

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

Согласовано

Академический директор Аспирантской
школы по химии

**Программа вступительного испытания по специальности основной
образовательной программы высшего образования – программы подготовки
научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре
Химия твердого тела**

Научная специальность: 1.4.15 Химия твердого тела

Москва, 2022

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 Химия твердого тела 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)

Доклады на молодежных, международных или	не более 5 баллов
--	-------------------

внутренних конференциях	
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
Описание исследовательского проекта	не более 15 баллов
Рекомендательное письмо от потенциального научного руководителя с согласием на руководство в аспирантуре. Потенциальный научный руководитель должен быть согласован с академическим директором АШ по химии.	не более 15 баллов
Публикации в журналах, индексируемых Web of Science или Scopus	не более 15 баллов
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

Критерии оценивания	Баллы
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 Улофа. Условия образования твердых растворов внедрения. Вергарда 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, 2022.

ПРИМЕР ЭКЗАМЕНАЦИОННОГО БИЛЕТА (ЗАДАНИЙ УСТНОГО ЭКЗАМЕНА)

Вопрос 1. Механизмы диффузии в твердых телах.

Вопрос 2. Собеседование по теме выбранного диссертационного исследования