



Докторска програма Химия на твърдото тяло

КОНСПЕКТ

за кандидат-докторантски изпит
в рамките на проект ИНТЕРДОК BG05SFPR001-3.004-0004-C01

2024/2025 учебна година

1. Основни понятия в кристалографията и кристалохимията. Симетрия на кристалните тела. Елементи и операции на симетрия. Точкова симетрия. Символика на Шьонфлис. Пространствена симетрия. Елементарни клетки и кристални системи (сингонии). Видове кристални решетки, пространствени решетки на Браве. Равнини и направления в кристалната решетка. Милерови индекси и индекси на Браве.
2. По-важни типове структури. Кристалохимия на химичните елементи и на някои химични съединения. Кристални структури на интерметалните съединения. Връзка между структура и свойства на твърдите тела.
3. Дифракционни методи за определяне на структурата на твърдите тела (рентгенова, неутронна и електронна дифракции). Сканираща и трансмисионна електронна микроскопия.
4. Структурни нарушения. Точкови дефекти: ваканции, дефекти на Френкел и на Шотки. Равновесна концентрация на точковите дефекти. Дислокации. Линейна и винтова дислокация. Енергия на дислокациите. Двумерни дефекти: дефекти на опаковка, междуфазови граници, граници между кристалите, двойникови граници. Влияние на дефектите върху физичните и химичните свойства на кристалите.
5. Дифузия в твърда фаза. Закони на Фик. Механизми на дифузия в твърди тела. Дифузия в твърди разтвори на внедряване и на заместване. Взаимна (химична) дифузия. Термодинамичен анализ на химичния дифузионен коефициент. Реактивна дифузия. Зърногранична, обемна и повърхностна дифузия. Концентрационна зависимост на дифузионния коефициент – метод на Матано-Болцман.
6. Термодинамика на образуване и растеж на нови фази в кондензирани системи. Кинетика на образуването и растежа на нови фази. Скорост на зародишообразуване. Уравнение на Томсон-Гибс. Теория на Фолмер за скоростта на зародишообразуване. Образуване на зародиши от преохладена стопилка.
7. Вискозитет. Температурна зависимост на вискозитета. Уравнение на Фогел-Фулчер-Таман.
8. Кинетика на образуване на зародиши от твърда фаза. Хетерогенно зародишообразуване.
9. Линейна скорост на кристален растеж. Нормален механизъм на растеж. Послоен растеж чрез образуване на двумерни зародиши. Винтово-дислокационен механизъм на послойния растеж.
10. Кинетика на сумарно превръщане. Уравнение на Джонсон-Мел-Колмогоров-Аврами.
11. Кинетика на сумарна кристализация при наличие на готови зародиши и при образуване на нови зародиши. Закалка. Получаване на метастабилни и нестабилни



- фази чрез закалка. Аморфни и нанокристални твърди вещества получени чрез бърза закалка.
12. Твърди разтвори. Разтвори на внедряване и на заместване. Условия за неограничена разтворимост в твърдо състояние. Конфигурационна ентропия на смесване. Идеални разтвори. Регулярни разтвори. Активност и активитетен коефициент.
 13. Термодинамика и физикохимичен анализ на фази с променлив състав. Термодинамично равновесие в хетерогенни многокомпонентни системи. Равновесни диаграми на състоянието и методи за построяването им. Фазови преходи от първи и втори род.
 14. Диаграми на състоянието при неограничена разтворимост в течно и в твърдо състояние. Диаграми от евтектичен и перитектичен тип. Диаграми на състоянието при образуване на междинни фази (съединения). Фази на Лавес и на Юм Родери.
 15. Квантово-химични представи за строежа на кристалите. Динамика на кристалната решетка. Модел на свободния електронен газ. Енергетични нива и плътност на състоянията. Зонна структура.
 16. Механични свойства на материалите. Методи за изследване на механичните свойства на материалите – макро- и микротвърдост, пластичност, “ σ - ϵ ” диаграми.
 17. Магнитни свойства на твърдите тела. Видове магнетизъм: диа-, пара-, феро-, антиферо-, феримагнетизъм. Връзка между структура и магнитни свойства на твърдите вещества.
 18. Оптични свойства на твърдите тела. Абсорбция и емисия на светлината. Спектри. Вършен фотоэффект. Екситони. Луминесценция.
 19. Твърдофазна екстракция. Основни принципи и методи за твърдофазна екстракция.
 20. Приложения на мембрани с полимерно включване (полимерно инклузивани мембрани) за транспортиране на метални йони и токсични аниони от екологични и промишлени отпадъчни води.

Библиография:

1. И. Костов, Кристалография, Наука и изкуство, София.
2. И. И. Георгиева, “Физикохимия на твърдото състояние”, ХТИ.
3. С. Будуров, Т. Спасов “Увод в химията на твърдото тяло”, Университетско издателство, Благоевград, 1997.
4. Ръководство по неорганична химична технология, I част, Изд. Софийски университет, София 1988.
5. L. Smart, E. Moore, Solid state chemistry: An introduction, 5th edition, CRC Press, 2021
6. P. M. Woodward, P. Karen, J. S. O. Evans, T. Vogt, Solid State Materials Chemistry, Cambridge University Press, 2021.
7. A. Kumar Jha, Solid-State Chemistry A Modern Approach, CRC Press, 2023.
8. D. Sadoway, Introduction to Solid State Chemistry, LibreTexts, 2023. <https://batch.libretexts.org/print/Letter/Finished/chem-408239/Full.pdf>
9. J. E. House, Introduction to Solid State Chemistry, 2024 Elsevier Inc., <https://doi.org/10.1016/C2022-0-02480-6>
10. W. D. Callister, Jr., D. G. Rethwisch, Fundamentals of Materials Science and Engineering: An Integrated Approach, 6th Edition, WileyPLUS, Jan 2021.
11. А. Вест “Химия твърдого тела. Теория и приложение”, изд. Мир, Москва, 1988.
12. P.A. Cox “The Electronic Structure and Chemistry of Solids”, Oxford Univ. Press, 1987.
13. Современная кристалография – том 1 и 2, под редакцията на Б. Вайнштейн, А. Чернов и Л. Шувалов, Наука, Москва, 1979.



14. И. Костов, Г. Киров, Ц. Станимирова, Кристалография, Университетско издателство „св. Кл. Охридски“, 2010 г.
15. Д. М. Василев, Физическая кристалография, Металургия, Москва, 1981.
16. Ст. Будуров, Т. Спасов, Увод в химията на твърдото тяло, Унив. Изд. “Неофит Рилски”, Благоевград, 1997.
17. В. А. Риид, Дислокации в кристаллах, Москва, 1957.
18. М. Борисов, К. Маринова “Увод във физиката на твърдото тяло”, изд. Наука и изкуство, София, 1977.
19. Ch. Kittel, “Introduction to solid state physics” Eight Edition, John Wiley & Sons, Inc. 2005.
20. Д. Блейкмор, Физика на твърдото състояние, Наука и изкуство, София, 1983.
21. У. Харрисон, Електронная структура и свойства твердых тел, т. 1 и 2, Мир, Москва, 1983.
22. С. N. R. Rao, J. Gopalakrishnan, New Directions in Solid State Chemistry, 2nd ed., Cambridge University Press, Cambridge, 1997.
23. F. Hoffman, Solid-State Chemistry, Walter de Gruyter GmbH & Co KG, 2023
24. Solid-Phase Extraction, Edited by Colin F. Poole, 2020, DOI <https://doi.org/10.1016/C2018-0-00617-9>.
25. Solid-Phase Extraction: Principles and Practice, E. Michael Thurman, M. S. Mills, ISBN: 978-0-471-61422-7, 1998.

Дата: 09. 01. 2025 г.

Съставил: проф. Тони Спасов

Одобрена на катедрен съвет на катедра ПНХ