

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Пекаревский Борис Владимирович
Должность: Проректор по учебной и методической работе
Дата подписания: 12.09.2021 20:34:46
Уникальный программный ключ:
3b89716a1076b80b2c167df0f27c09d01782ba84



МИНОБРАЗОВАНИЯ РОССИИ
федеральное государственное образовательное учреждение
высшего образования
«Санкт-Петербургский государственный технологический институт
(технический университет)»
(СПбГТИ(ТУ))

Кафедра физической химии

Рабочая программа дисциплины

ВВЕДЕНИЕ В ФИЗИКУ ТВЕРДОГО ТЕЛА

Направление подготовки: 18.03.01 - Химическая технология

бакалавриат

Модуль 04

"Химическая технология наноструктур и функциональных материалов"

Квалификация

Бакалавр

Форма обучения

Очная

Факультет химии веществ и материалов

Кафедра физической химии

Санкт-Петербург

2016

ЛИСТ СОГЛАСОВАНИЯ

Должность	Подпись	Ученое звание, фамилия, инициалы
Разработчики		Профессор Н.А.Чарыков Доцент Е.А.Павлова

Рабочая программа дисциплины «Введение в физику твердого тела» обсуждена на заседании кафедры физической химии протокол от «__» _____ 201_ г. № _____

Заведующий кафедрой

С.Г.Изотова

Одобрено учебно-методической комиссией факультета химии веществ и материалов протокол от «__» _____ 201_ г. № _____

Председатель

С.Г.Изотова

СОГЛАСОВАНО

Руководитель направления подготовки Химическая технология		Профессор А.А.Мальгин
Директор библиотеки		Т.Н.Старостенко
Начальник методического отдела учебно-методического управления		Т.И.Богданова
Начальник УМУ		С.Н.Денисенко

СОДЕРЖАНИЕ

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы
2. Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы
3. Объем дисциплины
4. Содержание дисциплины
 - 4.1. Разделы дисциплины и виды занятий
 - 4.2. Занятия лекционного типа
 - 4.3. Занятия семинарского типа
 - 4.3.1. Семинары, практические занятия
 - 4.3.2. Лабораторные занятия
 - 4.4. Самостоятельная работа
5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине
6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации
7. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины
8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины
9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины
10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине
 - 10.1. Информационные технологии
 - 10.2. Программное обеспечение
 - 10.3. Информационные справочные системы
11. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине
12. Особенности освоения дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья
Приложение №1 Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации. Контроль результативности учебного процесса.

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы

Процесс изучения дисциплины «Введение в физику твердого тела» Б1.И.ДВ.03.04.03 направлен на формирование следующих компетенций: ОПК-2, ОПК-3, ПК-16, ПК-18, ПК-19, в соответствии ФГОС ВО по направлению 18.03.01 «Химическая технология» (квалификация «бакалавр»):

Коды компетенций	Результаты освоения ООП (содержание компетенций)	Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине
ОПК-2	готовность использовать знания о современной физической картине мира, пространственно-временных закономерностях, строении вещества для понимания окружающего мира и явлений природы	<p>Опыт: способность и готовность использовать основные законы естественнонаучных дисциплин для изучения функциональных материалов в т.ч. наноматериалов.</p> <p>Умеет: на основе полученных знаний проводить синтез наноматериалов, получать и исследовать материалы по стандартным методикам в т.ч. наноматериалы. Прогнозировать свойства получаемых материалов.</p> <p>Знает основные законы физической химии твердого тела в их математической, графической и словесной формулировках, общие закономерности химических и физических превращений в твердофазных системах и их специфику.</p>
ОПК-3	готовность использовать знания о строении вещества, природе химической связи в различных классах химических соединений для понимания свойств материалов и механизма химических процессов, протекающих в окружающем мире	<p>Опыт: владеет навыками определения взаимосвязи строения вещества и свойств твердых материалов.</p> <p>Умеет: проводить расчеты диаграмм состояния двойных и тройных систем; определять пористость структуры; изотермическую; определять коэффициенты диффузии, коэффициенты теплопроводности в твердых телах и т.д.</p> <p>Знает: общие закономерности химических и физических превращений в твердофазных системах и их специфику; особенности термодинамики твердых тел; фазовые равновесия в двух и трех компонентных системах; теорию разупорядоченности, классификацию дефектов, типы твердых растворов.</p>
ПК-16	способность планировать и проводить физические и химические	Опыт: использования широких теоретических и практических знаний

Коды компетенций	Результаты освоения ООП (содержание компетенций)	Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине
	эксперименты, проводить обработку их результатов и оценивать погрешности, выдвигать гипотезы и устанавливать границы их применения, применять методы математического анализа и моделирования, теоретического и экспериментального исследования	<p>фундаментальных разделов химии, физики, основных стандартных методик для постановки химического эксперимента.</p> <p>Умение: с помощью современных методов и инструментов в сложной и специализированной области получать и исследовать материалы, проводить обработку результатов; оценивать и выдвигать гипотезы.</p> <p>Знание: методов математического анализа и моделирования, методики оценки погрешности расчета и эксперимента.</p>
ПК-18	готовность использовать знание свойств химических элементов, соединений и материалов на их основе для решения задач профессиональной деятельности	<p>Опыт: владеет методами регистрации результатов химических экспериментов; использования современного оборудования и приборов.</p> <p>Умение использовать экспериментальные данные о фазовых равновесиях на практике. Способен проводить рентгенофазовый анализ самостоятельно.</p> <p>Знание условий эксплуатации современного оборудования и области его применение, основные методы физико-химического анализа. Знает устройство и возможности рентгеновского дифрак-тометра.</p>
ПК-19	готовность использовать знания основных физических теорий для решения возникающих физических задач, самостоятельного приобретения физических знаний, для понимания принципов работы приборов и устройств, в том числе выходящих за пределы компетентности конкретного направления	<p>Готов применять знания основных законов и теории в т.ч. основы термодинамики, особенности протекания реакций в твердых фазах для экспериментальных исследований.</p> <p>Знает принципы работы приборов и устройств, применяемых для физических экспериментов.</p> <p>Умеет самостоятельно приобретать знания для понимания принципа работы устройств для исследования особенностей протекания твердофазных реакций и параметров физико-химических процессов, в том числе выходящих за пределы компетентности конкретного направления.</p>

Основной целью изучения дисциплины «Введение в физику твердого тела» является формирование научного мировоззрения; формирование знаний в области теории физики твердого тела и основными методами соответствующего физико-химического эксперимента, что дает возможность сознательно разрабатывать, управлять физическими, химическими и технологическими процессами твердых фаз, в том числе с участием наноструктур, т.е. создает теоретическую основу для практической деятельности.

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы

При разработке программы дисциплины в основу положены: ФГОС ВПО по направлению подготовки 18.03.01 «Химическая технология» (уровень бакалавриата), утвержденный Министерством образования и науки 11.08.2016г., №1005; учебный план подготовки бакалавров по направлению «Химическая технология» СПбГТИ(ТУ) (протокол №12 от 20.12.2016г.).

Дисциплина «Введение в физику твердого тела» является дисциплиной по выбору Б1.В.ДВ.01.04.03 Б1.В.ДВ.01.04.03 и относится к обязательной части профессионального цикла, изучается на 4 курсе в 6, 7 семестрах.

Изучение дисциплины «Введение в физику твердого тела» опирается на элементы компетенций, сформированные при изучении дисциплин «Математика», «Физика», «Неорганическая химия», «Физическая химия», «Химические и физико-химические методы анализа».

Полученные в процессе изучения дисциплины «Введение в физику твердого тела» знания, умения и навыки могут быть использованы в научно-исследовательской работе, при выполнении выпускной квалификационной работы и будущей профессиональной деятельности.

3. Объем дисциплины

Общая трудоемкость составляет 360 акад. часа - 10 Z.

Вид учебной работы	Всего, акад. часов/ кол-во з.е.	
	6 семестр	7 семестр
Общая трудоемкость дисциплины	216 /6	144/4
Контактная работа с преподавателем:	112	90
занятия лекционного типа	32	36
занятия семинарского типа, в т.ч.	64	36
семинары, практические занятия	16	-
лабораторные работы	48	36
КР (курсовая работа), КП (курсовой проект)	КР	КП
в т.ч. интерактивные часы	16	18
КСР	16	18
Самостоятельная работа	59	27
Форма промежуточной аттестации (кр, зачет, экзамен)	Зачет экзамен, КР (45)	Зачет, экзамен КП(27)

4. Содержание дисциплины

4.1. Разделы дисциплины и виды занятий

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Занятия лекционного типа, академ. часы		Занятия семинарского типа, академ. часы				Самостоятельная работа, академ. часы		Формируемые компетенции
		6 сем	7 сем	Семинары и/или практические занятия		Лабораторные работы		6 сем	7 сем	
		6 сем	7 сем	6 сем	7 сем	6 сем	7 сем	6 сем	7 сем	
1	Основные понятия и определения и понятия.	2						10		ОПК-2
2	Термодинамика	12		6		26		20		ОПК-2, ПК-19
3	Фазовые равновесия и фазовые процессы с участием твердых фаз	18		4		22		29		ОПК-2, ПК-16, ПК-19
4	Термодинамические модели твердых растворов		20	6			16		8	ПК-16, ПК-19
5	Явления переноса в твердых телах		10				10		8	ОПК-2, ПК-16
6	Сорбционные явления, кинетика роста твердых фаз.		6				10		11	ОПК-2, ПК-16, ПК-19
	ИТОГО	32	36	16	-	48	36	59	27	

4.2 Занятия лекционного типа

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, академ. часы	Инновационная форма
6 семестр			
1	Основные понятия и определения: фаза, компонент, агрегатное состояние, полиморфные превращения, теория разупорядоченности, кристаллическое и аморфное состояние, идеальные и реальные кристаллы, классификация дефектов, типы твердых растворов.	2	

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
2	Особенности термодинамики твердых тел: твердые растворы, химические потенциалы компонентов, ионов, дефектов, обобщенное фундаментальное уравнение Гиббса, тепловая теорема Нернста, принцип равновесия Гиббса и условия равновесия гетерогенных систем, критерии устойчивости твердых растворов (бинодали и спинодали), критические твердые растворы.	12	Слайд-презентация
3	Фазовые равновесия и фазовые процессы с участием твердых фаз, диаграммы расслаивания твердых растворов, диаграммы растворимости и плавкости. Открытые фазовые процессы.	18	Слайд-презентация,
7 семестр			
4	Термодинамические модели твердых растворов, общая классификация моделей, регулярные, субрегулярные растворы, модель LDM.	20	
5	Явления переноса в твердых телах, массо- и теплоперенос, перенос заряда, протекание химических реакций в твердых телах.	10	
6	Сорбционные явления, изотерма адсорбции Гиббса, отдельные изотермы адсорбции, кинетика роста твердых фаз и зародышеобразования.	6	

4.3 Занятия семинарского типа

4.3.1. Семинары, практические занятия

№ п/п	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем акад. часы	Инновационная форма
6 семестр			
1.	<u>Введение . Основные понятия и определения и понятия.</u> Основные понятия и определения: фаза, компонент, агрегатное состояние, полиморфные превращения, теория разупорядоченности, кристаллическое и аморфное состояние, идеальные и реальные кристаллы, классификация дефектов, типы твердых растворов.	4	Дискуссия
2.	<u>Особенности термодинамики твердых тел.</u> Расчет изменения термодинамических функций и константы равновесия твердофазной реакции. Расчет равновесного состава твердой фазы.	4	Мозговой штурм
	ИТОГО	16	

4.3.2 Лабораторные занятия

№ п/п	Наименование темы и краткое содержание занятия	Трудоемкость (час.)	Примечание
<i>6 семестр</i>			
1	Термодинамика. Определение теплоты смешения растворов методом изотермической калориметрии. Определение температурного хода изобарной теплоемкости образца	26	
2	Фазовые равновесия и фазовые процессы с участием твердых фаз. Построение диаграммы растворимости водно-солевой системы.	22	
<u>Итого за 6 семестр</u>		48	
<i>7 семестр</i>			
1	Термодинамические модели твердых растворов. Определение регулярных параметров неидеальности по температурам спинодального распада твердых растворов.	6	
2	Термодинамика. Определение изотермической сжимаемости образца	6	
3	Сорбционные явления, кинетика роста твердых фаз. Построение изотермы адсорбции газа твердым телом.	4	
4	Явления переноса в твердых телах. Определение коэффициентов диффузии в твердых телах.	4	
5	Явления переноса в твердых телах. Определение коэффициентов теплопроводности в твердых телах.	6	
6	Сорбционные явления, кинетика роста твердых фаз. Построение порограммы, определение пористой структуры.	10	
<u>Итого за 7 семестр</u>		36	

4.4 Содержание самостоятельной работы студентов

№	Перечень вопросов для самостоятельного изучения	Объем академических часов	Форма контроля
	6 семестр		
1	<u>Введение . Основные понятия и определения и понятия.</u> Основные понятия и определения: фаза, компонент, агрегатное состояние, полиморфные превращения, теория разупорядоченности, кристаллическое и аморфное состояние, идеальные и реальные кристаллы, классификация дефектов, типы твердых растворов.	10	Опрос, Тестирование, ИДЗ, КР
2	<u>Особенности термодинамики твердых тел.</u> Расчет изменения термодинамических функций и константы равновесия твердофазной реакции. Расчет равновесного состава твердой фазы.	30	
3	Фазовые равновесия и фазовые процессы с участием твердых фаз. Построение диаграммы растворимости водно-солевой системы.	19	
	Итого за 6 семестр	59	
	7 семестр		
4	Термодинамические модели твердых растворов. Определение регулярных параметров неидеальности по температурам спинодального распада твердых растворов.	8	Опрос, Тестирование, ИДЗ
5	Явления переноса в твердых телах. Определение коэффициентов теплопроводности в твердых телах.	8	
6	Сорбционные явления, кинетика роста твердых фаз. Построение порограммы, определение пористой структуры.	11	
	Итого за 7 семестр	27	

4.4.1. Вопросы для контроля самостоятельного изучения

Тема 1 - Основные понятия и определения и понятия.

1. Что такое фаза, компонент ?
2. Дайте определение идеального и неидеального раствора?
3. Классификация дефектов?

Тема 2 – Особенности термодинамики твердых тел.

1. Запишите фундаментальные уравнения и укажите характеристические функции для термодинамических потенциалов (U,H,G,F).

2. Запишите фундаментальные уравнения и укажите характеристические функции для энтропии и функций Массье-Планка потенциалов (S , Φ 16 Φ 2).
3. Докажите, что идеальные твердые растворы не расслаиваются.
4. Выведите уравнение спинодали для строго регулярных твердых растворов.
5. Дайте классификацию состояний равновесия,
6. Запишите уравнения границ состояний (критерии устойчивости).

Тема 3– Фазовые равновесия и фазовые процессы с участием твердых фаз.

7. Выведите уравнение Клаузеуса Клапейрона из уравнения Ван-дер-Ваальса для однокомпонентных систем в дифференциальной форме.
8. Выведите уравнение Клаузеуса Клапейрона из уравнения Ван-дер-Ваальса для однокомпонентных систем в интегральной форме.
9. Выведите уравнение типа уравнения Клаузеуса Клапейрона из уравнения Ван-дер-Ваальса для многокомпонентных азеотропов.
10. Выведите 3 закона Гиббса-Коновалова из уравнения Ван-дер-Ваальса для бинарных систем.
11. Постройте схематически диаграмму плавкости тройной эвтектической системы и укажите направления изменения температуры вдоль все моновариантных кривых.
12. Постройте схематически диаграмму плавкости тройной системы с бинарным конгруэнтно плавящимся соединением и укажите направления изменения температуры вдоль все моновариантных кривых.
13. Постройте схематически диаграмму плавкости тройной системы с тройным конгруэнтно плавящимся соединением и укажите направления изменения температуры вдоль все моновариантных кривых.
14. Что такое точки Ван-Рейна и каковы их особенности.
15. Чем отличаются бинарные эвтектики от перитектик 1-го рода.
16. Чем отличаются тройные эвтектики от перитектик 1-го рода и 2-го родов.

Тема 4 – Термодинамические модели твердых растворов

17. Запишите уравнение Питцера для бинарной системы, какие параметры в него входят.
18. Запишите уравнение Питцера для тройной системы, какие параметры в него входят.
19. Запишите уравнение EFLCP для бинарной системы, какие параметры в него входят.
20. Запишите уравнение EFLCP для тройной системы, какие параметры в него входят.
21. Запишите уравнение LDM для бинарной системы, какие параметры в него входят.
22. На основе модели LDM изложите алгоритм расчета диаграммы расслаивания твердого бинарного раствора.
23. На основе модели LDM изложите алгоритм расчета диаграммы расслаивания твердого тройного раствора.
24. На основе модели LDM изложите алгоритм расчета критического состава и температуры бинарного расслаивающегося раствора.
25. На основе модели LDM изложите алгоритм расчета критических кривых тройных расслаивающихся растворов.

Тема 5 – Явления переноса в твердых телах

26. Проведите аналитический и графический расчет энергии активации диффузии из данных о температурной зависимости коэффициента диффузии.
27. Проведите аналитический и графический расчет энергии активации вязкого течения из данных о температурной зависимости динамической вязкости.
28. Проведите аналитический и графический расчет энергии активации электропроводности из данных о температурной зависимости удельной электропроводности.

29. Запишите и обоснуйте связь между электронной тепло- и электропроводностью.

Тема 6 – Сорбционные явления, кинетика роста твердых фа

30. Каковы современные методы моделирования процессов адсорбции?
31. Чем отличается адсорбция и абсорбция?
32. Чем отличается физическая и химическая адсорбция?
33. Каким экспериментальными методами определяется удельная поверхность и пористая структура адсорбентов?

4.4.2 Варианты тестирования

Тестирование студентов проводится на практическом занятии и составляет 10 минут.

по теме 1:

Вариант 1

1. Определить число компонентов в системе $\text{NaCl-CaCl}_2\text{-Na}_2\text{SO}_4\text{-CaSO}_4\text{-H}_2\text{O}$.
2. Приведите примеры точечных дефектов.

Вариант 2

1. Определить число компонентов в системе $\text{CsCl-AlCl}_3\text{-ZnCl}_2\text{-CsSO}_4\text{-Al}_2(\text{SO}_4)_3\text{-H}_2\text{O}$.
2. Приведите примеры протяженных дефектов.

по теме 2:

Вариант 1

1. Зависит ли константа равновесия реакции $\text{FeO}+\text{CO}=\text{Fe}+\text{CO}_2$ от общего давления? Обоснуйте.
2. Как вычисляется колебательная составляющая энтропии твердого тела по методу Дебая.

Вариант 2

1. Зависит ли константа равновесия реакции $\text{Fe}_2\text{O}_3+3\text{CO}=2\text{Fe}+3\text{CO}_2$ от общего давления? Обоснуйте.
2. Как вычисляется колебательная составляющая изобарной теплоемкости твердого тела по методу Дебая.

по теме 3:

Вариант 1

1. Что такое тройная эвтоника на изотермах растворимости тройных систем, каковы их основные свойства?
2. Как влияет на число термодинамических степеней свободы наличие сильно искривленных границ раздела фаз?

Вариант 2

1. Что такое тройная перитоника на изотермах растворимости тройных систем, каковы их основные свойства?
2. Как влияет на число термодинамических степеней свободы наличие внешних силовых полей?

по теме 4:

Вариант 1

1. Какие модели неидеальности газовой фазы Вы знаете?
2. Как связать критическую температуру распада твердых растворов и регулярный параметр неидеальности в бинарной системе.

Вариант 2

1. Какие модели неидеальности в растворах неэлектролитов Вы знаете?
2. Запишите уравнения критической фазы.

по теме 5:

Вариант 1

1. Запишите законы массопереноса Фика.
2. Что такое ширина запрещенной зоны полупроводников.

Вариант 2

1. Запишите законы теплопереноса Ла Пласа.
2. В чем отличие проводников 1-го и 2-го рода.

по теме 6:

Вариант 1

1. Запишите уравнение изотермы адсорбции Лэнгмюра.
2. В чем отличие физической и химической адсорбции.

Вариант 2

1. Запишите уравнение изотермы адсорбции Фрейлиха.
2. Как определяют удельную поверхность сорбентов.

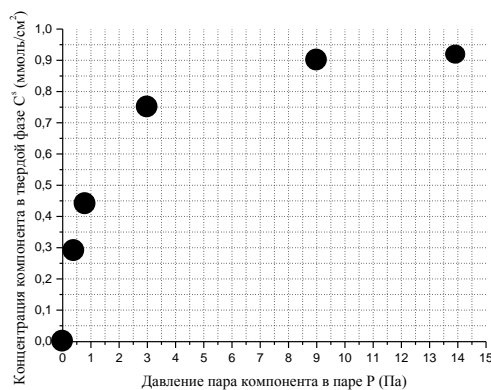
Типовые контрольные задания для проведения промежуточной аттестации.

Вариант 1.

Задание 1

На графике представлена экспериментальная зависимость адсорбции ($C^s = a$) от концентрации адсорбата в жидком растворе (C^l) или давления пара адсорбата (P).

- 1.1. Снять с графика зависимость $C^s = f(C^l), f(P)$.
- 1.2. Рассчитать $1/C^s, 1/C^l, \ln C^l, \ln P$
- 1.3. Построить зависимости $1/C^s = f(1/C^l), f(1/P), \ln C^s = f(\ln C^l), f(\ln P)$
- 1.4. Определить какой модели отвечает изотерма адсорбции: Генри ($C^s = K_f C^l, K_f P$), Лэнгмюра ($C^s = bC^l / (1 + bC^l), bP / (1 + bP)$), Фрейлиха ($C^s = B(C^l)^{1/n}, B(C^l)^{1/n}$)
- 1.5. Определить параметры модели: K_f или b или B и n .
- 1.6. Произвести расчет адсорбции по модельному уравнению и сравнить результаты с экспериментом.
- 1.7. Рассчитать массу адсорбированного вещества при массе сорбента 15 г, удельной поверхности сорбента $30 \text{ м}^2/\text{г}$ и давлении пара адсорбата 30 Па.



Задача-2

Используя формулы Лапласа, Томсона, Гиббса и т.п. рассчитать и построить графики зависимости термодинамических функций наносистем (F) от среднего линейного размера наночастиц F(r) при различных r = 1, 3, 10, 30, 100 нм, при температуре T и атмосферном общем давлении P = 1 а:

- Давление пара над сферической каплей расплава вещества А на воздухе - $P(r)$;
 $P(r) = P_0 \exp(v/RT * 2\sigma/r)$, где σ - поверхностное натяжение, v - молярный объем, P_0 - давление над компактным материалом.
- Температуру плавления $[T(r) - T_0]/T_0 = -v/L * 2\sigma/r$, L - молярная теплота плавления, T_0 - температура плавления компактного материала.
- Изменение химического п-ала $\Delta\mu$ (Дж/моль): $\Delta\mu(r) = 2\sigma/\rho r$ где: $\rho = 1/v$ (молярная плотность).

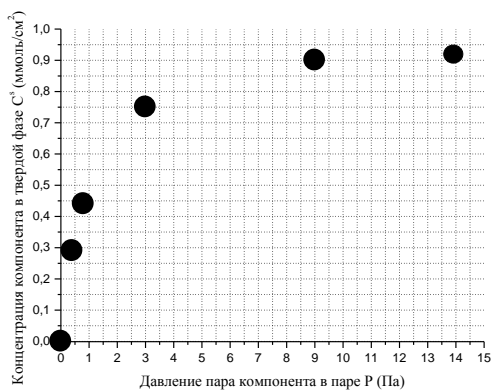
№	В-во А	T(К)	v(м ³ /моль)	σ (Дж/м ²)	P ₀ (Па)	T ₀ (К)	L (кДж/моль)
1	H ₂ O (18 а.е.)	293	18 10 ⁻⁶	73 10 ⁻³	552	373	6.1
2	In (115 а.е.)	473	18 10 ⁻⁶	971 10 ⁻³	2.7	429	3.3

Вариант 2.

Задание 1

На графике представлена экспериментальная зависимость адсорбции ($C^s = a$) от концентрации адсорбата в жидком растворе (C^l) или давления пара адсорбата (P).

- 1.1. Снять с графика зависимость $C^s = f(C^l), f(P)$.
- 1.2. Рассчитать $1/C^s, 1/C^l, \ln C^l, \ln P$
- 1.3. Построить зависимости $1/C^s = f(1/C^l), f(1/P), \ln C^s = f(\ln C^l), f(\ln P)$
- 1.4. Определить какой модели отвечает изотерма адсорбции: Генри ($C^s = K_f C^l, K_f P$), Лэнгмюра ($C^s = bC^l / 1 + bC^l, bP / 1 + bP$), Фрейлиха ($C^s = B(C^l)^{1/n}, B(C^l)^{1/n}$)
- 1.5. Определить параметры модели: K_f или b или B и n.
- 1.6. Произвести расчет адсорбции по модельному уравнению и сравнить результаты с экспериментом.
- 1.7. Рассчитать массу адсорбированного вещества при массе сорбента 15 г, удельной поверхности сорбента 30 м²/г и давлении пара адсорбата 30 Па.



Задача-2.

Используя формулы Лапласа, Томсона, Гиббса и т.п. рассчитать и построить графики зависимости термодинамических функций наносистем (F) от среднего линейного размера наночастиц F(r) при различных r = 1, 3, 10, 30, 100 нм, при температуре T и атмосферном общем давлении P = 1 а:

- Давление пара над сферической каплей расплава вещества А на воздухе - P(r);, $P(r) = P_0 \exp(v/RT * 2\sigma/r)$, где σ - поверхностное натяжение, v - молярный объем, P₀ – давление над компактным материалом.

- температуру плавления $[T(r) - T_0]/T_0 = -v/L * 2\sigma/r$, L – молярная теплота плавления, T₀ – температура плавления компактного материала.

- Изменение химического п-ала $\Delta\mu$ (Дж/моль): $\Delta\mu(r) = 2\sigma/\rho r$ где: $\rho = 1/v$ (молярная плотность).

Вар.	В-во А	T (К)	v(м ³ /моль)	σ (Дж/м ²)	P ₀ (Па)	T ₀ (К)	L (кДж/моль)
1	H ₂ O (18 а.е.)	293	18 10 ⁻⁶	73 10 ⁻³	552	373	6.1
2	In (115 а.е.)	473	18 10 ⁻⁶	971 10 ⁻³	2.7	429	3.3

4.4.3. Темы курсовых работ

- Соотношения взаимности Онзагера.
- Фазовые переходы 1-го и 2-го рода.
- Модель EFLCP для растворов электролитов.
- Модель Питцера растворов электролитов.
- Модель NRTL растворов неэлектролитов.
- Регулярная, квази- и субрегулярная модели растворов.
- Модель Ван-дер Ваальса неидеальных газов.
- Модель LDM Твердых растворов.
- Методы минимизации потенциала Гиббса.
- Уравнение ван-дер-Ваальса смещения фазового равновесия.
- Связь между явлениями массо-, тепло- и электропереноса.
- Изотерма адсорбции БЭТ.
- Изотерма адсорбции Гиббса.
- Динамические методы определения поверхностного натяжения.
- Метод Дебая расчета термодинамических функций.

5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы

обучающихся по дисциплине

Методические указания для обучающихся по организации самостоятельной работы по дисциплине, включая перечень тем самостоятельной работы, формы текущего контроля по дисциплине и требования к их выполнению размещены в электронной информационно-образовательной среде СПбГТИ(ТУ) на сайте Медия: <http://media.technolog.edu.ru>.

6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации

Своевременное выполнение обучающимся мероприятий текущего контроля позволяет превысить (достигнуть) пороговый уровень («удовлетворительно») освоения предусмотренных элементов компетенций.

Результаты дисциплины считаются достигнутыми, если для всех элементов компетенций превышен (достигнут) пороговый уровень освоения компетенции на данном этапе. Промежуточная аттестация по дисциплине проводится в форме зачета и экзамена в 6 семестре и форме экзамена в 7 семестре.

К сдаче зачета допускаются студенты, выполнившие все формы текущего контроля, в т.ч. КР, тесты. При сдаче зачета, студент получает два вопроса, приведенного в приложении 1.

Время подготовки студента к устному ответу на вопросы - до 30 мин.

Пример варианта вопросов на зачете

1. Запишите фундаментально уравнение для внутренней энергии с учетом вклада границ раздела фаз (поверхностного натяжения) и внешних силовых полей.
2. В каких координатах строятся диаграммы плавкости трехкомпонентных систем?

Экзамен предусматривают выборочную проверку освоения предусмотренных элементов компетенций и комплектуются вопросами (заданиями) двух видов: теоретический вопрос (для проверки знаний) и комплексная задача (для проверки умений и навыков).

При сдаче экзамена, студент получает два вопроса из перечня вопросов и задачу, время подготовки студента к устному ответу - до 40 мин.

Пример варианта экзаменационного билета

1. Правило фаз Гиббса с учетом вклада границ раздела фаз (поверхностного натяжения) и внешних силовых полей.
2. Уравнения открытых фазовых процессов.
3. Изотерма адсорбции Лэнгмюра, определение параметров.

7. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины

Основная литература

1. Стромберг, А.Г. Физическая химия /А.Г. Стромберг, Д.П. Семченко – М.: ВШ, 2009. – 527с.
2. Иванов – Шиц, А. Ионика твердого тела / А.Иванов – Шиц, И.В.Мурин. СПб.: СПбГУ. Т.2. 2010. 999 с.

Дополнительная

3. Ежовский, Ю. К. Основы технологии интегральных устройств. Учебное пособие / Ю. К. Ежовский. СПб: СПбГТИ(ТУ). 2012. - 149 с. + ЭБ.

Вспомогательная

4. Фистуль, В.И. Физика и химия твердого тела (в 2 томах)/В.И.Фистуль. М.: Металлургия. 1995. 486 с.
5. Ашкрофт, Н. Физика твердого тела (в 2 томах)/ Н.Ашкрофт, Н.Мермин. - М.: Мир. 1979 -824 с.
6. Швейкин, Г. П.Химия твердого тела: Структура, свойства и применение новых неорганических материалов / Г. Швейкин. Ред., Ивановский А. Л. — Екатеринбург: УрО РАН, 1998. — 164 с.
7. Мищенко, К.П.Практические работы по физической химии / Под ред., А.А.Равделя, А.М.Пономаревой. – 5-е изд., перераб. – СПб: Профессия, 2002. – 384с.
8. Пригожин, И. Современная термодинамика. От тепловых двигателей до диссипативных структур / И. Пригожин, Д. Кондепуди: пер. с англ. – М.: Мир, 2002. – 462 с.

8. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины

1. Интернет сайты ведущих государственных вузов и научных организаций РФ: МГУ, СПбГУ, РХТУ, НГУ, РАН РФ и др.
2. Зарубежные научные и учебные центры: NBS USA, MTI UK, ChLab Japan, NSRDS и др.
3. Интерактивная база данных книг и журналов SpringerLink.

9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.

Все виды занятий по дисциплине «Введение в физику твердого тела» проводятся в соответствии с требованиями следующих СТП:

СТО СПбГТИ 020-2011. КС УКДВ. Виды учебных занятий. Лабораторные занятия. Общие требования к организации и проведению.

СТП СПбГТИ 040-02. КС УКДВ. Виды учебных занятий. Лекция. Общие требования;

СТО СПбГТИ 018-2014. КС УКДВ. Виды учебных занятий. Семинары и практические занятия. Общие требования к организации и проведению.

СТП СПбГТИ 048-2009. КС УКВД. Виды учебных занятий. Самостоятельная планируемая работа студентов. Общие требования к организации и проведению.

СТП СПбГТИ 016-2014. КС УКВД. Порядок проведения зачетов и экзаменов.

Планирование времени, необходимого на изучение данной дисциплины, лучше всего осуществлять на весь семестр, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала.

Основными условиями правильной организации учебного процесса для студентов является: плановость в организации учебной работы; серьезное отношение к изучению материала; постоянный самоконтроль.

На занятия студент должен приходить, имея багаж знаний и вопросов по уже изученному материалу.

10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине

10.1 Информационные технологии

В учебном процессе по данной дисциплине предусмотрено использование информационных технологий: чтение лекций с использованием слайд-презентаций; взаимодействие с обучающимися посредством электронной почты.

10.2 Программное обеспечение

- Microsoft Office (Microsoft Excel);

10.3 Информационные справочные системы

- справочно-поисковая система «Консультант-Плюс».
- www.chem.msu.ru – обучающие ресурсы Химического факультета МГУ.
- база данных www.POLPRED.com, ежедневное обновление – единая лента новостей и аналитики на русском языке, 600 источников.

Электронно-библиотечные системы, предлагаемые библиотекой СПбГТИ(ТУ)

Интернет-ресурсы:

1. Российское образование. Федеральный образовательный портал Режим доступа <http://www.edu.ru/>
2. Электронная библиотека «Библиотех»
3. Сайт Европейского патентного ведомства. Режим доступа - <http://ep.espacenet.com>.
4. Nanotechnology - Режим доступа - <http://iopscience.iop.org/0957-4484> РНБ, СПбГУ, БАН
5. Nature Nanotechnology/ Режим доступа - <http://www.nature.com/nnano/index.html>
6. Издательство IEEE. Режим доступа - www.ieee.org,
7. Издательство SPRINGER. Режим доступа - www.springerlink.com,
8. Научный центр CHEMWEB. Режим доступа - www.chemweb.com,
9. Научный центр PUBLS.ACS. Режим доступа - www.pubs.acs.org,
10. Библиотека DOAJ. Режим доступа - www.doaj.org, RSC Publishing journals Режим доступа www.rsc.org/Publishing/Journals/Index.asp,
11. Библиотека патентов. Режим доступа - www.uspto.gov,
12. Химическая энциклопедия. Режим доступа - <http://www.cnshb.ru/AKDiL/0048/default.shtm>,
13. Библиотека eLIBRARY. Режим доступа - www.elibrary.ru ,
14. Библиотека. Режим доступа - www.chemport.ru,
15. Библиотека. Режим доступа - www.diss.rsl.ru,
16. Библиотека. Режим доступа - www.biblioclub.ru,
17. Сайт о нанотехнологиях №1 в России. Режим доступа - www.nanonewsnet.ru.
18. Интерактивная база данных книг и журналов SpringerLink - www.sciencedirect.com

11. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине

Для ведения лекционных и практических занятий используется аудитория, оборудованная средствами оргтехники, на 25 посадочных мест, интерактивные доски. Для

материально-технического обеспечения дисциплины на кафедре имеются учебные и лабораторные помещения, оснащенные необходимым набором реактивов, посуды для подготовки и выполнения твердофазного синтеза, золь-гель синтеза, гидротермального синтеза, а также комплектом приборов и оборудования для выполнения необходимого комплекса исследования свойств функциональных материалов; техника для интерактивного проведения занятий; компьютерные места, обеспеченные выходом в Internet и необходимым для выполнения индивидуальных домашних заданий программным обеспечением. Рентгенофазовые исследования выполняются на дифрактометре XRD-7000 (Shimadzu) имеется печь муфельная SNOL 6.2/1300⁰C, шкаф сушильный ЛОиП 350⁰C, поляриметр, весы лабораторные, весы аналитические OHAUS-200 и др. лабораторное оборудование.

12. Особенности освоения дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья

Для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями учебные процесс осуществляется в соответствии с Положением об организации учебного процесса для обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья СПбГТИ(ТУ), утвержденным ректором.

**Фонд оценочных средств
для проведения промежуточной аттестации по
дисциплине «Основы кристаллохимии функциональных материалов»**

1 Перечень компетенций и этапов их формирования

Компетенции		
Индекс	Формулировка	Этап формирования
ОПК-2	готовность использовать знания о современной физической картине мира, пространственно-временных закономерностях, строении вещества для понимания окружающего мира и явлений природы	промежуточный
ОПК-3	готов и способен использовать знания о строении вещества, природе химической связи в различных классах химических соединений для понимания свойств материалов и механизма химических процессов, протекающих в окружающем мире	промежуточный
ПК-2	готовность применять аналитические и численные методы решения поставленных задач, использовать современные информационные техно-логии, проводить обработку информации с использованием прикладных программных средств сферы профессиональной деятельности, использовать сетевые компьютерные технологии и базы данных в своей профессиональной области, пакеты прикладных программ для расчета технологических параметров оборудования	промежуточный
ПК-16	способность планировать и проводить физические и химические эксперименты, проводить обработку их результатов и оценивать погрешности, выдвигать гипотезы и устанавливать границы их применения, применять методы математического анализа и моделирования, теоретического и экспериментального исследования	промежуточный
ПК-16	способен планировать и проводить физические и химические эксперименты, проводить обработку их результатов и оценивать погрешности, выдвигать гипотезы и устанавливать границы их применения, применять методы математического анализа и моделирования, теоретического и экспериментального исследования;	промежуточный
ПК-19	готовность использовать знания основных физических теорий для решения возникающих физических задач, самостоятельного приобретения физических знаний, для понимания принципов работы приборов и устройств, в том числе выходящих за пределы компетентности конкретного направления	промежуточный

2 Показатели и критерии оценивания компетенций на различных этапах их формирования, шкала оценивания

Показатели оценки результатов освоения дисциплины	Планируемые результаты	Критерий оценивания	Компетенции
Освоение раздела «Введение»	Готов использовать основные законы физической химии твердого тела в их математической, графической и словесной формулировках, основные понятия и определения. Способен использовать основные законы естественнонаучных дисциплин для разработки и изучения свойств функциональных материалов.	Правильные ответы на вопросы №№1-5	<i>ОПК- 2</i>
Освоение темы «Термодинамика»	Готов использовать знания о строении вещества, природе химической связи в различных классах химических соединений для понимания свойств материалов; Знает общие закономерности химических и физических превращений в твердофазных системах и их специфику; особенности термодинамики твердых тел; готов применять аналитические и численные методы для решения задач. Применять знания основных законов и теории в т.ч. основы термодинамики, особенности протекания реакций в твердых фазах, строить термодинамические модели; способен применять знания об особенностях протекания реакций в твердых фазах, строить термодинамические модели. Способен самостоятельно приобретать знания для понимания принципа работы устройств для исследования твердофазных реакций и параметров физико-химических процессов. Владеет современными информационными технологиями, может проводить обработку информации с использованием прикладных программных средств.	Правильные ответы на вопросы №№6-16	<i>ОПК-2, ОПК-3, ПК-2, ПК-16, ПК-19</i>

<p>Освоение темы «Фазовые равновесия и фазовые процессы с участием твердых фаз»</p>	<p>Знает основные законы физической химии твердого тела, методики проведения численных расчетов, теоретические и экспериментальные исследования процессов, проходящих в твердых телах. Готов применять знания основных законов и теории для изучения фазовых равновесий, строить термодинамические модели диаграмм растворимости, расщепляемости, плавкости. Умеет анализировать диаграммы растворимости водно-солевых систем, критические твердые растворы, устойчивость твердых растворов. Владеет современными информационными технологиями, может проводить обработку информации с использованием прикладных программных средств</p>	<p>Правильные ответы на вопросы №№17-33</p>	<p><i>ОПК-3 ПК-16, ПК-19 ПК-2</i></p>
<p>Освоение темы «Термодинамические модели твердых растворов»</p>	<p>Способен применять аналитические и численные методы решения для решения задач в области физики твердого тела; использовать полученные знания для решения практических вопросов химической технологии. Определять регулярные параметры неидеальности. строить порограммы, рассчитывать модели EFLCP и LDM. Владеет методиками проведения численных расчетов; может построить термодинамические модели, изотермы адсорбции, определять изотермическую сжимаемость, , кинетику роста твердых фаз; самостоятельно приобретать знания для понимания принципа работы устройств для исследования особенностей протекания твердофазных реакций и параметров физико-химических процессов, в том числе выходящих за пределы компетентности направления.</p>	<p>Правильные ответы на вопросы №№34-43</p>	<p><i>ПК-2, ПК-16, ПК-19, ПК-18</i></p>

<p>Освоение темы «Явления переноса в твердых телах»</p>	<p>Способен использовать основные законы для разработки и изучения свойств функциональных материалов в т.ч. наноматериалов. Умеет проводить расчеты энергий активации диффузии, электропроводности, коэффициентов динамической вязкости и коэффициентов теплопроводности. Умеет планировать эксперимент, прогнозировать свойства функциональных материалов на основе экспериментальных и теоретических исследований. Знает принципы работы приборов и устройств, применяемых для физических экспериментов.</p>	<p>Правильные ответы на вопросы №№44-50</p>	<p><i>ОПК-2, ПК-16, ПК-18 ПК-19</i></p>
<p>Освоение темы «Сорбционные явления, кинетика роста твердых фаз»</p>	<p>Умеет самостоятельно приобретать знания для понимания особенностей протекания твердофазных реакций и параметров физико-химических процессов, в том числе выходящих за пределы компетентности направления. Готов использовать полученные знания для решения практических вопросов химической технологии, планировать эксперимент, экспериментальными методами определять удельную поверхность и пористость, строить изотермы адсорбции Лэнгмюра, Фрейлиха. Умеет проводить обработку результатов расчета и эксперимента, оценивать погрешности, выдвигать гипотезы и устанавливать границы их применения, применять методы математического анализа и моделирования.</p>	<p>Правильные ответы на вопросы №№51-57</p>	<p><i>ОПК-2, ОПК-3, ПК-16, ПК-18 ПК-19</i></p>

Шкала оценивания соответствует СТО СПбГТИ(ТУ):

- если по дисциплине промежуточная аттестация проводится в форме зачета, то результат оценивания – «зачтено», «не зачтено»;
- если по дисциплине промежуточная аттестация проводится в форме экзамена и (или) курсового проекта (работы), то шкала оценивания – балльная.

*3 Типовые контрольные вопросы для проведения промежуточной аттестации
(ОПК-2)*

1. Идеальные и реальные кристаллы.
2. Кристаллическое и аморфное состояние. Полиморфные превращения.

3. Классификация дефектов. Типы твердых растворов.
4. Идеальные и реальные кристаллы.
5. Теория разупорядоченности.

Тема 1 – *Термодинамика.* (ОПК-2, ОПК-3, ПК-2, ПК-16, ПК-19)

6. Фундаментальные уравнения, характеристические функции для термодинамических потенциалов (U, H, G, F).
7. Фундаментальные уравнения и укажите характеристические функции для энтропии и функций Массье-Планка потенциалов.
8. Идеальные твердые растворы.
9. Влияние на число термодинамических степеней свободы внешних силовых полей.
10. Уравнение спинодали для строго регулярных твердых растворов.
11. Классификация состояний равновесия.
12. Уравнения границ состояний (критерии устойчивости).
13. Модели неидеальности газовой фазы.
14. Колебательная составляющая энтропии твердого тела по методу Дебая.
15. Какие параметры влияют на константу равновесия в твердофазных реакциях?
16. Правило фаз Гиббса с учетом вклада границ раздела фаз.

Тема 2– *Фазовые равновесия и фазовые процессы с участием твердых фаз.*
(ПК-2, ПК-16, ПК-18, ПК-19)

17. Тройная перитоника на изотермах растворимости тройных систем.
18. Вывод уравнение Клаузеуса Клапейрона из уравнения Ван-дер-Ваальса для однокомпонентных систем в дифференциальной форме.
19. Вывод уравнение Клаузеуса Клапейрона из уравнения Ван-дер-Ваальса для однокомпонентных систем в интегральной форме.
20. Влияние на число термодинамических степеней свободы сильно искривленных границ раздела фаз.
21. Вывод уравнения типа уравнения Клаузеуса Клапейрона из уравнения Ван-дер-Ваальса для многокомпонентных азеотропов.
22. Законы Гиббса-Коновалова.
23. Вывод 3 закона Гиббса-Коновалова из уравнения Ван-дер-Ваальса для бинарных систем.
24. Диаграмма плавкости тройной эвтектической системы.
25. Диаграмма плавкости тройной системы с бинарным конгруэнтно плавящимся соединением.
26. Диаграмма плавкости тройной системы с бинарным конгруэнтно плавящимся соединением.
27. Особенности точек Ван-Рейна.
28. Открытые фазовые процессы устойчивости твердых растворов (бинодали и спинодали), критические твердые растворы.
29. Бинарные эвтектики.
30. Отличия тройные эвтектики от перитектик 1-го рода и 2-го родов.
31. Диаграммы расслаивания твердых растворов, диаграммы растворимости и плавкости.

32. Критические твердые растворы.
33. Построение диаграммы растворимости водно-солевой системы.

Тема 3 – Термодинамические модели твердых растворов. (ПК-2, ПК-16, ПК-19, ПК-18)

34. Уравнение Питцера для бинарной и тройной системы.
35. Общая классификация моделей, регулярные, субрегулярные растворы.
36. Модель LDM диаграммы расслаивания твердых растворов.
37. Уравнение EFLCP для бинарной системы.
38. Определение теплоты смешения растворов методом изотермической калориметрии.
39. Уравнение EFLCP для тройной и бинарной системы.
40. Модель LDM. Алгоритм расчета диаграммы расслаивания твердого бинарного раствора.
41. Алгоритм расчета диаграммы расслаивания твердого тройного раствора.
42. Алгоритм расчета критических кривых тройных расслаивающихся растворов (LDM).
43. Алгоритм расчета критического состава и температуры бинарного расслаивающегося раствора.

Тема 4– Явления переноса в твердых телах. (ОПК-2, ПК-16, ПК-18, ПК-19)

44. Аналитический и графический расчет энергии активации диффузии.
45. Расчет энергии активации вязкого течения из данных о температурной зависимости динамической вязкости (аналитический и графический).
46. Аналитический и графический расчет энергии активации электропроводности из данных о температурной зависимости удельной электропроводности.
47. Какова связь между электронной тепло- и электропроводностью?
48. Определение коэффициентов теплопроводности в твердых телах.
49. Законы массопереноса Фика.
50. Определение изобарной теплоемкости образца.

Тема 5– Сорбционные явления, кинетика роста твердых фаз. (ОПК-2, ОПК-3, ПК-16, ПК-18 ПК-19)

51. Каковы современные методы моделирования процессов адсорбции.
52. Чем отличается адсорбция и абсорбция?
53. Как определяют удельную поверхность сорбентов?
54. Чем отличается физическая и химическая адсорбция?
55. Каким экспериментальными методами определяется удельная поверхность и пористая структура адсорбентов?
56. Уравнение изотермы адсорбции Лэнгмюра.
57. Уравнение изотермы адсорбции Фрейлиха.