

Программа Профиля «Химия и науки о материалах»

В этом документе представлены темы, задания по которым необходимо будет решать в ходе 2 этапа Олимпиады Open Doors. Темы сгруппированы по областям и сопровождаются списком рекомендуемой литературы на русском и английском языках.

Базовый набор компетенций победителя Олимпиады по Профилю

Аналитическая деятельность.

Целенаправленный и объединенный задачами предметной области процесс сбора, обработки, хранения, систематизации и аналитической интерпретации информации для выработки качественно новых знаний и подготовки основы для принятия оптимальных решений.

1. Фундаментальные знания. Демонстрировать глубокое знание и понимание фундаментальных наук, а также знания в междисциплинарных областях профессиональной деятельности.

Знать	Уметь	Владеть
- основы химии, физики, математики - основы теории химической термодинамики, кристаллографии	- свободно ориентироваться в фундаментальной науке	навыками применения теоретических знаний при решении задач

2. Системный анализ. Умение анализировать материалы, процессы и системы в рамках широких междисциплинарных областей, а также умение ставить и решать нестандартные задачи с использованием соответствующих аналитических, вычислительных и экспериментальных методов, а также новых инновационных методов.

Знать	Уметь	Владеть
- перспективы и тенденции развития науки, современную проблематику, новейшие достижения в области науки и техники по профилю	- оперировать большими массивами научной информации, самостоятельно работать с различными ее источниками; - проводить анализ эффективности промежуточных решений, принимать решения об изменениях в плане проведения работ	- навыками интерпретации результатов анализа моделей с учетом возможностей и ограничений используемых методов

Научно-исследовательская деятельность

Деятельность, направленная на получение и применение новых знаний, в том числе фундаментальные научные исследования и прикладные научные исследования

1. Исследования. Способность находить и получать необходимые данные об объекте исследования, осуществлять поиск литературы, критически использовать базы данных и другие источники информации, осуществлять моделирование объектов и процессов, а также исследовать применение новейших технологий.

Знать	Уметь	Владеть
- перечень, основы и принципы современных методов исследования состава, структуры и свойств материалов	- пользоваться научными базами данных для поиска литературы; - обрабатывать экспериментальные результаты, включая анализ погрешности с помощью ЭВМ, правильно их интерпретировать и составлять отчет о проведенных исследованиях; - анализировать и содержательно интерпретировать полученные результаты	- навыками использования компьютерной техники для решения профессиональных задач; - навыками представления в графической и аналитической форме результатов проведенных расчетов и прогнозов

2. Планирование, организация и обработка результатов. Способен планировать и осуществлять экспериментальные исследования, анализировать и обрабатывать результаты, делать выводы.

Знать	Уметь	Владеть
- методы построения и анализа основных статистических показателей, обработки и анализа результатов наблюдений	- составлять план проведения расчетных и экспериментальных работ	- навыками работы с данными статистического анализа; - навыками выбора метода и условия проведения исследования

3. Коммуникативная языковая компетенция. Демонстрировать владение русским и иностранным языками для коммуникации в обществе в целом и профессиональной среде.

Знать	Уметь	Владеть
- русский язык на достаточном уровне;	- грамотно и логично излагать свои мысли и	- навыками делового письма

- английский язык на уровне не ниже B1	предложения в устной и письменной коммуникации с руководителем и членами команды	
--	--	--

Тематическое содержание Профиля

Тематический блок 1. Общая и неорганическая химия

1. Основные типы химической связи. Представление о гибридизации атомных орбиталей. Геометрия многоатомных молекул.
2. Кислотно-основное равновесие. Растворы сильных электролитов. Протолитическое равновесие в водных растворах слабых кислот и основания.
3. Гетерогенные равновесия в системе осадок - насыщенный раствор малорастворимого электролита.
4. Окислительно-восстановительные равновесия. Стандартные, реальные и формальные редокс-потенциалы. Направление и глубина протекания окислительно-восстановительной реакции.
5. Основы химии комплексных соединений. Строение и изомерия комплексных соединений. Равновесия в растворах комплексных соединений.
6. Химия элементов. Типичные валентности, степени окисления, образуемые соединения, их физические и химические свойства, применение в промышленности и народном хозяйстве.

Тематический блок 2. Физическая химия

1. Первый закон термодинамики и его применение. Внутренняя энергия, энтальпия. Теплоемкости. Внутренняя энергия системы. Теплота и работа. Равновесные и неравновесные процессы. Первый закон термодинамики и его применение. Термохимия. Теплоемкости. Закон Гесса, уравнение Кирхгофа.
2. Второй закон термодинамики. Энтропия. Термодинамические потенциалы и характеристические функции. Фундаментальное уравнение Гиббса. Уравнения Гиббса-Гельмгольца. Теорема Нерста, постулат Планка. Химический потенциал.
3. Химические равновесия. Закон действующих масс и константа равновесия. Уравнения изотермы, изобары и изохоры химической реакции.
4. Фазовые равновесия. Гетерогенные системы. Правило фаз Гиббса. Уравнение Клапейрона-Клаузиуса. Фазовые диаграммы. Свойства растворов.
5. Термодинамика электрохимических систем. Электрохимический потенциал и условия равновесия. ЭДС электрохимического элемента, электродный потенциал. Уравнение Нерста. Электропроводность растворов электролитов. Подвижность ионов и числа переноса. Теория Дебая – Хюккеля.
6. Поверхностные явления. Термодинамика поверхностных явлений. Адсорбция. Изотермы адсорбции Гиббса и Ленгмюра.

7. Химическая кинетика и катализ. Феноменологическая кинетика. Влияние температуры на скорость реакции. Уравнение Аррениуса, энергия активации, способы её определения.

8. Основы статистической термодинамики, строения вещества и квантовой химии.

Тематический блок 3. Органическая химия

1. Описание строения органических молекул: природа химической связи, распределение электронной плотности в молекуле в результате действия различных электронных эффектов заместителей, геометрические особенности молекулы органического вещества, включая все виды изомерии.

2. Описание основных классов органических соединений – алканов и циклоалканов, алкенов, диенов, алкинов, ароматических углеводородов, галогенпроизводных, спиртов, карбонильных соединений, карбоновых кислот, нитросоединений, гетероциклических ароматических соединений, а также гетерофункциональных соединений – гидроксикарбонильных, включая углеводы, гидрокси- и аминокислот и др. Основные способы синтеза всех упомянутых классов соединений и их химические трансформации.

3. Механизмы всех изучаемых реакций с учетом электронного и пространственного строения реагентов и субстратов.

4. Природные источники органических соединений, основные способы синтеза ключевых веществ, превращения этих соединений в другие, включая как лабораторные, так и промышленные методы.

5. Основные пути использования органических соединений для нужд человечества.

6. Основы взаимодействия органических веществ с живыми организмами, включая экологические аспекты органического химического производства.

7. Основы молекулярной спектроскопии (ИК, УФ, ЯМР), а также масс-спектрометрии и РСА.

Тематический блок 4. Химия твердого тела

1. Основные принципы строения периодических кристаллов. Операции и элементы симметрии, выбор элементарной ячейки, точечные и пространственные группы симметрии. Плотнейшие упаковки и координационные полиэдры при описании кристаллических структур. Полиморфизм.

2. Точечные дефекты в кристаллах. Взаимосвязь концентрации примесей и собственных точечных дефектов. Взаимосвязь концентрации точечных дефектов, нестехиометрии и состава атмосферы над образцом. Диффузия и ионный перенос.

3. Протяжённые дефекты: дислокации, дисклинации, дефекты упаковки. Связь нестехиометрии с наличием протяжённых дефектов. Взаимодействие точечных и протяжённых дефектов между собой.

4. Рост кристаллов. Кривая «растворение-кристаллизация». Понятие метастабильной зоны кристаллизации. Пересыщение. Молекулярно-кинетическая теория роста кристаллов. Модель Косселя-Странского. Закон Браве. Правило Кюри-Вульфа. Формы роста кристаллов. Эпитаксиальный рост кристаллов. Двойниковый рост кристаллов.

5. Свойства твёрдых веществ и их взаимосвязь со структурой объёма и поверхности, наличием, типом и концентрацией дефектов, размером и формой частиц.

6. Электронное строение твёрдых тел. Зонное строение. Металлы, полупроводники, диэлектрики. Одномерные и двумерные металлы и полупроводники. Электронная и дырочная проводимость.

Тематический блок 5. Науки о материалах

1. Кристаллическое строение, механические и физические свойства металлов, керамики и полимеров. Характеристики микроструктуры материалов. Влияние размера зерна на механические и физические свойства металлов и керамики. Соотношение Холла-Петча. Прочность и пластичность. Трещиностойкость керамики.

2. Композиционные материалы: структура и механические свойства. Механизмы упрочнения металлов, сочетание различных механизмов упрочнения в композитах с металлическими матрицами. Применение правила смесей для расчётов механических и физических характеристик композитов.

3. Твёрдые растворы: виды и структура. Правило Вегарда для твёрдых растворов. Сплавы и интерметаллиды. Фазовые переходы.

4. Электрохимические источники тока. Классификация материалов по электропроводности. Температурная зависимость электропроводности металлов, полупроводников, ионных и смешанных проводников. Особенности ионных проводников. Проводимость гетерогенных систем. Методы измерения проводимости твёрдых электролитов. Электрохимический импеданс. Метод импедансной спектроскопии.

5. Диаграмма деформирования (σ – ϵ) для твёрдых тел. Пределы текучести, упругости и прочности.

6. Усталость материалов. Предел усталости. Циклы переменных напряжений и их характеристики. Кривая усталости.

7. Физические процессы при механической обработке твёрдых тел. Упругая и пластическая деформация. Разрушение. Локальное повышение температуры и давления. Статическая электризация. Аморфизация.

Список рекомендованных источников

Тематический блок 1. Общая и неорганическая химия

1. Ахметов Н.С. Общая и неорганическая химия. М.: 2004
2. Под ред. В.А. Попков, А.В. Бабкова. Глинка Н.Л. Общая химия. // Под ред. В.А. Попкова, А.В. Бабкова. М.: 2010
3. Fundamentals of terminology, reading, interpreting and solving problems in chemistry in English. General Chemistry. Advanced Level. Textbook / A. Fetisova, A. Svistunov, T. Litvinova; I.M. Sechenov First Moscow State Medical University. - Moscow, 2016.
4. Fundamentals of terminology, reading, interpreting and solving problems in chemistry in English. General Chemistry. Advanced Level. Workbook / A. Fetisova, A. Svistunov, T. Litvinova; I.M. Sechenov First Moscow State Medical University. - Moscow, 2016.

5. Fundamentals of terminology, reading, interpreting and solving problems in chemistry in English. General Chemistry. Advanced Level. Test book / A. Fetisova, A. Svistunov, T. Litvinova; I.M. Sechenov First Moscow State Medical University. - Moscow, 2016.

6. Garner W.E. Chemistry of the solid state. Butterworths Scientific Publications, 1955.

7. General Chemistry: Principles and Modern Applications / Ralph H. Petrucci, F. Geoffrey Herring, Jeffrey D. Madura, Carey Bissonette. — 11th Edition. — Toronto : Pearson, 2017.; 28 см. — ISBN 978-0-13-293128-1 .

8. Hoffmann R. Solids and surfaces: a chemist's view of bonding in extended structures. 1st edition. Wiley-VCH, 1989.

9. Lefrou C., Fabry P., Poignet J. C. Electrochemistry: the basics, with examples. – Springer Science & Business Media, 2012

10. N.N. Greenwood and A. Earnshaw. Chemistry of the elements. Butterworth-Heinemann, 1997.

Тематический блок 2. Физическая химия

1. Жуховицкий А.А., Шварцман Л.А.: Физическая химия. 4-е изд., 1987 г.

2. Вишняков А.В., Кизим Н.Ф.: Физическая химия, 2012 г.

3. Бокштейн Б.С., Менделев М.И., Похвистнев Ю.В.: Физическая химия: термодинамика и кинетика, 2012 г.

4. Donald A. McQuarrie, John D. Simon: Physical Chemistry: A Molecular Approach. 1st edition, 1997.

5. Peter Atkins, Julio de Paula, James Keeler: Atkins' Physical Chemistry: Volume 1: Thermodynamics and Kinetics 11th Edition, 2018.

6. Ira N. Levine: Physical Chemistry. 6th Edition, 2008.

7. Boris S. Bokstein, Mikhail I. Mendeleev, David J. Srolovitz: Thermodynamics and Kinetics in Materials Science: A Short Course, 2008.

8. David W. Ball: Physical Chemistry 2nd Edition, 2014.

Тематический блок 3. Органическая химия

1. Clayden, Greeves, Warren "Organic Chemistry", Oxford University Press, 2000.

2. Desiraju G.R. Organic solid state chemistry. Elsevier Science Ltd., 1987.

3. Hart H. "Organic Chemistry – A Short Course". Hart H., Habad C.M., Craine L.E., Hart D.J. – 13th edition. – Cengage Learning, 2011.

4. Smith, Michael B.; March, Jerry (2007), Advanced Organic Chemistry: Reactions, Mechanisms, and Structure (6th ed.), New York: Wiley-Interscience, ISBN 978-0-471-72091-1

5. Органическая химия. Учебник. Под ред. Н.А. Тюкавкиной. Авторский коллектив: Белобородов В.Л., Тюкавкина Н.А., Зурабян С.Э., Селиванова И.А., Артемьева Н.Н., Лузин А.П.- М.: ГЭОТАР-Медиа. – 2015. 560 с.

6. Остерман Л.А. Методы исследования белков и нуклеиновых кислот. М.: МЦНМО, 2002. 536 с.

7. Степанов В.М. Структура и функция белков –М.: Высшая школа, 1996.-335 с.

8. Органическая химия: тестовые задания. А.П. Лузин, И.А. Селиванова, А.М. Саватеев и др. Электронное издание. Учебно-методическое пособие. М.: РС ФГУП НТЦ «Информрегистр», № 35046, 24.02.2014.

Тематический блок 4. Химия твердого тела

1. Уманский Я.С., Скаков Ю.А., Иванов А.Н., Расторгуев Л.Н. Кристаллография, рентгенография и электронная микроскопия. М.: Metallurgia, 1982
2. Егоров-Тисменко Ю.К. Кристаллография и кристаллохимия. М.: КДУ, 2005
3. Розин К.М. Практическая кристаллография. М.: МИСиС, 2005
4. Уманский Я.С., Скаков Ю.А. Физика металлов. Атомное строение металлов и сплавов. Учебник для вузов. М.: Атомиздат, 1978
5. Лившиц Б.Г. Физические свойства металлов и сплавов. М.: Metallurgia, 1980
6. Новиков И.И. Дефекты кристаллического строения металлов. М.: Metallurgia, 1983
7. John M. Cowley. Diffraction physics. 1975
8. Willmott P. An introduction to synchrotron radiation: techniques and applications. – John Wiley & Sons, 2019
9. By Marc De Graef and Michael E. McHenry. Structure of Materials. An Introduction to Crystallography, Diffraction and Symmetry. Cambridge University Press, 2012
10. Hahn Th. (ed.) International tables for crystallography. Vol. A. Space-group symmetry. Published for the International union of crystallography, 2005
11. Appendix 1 Crystal Structure Descriptions, 2009
12. Pu Zhang A. To. Point group symmetry and deformation-induced symmetry breaking of superlattice materials. Published 2015

Тематический блок 5. Науки о материалах

1. Dennis W. Readey. Kinetics in Materials Science and Engineering. 2017
2. Richard M. Martin. Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods, 2015
3. T. W. Clyne D. Hull. An Introduction to Composite Materials, 2019
4. William D. Callister Jr., David G. Rethwisch, Materials Science and Engineering ,2014
5. Subir Kumar Bose and Sanat Kumar Roy , Principles of Metallurgical Thermodynamics, 2014
6. Stephen J. Pennycook , Peter D. Nellist. Scanning Transmission Electron Microscopy: Imaging and Analysis, 2011
7. Ryan O'Hayre . Materials Kinetics Fundamentals. 2015
8. Emmanuel Craig. Nanomaterials: An Introduction to Properties, Synthesis and Applications. 2019
9. Zainul Huda. Metallurgy for Physicists and Engineers: Fundamentals, Applications, and Calculations. 2020
10. Satya Bir Singh, Alexander V. Vakhrushev , A. K. Haghi. Materials Physics and Chemistry: Applied Mathematics and Chemo-Mechanical. 2021

11. Noam Eliaz, Eliezer Gileadi. Physical Electrochemistry: Fundamentals, Techniques, and Applications 2018

Список рекомендованных онлайн-курсов

Тематический блок 1. Общая и неорганическая химия

1. Fundamentals of General Chemistry <https://stepik.org/course/4859/promo>
2. Fundamentals of General Chemistry <https://sechenov.online/course?id=203>
3. Advanced chemistry <https://www.coursera.org/learn/advanced-chemistry>
4. Неорганическая химия: Введение в химию элементов <https://www.coursera.org/learn/neorganicheskaya-khimiya/home/welcome>

Тематический блок 2. Физическая химия

1. Patrick J. O'Malley, Michael W. Anderson, Jonathan Agger: Introduction to Physical Chemistry. <https://www.coursera.org/learn/physical-chemistry#instructors>.
2. Christopher J. Cramer: Statistical Molecular Thermodynamics. <https://www.coursera.org/learn/statistical-thermodynamics>.
3. Rasul Abdullaev, Leonid Braginsky, Arthur Pogosov: Basics of thermodynamics. <https://www.coursera.org/learn/thermo-dynamics>.
4. Rafael Jaramillo, Jessica Sandland, John Harrold: Thermodynamics of Materials. <https://www.edx.org/course/thermodynamics-of-materials-2>.
5. Alberto Salleo: Thermodynamics and Phase Equilibria. <https://www.edx.org/course/thermodynamics-and-phase-equilibria>.
6. Физическая химия <https://www.coursera.org/learn/fizicheskaya-khimiya/home/welcome>
7. Физическая химия. Кинетика <https://openedu.ru/course/misis/CHKIN/>
8. Физическая химия. Термодинамика <https://openedu.ru/course/misis/CHTHER/>
9. Физическая химия дисперсных систем <https://stepik.org/course/Физическая-химия-дисперсных-систем-51631>

Тематический блок 3. Органическая химия

1. Organic chemistry - <https://sechenov.online/course?id=350>
2. Органическая химия - [Органическая химия | Coursera](#)
3. Organic solar cells - <https://ru.coursera.org/learn/solar-cell>
4. Organic Chemistry - [New Organic Chemistry Playlist - YouTube](#)
5. Crash Course Organic Chemistry - [Crash Course Organic Chemistry Preview - YouTube](#)
6. Alkanes & Alkenes | Organic Chemistry | FuseSchool - [Alkanes & Alkenes | Organic Chemistry | FuseSchool - YouTube](#)

Тематический блок 4. Химия твердого тела

1. Transmission electron microscopy for materials science <https://www.coursera.org/learn/microscopy>

2. Кристаллография в материаловедении <https://www.coursera.org/learn/physical-crystallography>
3. Materials Science and Engineering: Crystallography <https://www.udemy.com/course/crystallography> (платный)
4. Fundamentals of Materials Science <https://www.coursera.org/learn/fundamentals-of-materials-science>
5. Microscopy: methods of visualisation in micro- and nano-scale <https://stepik.org/course/64582/promo>
6. Solid State – Chemistry. Crystallography <https://www.udemy.com/course/solid-state-chemistry/>

Тематический блок 5. Науки о материалах

1. Semiconductor Manufacturing <https://ocw.mit.edu/courses/electrical-engineering-and-computer-science/6-780-semiconductor-manufacturing-spring-2003/syllabus/>
2. Electrical, Optical & Magnetic Materials and Devices <https://ocw.mit.edu/courses/materials-science-and-engineering/3-15-electrical-optical-magnetic-materials-and-devices-fall-2006/>
3. Electronic and Mechanical Properties of Materials <https://ocw.mit.edu/courses/materials-science-and-engineering/3-225-electronic-and-mechanical-properties-of-materials-fall-2007/>
4. Physics for Solid-State Applications <https://ocw.mit.edu/courses/electrical-engineering-and-computer-science/6-730-physics-for-solid-state-applications-spring-2003/>
5. Introduction to Nanoelectronics <https://ocw.mit.edu/courses/electrical-engineering-and-computer-science/6-701-introduction-to-nanoelectronics-spring-2010/>
6. Submicrometer and Nanometer Technology <https://ocw.mit.edu/courses/electrical-engineering-and-computer-science/6-781j-submicrometer-and-nanometer-technology-spring-2006/>
7. Nanotechnology: A Maker's Course <https://www.coursera.org/learn/nanotechnology>