

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение  
высшего образования «Национальный исследовательский университет  
«Высшая школа экономики»»

УТВЕРЖДАЮ

Проректор

\_\_\_\_\_ С.Ю. Рощин

Одобрено на заседании Академического  
совета Аспирантской школы по химии  
Протокол №

Согласовано

Академический директор Аспирантской  
школы по химии

**Программа вступительного испытания по специальности  
основной образовательной программы высшего образования – программы  
подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре  
по направлению 04.06.01 Химические науки  
ОП Химия твердого тела (02.00.21)**

Москва, 2020

## **1. Область применения и нормативные ссылки**

Программа вступительного испытания сформирована на основе федеральных государственных образовательных стандартов высшего образования по программам специалитета или магистратуры.

## **2. Структура вступительного экзамена**

Вступительное испытание основной образовательной программы высшего образования – программы подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре по направлению 04.06.01 «Химические науки» состоит из двух частей: оценки индивидуальных достижений (конкурс портфолио) и оценки знаний по научной специальности будущей научно-исследовательской работы (диссертации) абитуриента.

### **2.1. Оценка индивидуальных достижений. Структура портфолио**

Общая сумма баллов не может превышать 50 баллов. Баллы назначаются в соответствии с таблицей при предоставлении подтверждающих документов.

Для участия в конкурсе индивидуальных достижений (портфолио) абитуриент может предоставить следующие документы:

1. Резюме (CV), включающее список публикаций, сведения об участии в конференциях, школах, исследовательских проектах, научных грантах, опыте работы и т.д. Резюме может быть составлено на русском или английском языке по желанию абитуриента.

2. Описание исследовательского проекта (не более пяти страниц), который поступающий предполагает реализовать во время обучения в аспирантуре. Описание проекта должно содержать краткое введение в область предполагаемого исследования; обоснование его цели, значимости, описание задач, которыми поступающий предполагает заниматься в аспирантуре, и методов их решения.

3. Копия документа об образовании с перечнем пройденных дисциплин и оценок по этим дисциплинам. Если абитуриент еще не получил диплом специалиста или магистра, необходимо приложить официальную копию полного списка уже пройденных дисциплин с оценками.

4. Рекомендательное письмо от потенциального научного руководителя планируемого диссертационного исследования, в котором отражено его согласие выступить научным руководителем абитуриента в аспирантуре.

5. Собственные научные публикации.

6. Опыт участия в российских и международных конференциях с указанием информации о конференции и темы доклада, если таковые имеются (список конференций в виде файла PDF со ссылками на сайты конференций).

### **2.2. Критерии оценки портфолио (максимум 50 баллов)**

<b>Доклады на молодежных, международных или внутренних конференциях</b>	<b>не более 5 баллов</b>
Устный доклад на молодежной конференции	3 балла
Призовое место за устный доклад на молодежной конференции-конкурсе	5 баллов
Доклад на международной или внутренней конференции	5 баллов
<b>Описание исследовательского проекта</b>	<b>не более 15 баллов</b>
<b>Рекомендательное письмо от потенциального научного руководителя с согласием на руководство в аспирантуре. Потенциальный научный руководитель должен быть согласован с академическим директором АШ по химии.</b>	<b>не более 15 баллов</b>
<b>Публикации в журналах, индексируемых Web of Science или Scopus</b>	<b>не более 15 баллов</b>
Наличие 2-х и более публикаций в журнале не ниже 2-го квартиля по WoS или Scopus	15 баллов
Наличие публикации в журнале не ниже 2-го квартиля по WoS или Scopus	12 баллов
Наличие публикации в другом журнале, цитируемом WoS или Scopus	9 баллов

*Минимальный балл (неудовлетворительная оценка) за портфолио – до 14 баллов включительно. Для участия в конкурсе по итогам оценки индивидуальных достижений необходимо набрать суммарно не менее 15 баллов.*

### **2.3. Структура и процедура проведения оценки знаний по научной специальности**

Оценка знаний по направленностям 02.00.21 «Химия твердого тела» проводится в форме устного ответа на вопросы экзаменационной комиссии и собеседования по вопросам обоснования темы кандидатской диссертации.

В ходе ответа на вопросы экзаменационной комиссии поступающему могут быть заданы вопросы из всех разделов блока программы по соответствующей направленности. Оценивается уровень знаний абитуриента и его готовность к анализу и обсуждению литературных данных.

В ходе собеседования абитуриента могут спросить о предшествующей исследовательской работе, например, магистерском исследовании или квалификационной работе специалиста, а также о планируемом диссертационном исследовании. Оценивается степень проработки и осознанность планируемого исследования.

#### **Оценка уровня знаний (баллы):**

Итоговая оценка выставляется по 50-балльной шкале. Выставляется усреднённая оценка по ответам на все вопросы экзаменационной комиссии по направленности, указанной в заявлении о

поступлении в аспирантуру и соответствующей научной специальности будущей научно-исследовательской работы (диссертации) абитуриента.

**Минимальное количество баллов, необходимое для участия в конкурсе по итогам оценки знаний по направленности, соответствующей научной специальности будущей научно-исследовательской работы (диссертации), – 15 баллов.**

#### **Критерии оценивания**

<b>Критерии оценивания</b>	<b>Баллы</b>
Ответ полный, без замечаний, продемонстрированы полные знания	45-50
Ответ полный, с незначительными замечаниями	29-44
Ответ неполный, существенные замечания	15-29
Ответ на поставленный вопрос не дан или несодержателен	0-14

## **3. Содержание**

### **Раздел 1. Общие понятия. Строение твердых тел. Энергия кристаллической решетки.**

1.1. Твердое состояние. Типы кристаллических решеток: атомная, ионная, молекулярная. Важнейшие формы кристаллических решеток: простая кубическая, объемно-центрированная. Строение ионных кристаллов. Ионные радиусы. Плотная шаровая упаковка. Октаэдрические и тетраэдрические пустоты: их размер и способы заполнения.

1.2. Энергия одноатомных кристаллов. Силы притяжения и отталкивания. Решеточные суммы для одноатомных кристаллов. Энергия ионных кристаллов. Расчет решеточных сумм и их значения для различных типов решетки. Расчет и экспериментальное определение энергии кристаллической решетки ионных кристаллов. Вклад в нее различных составляющих. Сопоставление энергии и некоторых их физических свойств для кристаллов с различным типом связи. Энергия поверхности кристалла.

### **Раздел 2. Дефекты в твердом теле.**

2.1. Основные типы точечных дефектов (Шоттки, Френкеля). Искажение кристаллической решетки вокруг дефекта. Термодинамика образования точечных дефектов. Энтальпия дефектов в ионных кристаллах. Термодинамическое обоснование необходимости существования точечных дефектов в кристалле и их концентрация.

2.2. Квазихимические реакции и квазихимическое описание равновесия точечных дефектов. Нестехиометрия бинарных кристаллов. Заряд дефектов в бинарных кристаллах. Равновесие дефектов. Влияние на стехиометрию атмосферы, концентрации растворов и соотношения реагентов. Взаимодействие дефектов и их ассоциация.

2.3. Твердые растворы и их типы. Условия образования твердых растворов замещения. Правило Вегарда и отклонения от него. Гетеровалентное допирование.

2.4. Неравновесность протяженных дефектов. Линейные дислокации. Деформация твердых тел и их упругость. Пластические свойства кристаллов с различным характером связи. Механические свойства полимеров.

2.5. Поверхности раздела. Прочность кристаллов, модель Гриффитса.

### **Раздел 3. Диффузия в твердых телах.**

3.1. Механизмы диффузии (междоузельный, вакансионный, эстафетный). Энергия активации диффузии. Статистический характер диффузии. Коэффициент диффузии.

3.2. Первый и второй законы Фика. Анизотропия коэффициентов диффузии в реальных кристаллах. Взаимная диффузия.

3.3. Диффузия в нестехиометрических кристаллах и кристаллах, содержащих примеси. Зависимость коэффициента диффузии от наличия примесей и атмосферы. Диффузия примесных атомов.

### **Раздел 4. Электронная и ионная проводимость.**

4.1. Элементы зонной теории. Движение электрона в поле с периодическим потенциалом. Образование и ширина зон.

4.2. Природа металлической связи. Металлическая проводимость. Графит. Электропроводящие полимеры.

4.3. Полупроводники. Ширина запрещенной зоны простых и бинарных кристаллов. Концентрация носителей. Электронная и дырочная проводимость. Легирование полупроводниковых материалов. Донорные и акцепторные примеси.

4.4. Диффузия ионов в электрическом поле. Энергия активации ионной проводимости. Зависимость проводимости от наличия гетеровалентных примесей. Соотношение различных механизмов ионной проводимости. Числа переноса и их определение.

## **Раздел 5. Кинетика твердофазных реакций.**

5.1. Твердофазные процессы и их кинетические кривые. Энергия активации твердофазных процессов. Термодинамика образования зародыша новой фазы. Механизмы образования зародышей и их роста.

5.2. Диффузионно-контролируемые реакции. Лимитирующие стадии переноса. Влияние на скорость твердофазных процессов температуры и степени дисперсности соединений. Уравнения сжимающейся сферы.

5.3. Твердофазный синтез. Методы инициирования твердофазных реакций. Механическая активация, механохимические процессы.

### **Рекомендуемая литература**

1. Кукушкин Ю.Н. Химия координационных соединений. М., 1985.
2. Третьяков Ю.Д. Твердофазные реакции, М., 1978.
3. Хенней Н. Химия твердого тела. М., 1971.
4. Вест А. Химия твердого тела. Теория и приложения ч 1. М.: Мир, 1988.
5. Кнотько А.В., Пресняков И.А., Третьяков Ю.Д. Химия твердого тела, М., 2006.
6. Ярославцев А.Б. Химия твердого тела. М.: Научный мир, 2009.

## **ПРИМЕР ЭКЗАМЕНАЦИОННОГО БИЛЕТА (ЗАДАНИЙ УСТНОГО ЭКЗАМЕНА)**

**Вопрос 1. Механизмы диффузии в твердых телах.**

**Вопрос 2. Собеседование по теме выбранного диссертационного исследования**