



СПбГЭТУ «ЛЭТИ»
ПЕРВЫЙ ЭЛЕКТРОТЕХНИЧЕСКИЙ

МИНОБРНАУКИ РОССИИ

федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования
«Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет
«ЛЭТИ» им. В.И. Ульянова (Ленина)»
(СПбГЭТУ «ЛЭТИ»)

УТВЕРЖДАЮ
Проректор по научной работе

В.А. Тупик

2022 г.



**ОБРАЗОВАТЕЛЬНАЯ ПРОГРАММА ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ –
ПРОГРАММА ПОДГОТОВКИ НАУЧНЫХ И НАУЧНО-ПЕДАГОГИЧЕСКИХ
КАДРОВ В АСПИРАНТУРЕ**

Группа научных специальностей: 1.4. «Химические науки»

1.4.15. «Химия твердого тела»

Форма обучения: очная

Срок обучения: 4 года

Факультет: ФИБС

Выпускающая кафедра: ФХ

Санкт-Петербург

2022

СТРУКТУРА ДИСЦИПЛИНЫ

Обеспечивающий факультет: ИФИО
Обеспечивающая кафедра: ФХ

Курс 4
Семестр 8

Виды занятий

Лекции
Самостоятельная работа

Вид промежуточной аттестации

Экзамен (семестр) 8

Разработчик

Альмяшева О. В.

Зав. каф. ФХ

Альмяшева О. В.

Заведующий ОДА

Тумаркин А. В.

АННОТАЦИЯ ДИСЦИПЛИНЫ «ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ»

Дисциплина направлена на получение аспирантами углубленных знаний теоретических и экспериментальных исследований в области химии твердого тела, развитии приобретенных навыков исследования путем использования накопленных знаний в анализе и интерпретации получаемых при работе над темой кандидатской диссертации результатов.

SUBJECT SUMMARY "PHYSICAL CHAMISTRY"

Discipline is aimed at obtaining graduate students' in-depth knowledge about the theoretical and experimental research in the field of solid state chemistry, the development of acquired research skills by using the accumulated knowledge in the analysis and interpretation of the results obtained when working on the topic of the candidate's thesis.

ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ

Цель – формирование и развитие у аспирантов навыков в области общих и специфических особенностей Изучения твердофазных химических реакций, их механизмов, кинетики и термодинамики, в том числе зародышеобразования и химических реакций на границе раздела твердых фаз, а также топохимических реакций и активирования твердофазных реагентов, а также установление закономерностей «состав – структура – свойство» для твердофазных соединений и материалов.

Основные задачи дисциплины:

- углубленное изучение аспирантами основ химии твердого тела;
- теоретическое и практическое усвоение основных теоретических положений химии твердого тела;
- развить навыки синтеза и исследования сложных многокомпонентных систем разного уровня;
- сформировать навыки использования теоретических основ химии твердого тела для описания развиваемых при выполнении научно-квалификационной работы положений;

СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Введение

Содержание, цель и значение дисциплины в подготовке аспирантов, ее связь с другими дисциплинами и подготовкой кандидатской диссертации.

1. Общие положения

Специфика химии твёрдого тела как раздела химической науки. Общие отличия строения и свойств твёрдых веществ от газов и жидкостей. Классификация твёрдых веществ. Кристаллические твёрдые тела. Монокристаллы и поликристаллы. Наноразмерные кристаллы. Однофазные и гетерофазные кристаллические тела. Фазoidы. Аморфные твёрдые вещества. Стёкла. Некристаллические наночастицы. Микро-, мезо- и макропористые твёрдые тела. Жидкие кристаллы. Значение химии твёрдых тел для материаловедения и химической технологии.

2. Строение твёрдых веществ

Строение кристаллических твёрдых веществ. Понятие о симметрии кристаллической решётки. Кристаллографические пространственные группы симметрии. Выбор и типы элементарных ячеек. Молекулярные кристаллы. Кристаллы с ионными и ковалентными связями. Степень ионности связи. 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. Соединения с каркасной, слоистой и цепочечной структурой. Полиэдрическое описание кристаллических структур. Структуры с гексагональной и кубической плотнейшими упаковками. Тетрагональная упаковка. Дефекты упаковок, политипизм. Изоморфизм.

Некоторые наиболее важные структурные типы. Структуры каменной соли (NaCl) и хлорида цезия (CsCl), сфалерита и вюрцита (ZnS), флюорита (CaF_2) и антифлюорита (Na_2O). Структурные типы арсенида никеля (NiAs), иодида кадмия (CdI_2) и рутила (TiO_2). Структурные типы первовскита (CaTiO_3) и шпинели

(MgAl_2O_4). Общие сведения о структурах силикатов и алюмосиликатов. Соединения внедрения и клатраты. Органические кристаллические структуры.

Твёрдые растворы замещения, внедрения и вычитания. Изовалентное и гетеровалентное замещение. Нестехиометрические соединения.

Структура аморфных твёрдых 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.

3. Химическая связь и электронное строение твёрдых веществ

Типы химической связи в твердом теле. Ван-дер-ваальсово взаимодействие в молекулярных кристаллах, клатраты. Ионная модель строения кристаллов, константа Маделунга, энергия ионной решетки. Цикл Борна – Габера и термохимические расчеты.

Основы теории 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.

Цепочные структуры и одномерная проводимость. Двумерные проводники и интеркаляты. Пайерлсовское искажение.

Слабые неналентные взаимодействия в твердых супрамолекулярных образованиях. Наноструктуры, объёмные кластеры.

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. Движущая сила процесса диффузии. Диффузия и самодиффузия в твёрдых 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).

Твёрдые 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 твёрдого тела. Поверхностная энергия кристалла. Искажение структуры и электронного строения в приповерхностных слоях. Роль поверхности в химических реакциях твёрдых тел. Роль соотношения

объем–поверхность в свойствах твёрдых тел. Общие особенности химии твёрдых наноразмерных частиц. Экспериментальные методы изучения поверхности.

5. Фазовые переходы в твёрдых 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. Бинодальный и спинодальный распад фаз переменного состава. Кинетика фазовых переходов. Скорость зародышеобразования. Общая скорость превращения, уравнение Аврами. Факторы, влияющие на кинетику фазовых переходов. Переходы типа порядок–беспорядок.

Несоразмерные фазы. Жидкокристаллическое состояние. Некристаллическое состояние и фазовые переходы в стеклах.

6. Химические реакции твёрдых веществ

Термодинамические оценки возможности прохождения химических реакций с участием твердых тел. Общие закономерности скорости гетерогенных химических процессов с участием твердых тел. Элементарные кинетические стадии процессов. Роль массопереноса. Процессы, лимитируемые диффузионными и кинетическими стадиями. Роль зародышеобразования в процессах, сопровождающихся образованием твердых продуктов. Термодинамика формирования новой фазы. Критическое пересыщение, критический размер зародыша. Кинетика образования и роста зародышей.

Классификация химических гетерогенных процессов с участием твердых фаз. Термическое разложение твёрдых фаз с образованием продуктов в различных фазовых состояниях. Распад твёрдых растворов по спинодальному механизму и механизму роста зародышей. Реакции твёрдая фаза — твёрдая фаза, твёрдая фаза — жидкость, твёрдая фаза — газ. Кинетические особенности процессов в каждом случае.

Основные факторы, влияющие на реакционную способность твёрдых тел. Роль примесей и дефектов. Химические реакции на поверхности. Методы управления развитием процессов с участием твёрдых тел. Нетермические способы повышения реакционной способности твёрдых тел: фотохимические, радиационно-химические, механические и др.

7. Методы синтеза твёрдых веществ

Термодинамические основы синтеза твёрдых веществ. $P-T-x$ фазовые диаграммы двухкомпонентных систем как геометрическое представление термодинамических данных. Правило фаз Гиббса. Работа с проекциями и сечениями $P-T-x$ диаграмм. Основные типы фазовых диаграмм двухкомпонентных систем конденсированных фаз: 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. Диаграммы состояния трёхкомпонентных систем конденсированных фаз. Фазовые равновесия в субсолидусной области. Использование фазовых диаграмм для выбора условий синтеза.

Синтез путём твёрдофазных реакций. Основные термодинамические и кинетические закономерности. Роль неавтономного состояния вещества в твёрдофазных реакциях. Экспериментальное осуществление твёрдофазных реакций, роль температуры. Методы интенсификации твёрдофазных процессов: диспергирование исходных веществ, методы химической гомогенизации. Совместное осаждение компонентов из растворов. Криохимический синтез и распылительная сушка. Кристаллизация из гелей. Золь-гель-процесс. Механохимическое стимулирование твёрдофазных процессов. Основные закономерности и возможности механохимических процессов. Саморазвивающийся высокотемпературный синтез. Твёрдофазный 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 твёрдых веществ. Применение различных физических (ультразвукового, микроволнового и др.) воздействий при синтезе твёрдофазных 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 твёрдых веществ в виде тонких слоев и плёнок. Поликристаллические и эпитаксиальные пленки. Физические методы: лазерная аблация, магнетронное распыление, электронно-лучевое испарение. Химическое осаждение из паровой фазы, использование гидридов, галогенидов, металлогорганических соединений. Метод молекулярного и ионного наслаждения. Получение пленок из растворов и расплавов. Жидкофазная эпитаксия. Электрохимическая кристаллизация плёнок и покрытий.

Керамика. Основные закономерности и способы спекания. Способы получения твердых аморфных веществ и стекол. Методы получения твёрдых фаз в виде наночастиц и нанокристаллических образований.

8. Методы исследования твёрдых веществ

Методы изучения кристаллического строения твёрдых 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 твёрдых веществ. Кристаллооптический анализ.

Электронная микроскопия: принципы и возможности сканирующей электронной микроскопии, просвечивающей электронной микроскопии, туннельной электронной и атомно-силовой микроскопии. Электронная микроскопия 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); мёссбауэрская спектроскопия.

Методы определения химического состава. Химический элементный анализ. Рентгенофлуоресцентный анализ. Локальный рентгеноспектральный анализ, масс-спектрометрические методы, атомно-абсорбционная и атомно-эмиссионная спектроскопия.

Методы исследования поверхности. Оже-электронная спектроскопия, рентгено-фотоэлектронная спектроскопия (РФЭС), обратное резерфордовское 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.

9. Твёрдофазные материалы

Классификация твёрдофазных материалов по функциональным свойствам. Ионная проводимость и твердые электролиты. Суперионные проводники. Кати-

онные проводники. Кислород-ионные проводники. Галогенид-ионные проводники. Применение твёрдых 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 сверхрешётки. 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. Области и перспективы применения.

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

Аморфные материалы и стёкла. Факторы, влияющие на стеклообразование. Оксидные и халькогенидные стёкла. Электропроводящие стекла. Металлические стёкла. Ситаллы (стеклокерамика). Двухфазные и пористые стёкла. Различные области применения стёкол. Жидкие кристаллы.

Органические функциональные материалы. Основные типы и области применения. Биоматериалы.

Заключение

Перспективы развития химии твердого тела в плане создания материалов с заданными свойствами.

В случае, если дисциплина реализуется в группах с малой численностью, занятия по отдельным разделам могут проходить в виде установочной лекций, выдачи и объяснения задания по теме, а текущий контроль может проходить в виде представления и защиты аспирантом выполненного задания.

Общие рекомендации по выполнению индивидуальных заданий доступны для аспиранта в печатном или электронном виде (на сайте Университета), либо аспирант может получить рекомендации у преподавателя, отвечающего за дисциплину, в часы консультаций. Задание формулируется с учетом тематики докторской или кандидатской работы аспиранта в рамках изучаемой дисциплины.

УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Методические рекомендации преподавателям:

Перед началом преподавания дисциплины преподавателю необходимо:

- знать цели и задачи преподавания дисциплины;
- представлять, какие знания, умения и навыки должен приобрести аспирант в процессе изучения данной дисциплины;
- четко понимать, в формировании каких результатов освоения программы аспирантуры участвует дисциплина.

Если учебным планом по дисциплине предусмотрен экзамен, его рекомендуется проводить в форме индивидуальной беседы с аспирантом по вопросам, сформулированным в фондах оценочных средств дисциплины, используя вопросы из различных разделов дисциплины, обеспечив тем самым более полную проверку знаний аспиранта.

В своей деятельности преподаватель должен руководствоваться локальными нормативными актами, регламентирующими образовательную деятельность по образовательным программам подготовки кадров высшей квалификации в университете.

Методические рекомендации по самостоятельной работе аспирантов:

Изучение каждой дисциплины должно сопровождаться самостоятельной работой аспиранта с рекомендованными преподавателями литературными источниками и информационными ресурсами сети Интернет по всем разделам дисциплины.

Ряд вопросов, подлежащих изучению в составе дисциплины, достаточно хорошо проработаны в учебной литературе, представлены в научных трудах, сборниках трудов, статьях, в сети Интернет. Эти вопросы могут быть переданы аспирантам на самостоятельное изучение. Такая работа строится на основе подготовленных преподавателем заданий с перечнем вопросов, на которые обучающийся должен найти ответы в процессе самостоятельного изучения. Самостоятельно могут изучаться как целые темы, так и отдельные вопросы в составе обозначен-

ных преподавателем, но не полностью раскрытых им тем. Для закрепления материала ведется конспектирование, готовятся рефераты, эссе или делаются доклады. Степень освоения самостоятельно изученных материалов обязательно проверяется контрольными мероприятиями с использованием фонда оценочных средств по дисциплине.

Особое место требуется уделить консультированию, как одной из форм обучения и контроля самостоятельной работы. Консультирование предполагает особым образом организованное взаимодействие между преподавателем и аспирантами, при этом предполагается, что консультант либо знает готовое решение, которое он может предписать консультируемому, либо он владеет способами деятельности, которые указывают путь решения проблемы.

Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины

№	Название, библиографическое описание	К-во экз. в библ. (на каф.)
1	Вест А. Химия твердого тела. Теория и приложения. Т. 1, 2. М.: Мир, 1988.	Нет (3)
2	Рао Ч.Н.Р., Гопалакришнан Дж. Новые направления в химии твердого тела. Новосибирск, 1990.	Нет (2)
3	Третьяков Ю.Д. Твердофазные реакции. М., 1978.	Нет (5)
4	Драго Р. Физические методы в химии М.: Мир, 1981.	Нет (3)
5	Крегер Ф. Химия несовершенных кристаллов М.: Мир, 1969.	Нет (2)
6	Фистуль В.И. Физика и химия твердого тела. Т. 1, 2. М., 1995.	Нет (3)
	Уэллс А. Структурная неорганическая химия. Т. 1 – 3. М.: Мир, 1987 — 1988.	Нет (2)
	Альмяшева О.В., Проскурина О.В., Красилин А.А., Гусаров В.В. Термодинамика зародышебразования: учеб. Пособие. СПб, СПбГЭТУ «ЛЭТИ». 2017. 42 с.	Электронный вариан

Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», используемых при освоении дисциплины

№	Электронный адрес
1	База данных и программный комплекс для термодинамических расчетов ИВТАНТЕРМО
2	Автоматизированная информационно-библиотечная система ИРБИС
3	Интерактивная база данных книг и журналов SpringerLink.
4	Интернет сайты ведущих государственных вузов и научных организаций РФ: МГУ, СпбГУ, РХТУ, НГУ, РАН РФ и др.
5	Интернет сайты зарубежных научных и учебных центров: NBS USA, MTI UK, ChLab Japan, NSRDS и др.
6	Нанометр (нанотехнологическое сообщество) – http://www.nanometer.ru

Информационные технологии (операционные системы, программное обеспечение общего и специализированного назначения, а также информационные справочные системы) и материально-техническая база, используемые при осуществлении образовательного процесса по дисциплине, соответствуют федеральным государственным требованиям.

Конкретные формы и процедуры текущего контроля знаний и промежуточной аттестации, включая перечень экзаменационных вопросов (Приложение 1), а также методические указания для обучающихся по самостоятельной работе при освоении дисциплин доводятся до сведения обучающихся на первом занятии.

Список экзаменационных вопросов по дисциплине
«Химия твердого тела»

1. Общие отличия строения и свойств твёрдых веществ от газов и жидкостей. Классификация твёрдых веществ. Кристаллические твёрдые тела.
2. Строение кристаллических твёрдых веществ.
3. Понятие о симметрии кристаллической решётки. Кристаллографические пространственные группы симметрии. Выбор и типы элементарных ячеек.
4. Молекулярные кристаллы. Кристаллы с ионными и ковалентными связями. Степень ионности связи. Правила Полинга.
5. Металлы и сплавы. Интерметаллические соединения.
6. Кристаллы с участием водородных и ван-дер-ваальсовых связей. Супрамолекулярные образования. Размеры атомов или ионов. Координационные числа.
7. Способы организации структур. Дефекты упаковок, политипизм. Изоморфизм.
8. Наиболее важные структурные типы.
9. Твёрдые растворы замещения, внедрения и вычитания. Изовалентное и гетеровалентное замещение. Нестехиометрические соединения.
10. Структура аморфных твёрдых тел. Функция радиального распределения. Нерегулярные плотнейшие упаковки.
11. Стеклообразное состояние вещества. Факторы, влияющие на стеклообразование.
12. Кинетическая природа стеклообразования. Ближний порядок. Структурные единицы.
13. Структура квазикристаллов. Несоразмерные структуры. Структура жидких кристаллов.
14. Типы химической связи в твердом теле.
15. Основы теорий кристаллического поля и поля лигандов применительно к твердым телам.

16. Энергия стабилизации кристаллическим полем и катионное распределение. Эффект Яна—Теллера. Эффект неподеленных электронных пар.
17. Зонная структура кристаллов. Общие представления о методах расчета зонной структуры кристаллов. Границы применимости зонной модели.
18. Цепочечные структуры и одномерная проводимость. Двумерные проводники и интеркаляты.
19. Слабые невалентные взаимодействия в твердых супрамолекулярных образованиях. Наноструктуры, объёмные кластеры.
20. Совершенные и несовершенные кристаллы. Типы дефектов. Электронные дефекты.
21. Собственные точечные дефекты. Термодинамические причины образования точечных дефектов.
22. Дефектообразование и нестехиометрия кристаллов. Дефекты по Шоттки и Френкелю. Примесные точечные дефекты.
23. Взаимосвязь концентрации примесей и собственных точечных дефектов. Влияние точечных дефектов на свойства неорганических веществ.
24. Методы создания неравновесных концентраций точечных дефектов.
25. Подвижность точечных дефектов. Движущая сила процесса диффузии. Диффузия и самодиффузия в твёрдых телах.
26. Основные механизмы самодиффузии. Коэффициент диффузии, энергия активации диффузии. Диффузия, обусловленная градиентом концентраций, законы Фика.
27. Диффузия точечных дефектов в электрическом поле. Уравнение Нернста–Эйнштейна.
28. Методы исследования диффузии.
29. Суперионные проводники (твердые электролиты).
30. Твёрдые тела со структурной разупорядоченностью. Протяженные дефекты.
31. Структуры кристаллографического сдвига.
32. Дефекты упаковки. Границы блоков и антифазные домены (границы).
33. Гетерогенные включения. Нейтральные и заряженные протяженные дефекты.

34. Дислокации в кристаллах, основные виды. Причины возникновения дислокаций. Движение дислокаций. Влияние дислокаций на свойства кристаллов. Экспериментальные методы исследования дислокаций.
35. Поверхность как дефект строения твёрдого тела. Поверхностная энергия кристалла.
36. Роль поверхности в химических реакциях твёрдых тел. Роль соотношения объем–поверхность в свойствах твёрдых тел.
37. Общие особенности химии твёрдых наноразмерных частиц.
38. Экспериментальные методы изучения поверхности.
39. Термодинамическая классификация фазовых переходов.
40. Структурные изменения при фазовых переходах. Изменения структуры с ростом температуры и давления. Мартенситные превращения.
41. Механизмы фазовых переходов. Бинодальный и спинодальный распад фаз переменного состава.
42. Кинетика фазовых переходов. Скорость зародышеобразования. Общая скорость превращения, уравнение Аврами. Факторы, влияющие на кинетику фазовых переходов. Переходы типа порядок–беспорядок.
43. Жидкокристаллическое состояние. Некристаллическое состояние и фазовые переходы в стеклах.
44. Термодинамические оценки возможности прохождения химических реакций с участием твердых тел.
45. Закономерности скорости гетерогенных химических процессов с участием твердых тел. Элементарные кинетические стадии процессов.
46. Роль массопереноса. Процессы, лимитируемые диффузионными и кинетическими стадиями.
47. Роль зародышеобразования в процессах, сопровождающихся образованием твердых продуктов.
48. Термодинамика формирования новой фазы.
49. Критическое пересыщение, критический размер зародыша. Кинетика образования и роста зародышей.

50. Классификация химических гетерогенных процессов с участием твёрдых фаз.
51. Факторы, влияющие на реакционную способность твёрдых тел. Роль примесей и дефектов. Химические реакции на поверхности.
52. Методы управления развитием процессов с участием твёрдых тел. Нетермические способы повышения реакционной способности твёрдых тел: фотохимические, радиационно-химические, механические и др.
53. P - T - x фазовые диаграммы двухкомпонентных систем как геометрическое представление термодинамических данных.
54. Правило фаз Гиббса. Работа с проекциями и сечениями P - T - x диаграмм.
55. Основные типы фазовых диаграмм двухкомпонентных систем конденсированных фаз
56. Диаграммы состояния трёхкомпонентных систем конденсированных фаз.
57. Фазовые равновесия в субсолидусной области. Использование фазовых диаграмм для выбора условий синтеза.
58. Методы реализации твёрдофазных реакций. Основные термодинамические и кинетические закономерности.
59. Методы интенсификации твёрдофазных процессов: диспергирование исходных веществ, методы химической гомогенизации.
60. Кристаллизация из растворов и расплавов.
61. Кристаллизация из паровой фазы.
62. Гидротермальные методы синтеза твёрдых веществ.
63. Выращивание монокристаллов. Общие кинетические особенности. Механизмы роста кристаллов.
64. Твёрдых веществ в виде тонких слоев и плёнок. Поликристаллические и эпитаксиальные пленки.
65. Керамика. Основные закономерности и способы спекания. Способы получения твердых аморфных веществ и стекол. Методы получения твёрдых фаз в виде наночастиц и нанокристаллических образований.
66. Методы изучения кристаллического строения твёрдых тел.

67. Дифракция рентгеновских лучей. Закон Брэгга, расчет межплоскостных расстояний. Метод порошка, научные основы и применение. Метод Гинье.
68. Общие представления о структурном анализе по порошковым данным. Метод Ритвельда.
69. Рентгенографическое исследование монокристаллов, общие представления о ходе структурного анализа.
70. Получение структурных данных с помощью электронной и нейтронной дифракции. Особенности и возможности методов.
71. Другие методы изучения строения твёрдых веществ. Кристаллооптический анализ.
72. Электронная микроскопия
73. Спектральные методы
74. Методы определения химического состава.
75. Методы исследования поверхности.
76. Исследования термических свойств веществ.
77. Методы исследования электрических и магнитных свойств.
78. Классификация твёрдофазных материалов по функциональным свойствам. Ионная проводимость и твердые электролиты.
79. Полупроводники. Классификация полупроводниковых материалов. Элементарные полупроводники: германий и кремний.
80. Химические основы легирования полупроводников. Гетероструктуры и сверхрешётки. Основные области применения полупроводников.
81. Диэлектрики. Химическая и физическая природа диэлектриков. Наведенная и спонтанная поляризация.
82. Сегнетоэлектрики, пироэлектрики и пьезоэлектрики. Примеры. Области применения сегнетоэлектриков, пироэлектриков и пьезоэлектриков.
83. Магнитные материалы. Функциональные параметры. Классификация магнитных материалов, основные структуры и свойства (металлы и сплавы, оксиды переходных металлов, шпинели, гранаты, перовскиты, гексаферриты).

84. Материалы с эффектом гигантского (ГМС) и колоссального (КМС) магнитного сопротивления.
85. Оптические материалы. Нелинейные оптические материалы.
86. Сверхпроводящие материалы. Традиционные (металлы и интерметаллиды) и высокотемпературные (оксиды) сверхпроводники.
87. Теплоизоляционные и конструкционные материалы.
88. Тугоплавкие материалы.
89. Аморфные материалы и стёкла. Факторы, влияющие на стеклообразование.
90. Оксидные и халькогенидные стёкла. Электропроводящие стекла. Металлические стёкла. Ситаллы (стеклокерамика).
91. Двухфазные и пористые стёкла.
92. Органические функциональные материалы. Основные типы и области применения.
93. Биоматериалы.