Эйнштейну и по Дебаю?
9. Определение дефектов.
10. Чем отличаются энергетические электронные состояния, связанные с дефектами, от зонных состояний электронов кристалла?
11. Какова размерная классификация дефектов?
12. Что такое F-центры?
13. Приведите примеры взаимодействия дефектов.
14. Какова модель ассоциированных центров?
15. Что такое радиационные дефекты?
16. Виды объемных дефектов в твердых телах.
17. Природа образования трещин.
18. Относятся ли фононы к объемным дефектам?
19. Что такое мозаичность кристалла?
20. Каким образом макродефекты влияют на диффузию в твердых телах?
21. Какие виды пор в твердом теле вы знаете?

### Коллоквиум №2

1. Какие специальные свойства и оптимальный состав материалов необходимы для их использования:
  - в качестве электролита;
  - в качестве материала для окон;
  - в качестве материала контейнера для радиоактивных отходов;
  - в качестве материала контейнера, устойчивого до высоких температур;
  - в качестве материала контейнера, устойчивого до низких температур;
  - в качестве изолирующего материала;
  - в качестве материала для магнитных элементов памяти;
  - в качестве материала, проводимость которого чувствительна к облучению видимым светом;
  - в качестве конструкционного материала.

Ответ обосновать.

2. Что такое усталость металла? В чем состоит ее механизм?
3. В чем состоит разница теоретической и технической прочности?
4. Приведите примеры структурно-чувствительных и структурно-нечувствительных свойств твердых тел.
5. Что такое сверхпроводники?
6. Сформулируйте принципы выбора материала волокон, армирующих композит.
7. Почему волокна-нити – самая выгодная конфигурация арматуры композитов для конструктивных применений?
8. Что такое ферриты?
9. Чем отличаются механизмы разрушения металлических и керамических твердых тел?
10. В чем состоит явление магнитострикции?
11. Почему кремний не используется в качестве конструкционного материала?