

PhD Qualifying Exam Program in Material Science

Version Mar 3, 2020

The Qualifying Exam is conducted by PhD Committee in Material Science & Engineering in the form of research presentation (15 min) followed by the questions addressing not only particular aspects of the work presented, but also their placement within the broad concepts outlined below.

Структура материалов

Structure of materials

Общие принципы квантово-механического описания молекулярных систем. Стационарное уравнение Шредингера. Приближение Борна-Оппенгеймера. Электронное уравнение Шредингера. Поверхность потенциальной энергии. Равновесные конфигурации, переходные состояния, диссоциационные пределы. Силовые поля. Симметрия молекул.

Principles of molecular quantum mechanics. Stationary Schroedinger equation. Born-Oppenheimer approximation. Electronic Schroedinger equation. Potential energy surface. Equilibrium configurations, transition states, dissociation limits. Force fields. Molecular symmetry.

Движение ядер. Нормальные колебания. Вращение молекул. Методы классической механики ядер. Молекулярная механика. Молекулярная динамика.

Nuclear motions. Normal vibrational modes. Molecular rotations. Classical methods for nuclear motions. Molecular mechanics. Molecular dynamics.

Электронная задача. Вычислительная квантовая химия. Полуэмпирические методы. Метод Хартри-Фока. Корреляция электпронов. Теория функционала плотности. Распространенные квановохимические подходы. Возбужденные электронные состояния.

Electronic problem. Computational quantum chemistry. Semiempirical methods. Hartree-Fock method. Electron correlation. Density functional theory. Common computational methods of quantum chemistry. Excited electronic states.

Кристаллы, квазикристаллы, стёкла, жидкости. Упорядоченность и разупорядоченность. Структура и симметрия кристаллов. Электронная структура кристаллов. Зонная теория, теорема Блоха. Закон дисперсии. Поверхность Ферми. Плотность состояний. Металлы, диэлектрики и полупроводники. Колебания решетки. Вычислительная химия кристаллов, поверхностей, интерфейсов.

Crystals, quasicrystals, glasses, liquids. Order and disorder. Crystal structures and symmetry. Electronic crystal structure. Band theory. Bloch theorem. Dispersion relation. Fermi surface. Density of states. Metals, dielectrics, semiconductors. Lattice vibrations. Computational quantum chemistry of crystals, surfaces and interfaces.

Дифракционные методы изучения материалов. Основы теории дифракции на кристаллах. Изучение структуры монокристаллов и порошков методами рентгеновской и нейтронной дифракции. Получение локальной информации о структуре с помощью методов малоуглового рассеяния, анализа парной функции распределения, резонансного рассеяния. Изучение материалов *in situ* и *in operando*. Дифракционные исследования с синхротронными и нейтронными источниками.

Diffraction methods in material studies. Basics of diffraction on crystals. Crystal structure analysis with X-ray single crystal and powder diffraction, neutron diffraction. Extracting local information from small angle scattering techniques, pair distribution function analysis, resonant scattering. *In situ* and *in operando* studies. Diffraction studies with synchrotron and neutron sources.

Электронная микроскопия. Основы электронной оптики и методов получения изображений. Изучение морфологии с помощью сканирующей электронной микроскопии. Методы просвечивающей электронной микроскопии: дифракция электронов, микроскопия высокого разрешения и сканирование изображений. Электронная томография в реальном и обратном пространствах.

Electron microscopy. Basics of electron optics and imaging techniques. Morphology analysis with scanning electron microscopy. Transmission electron microscopy (TEM) techniques: electron diffraction, high resolution TEM and scanning TEM imaging. Electron tomography in real and reciprocal spaces.

Спектроскопические методы. Молекулярные спектры. ИК-спектроскопия, оптическая и УФ спектроскопия. Рентгено-фотоэлектронная спектроскопия. Магнитно-резонансные методы.

Spectroscopic methods. Molecular spectroscopy. IR, optical and UV spectroscopy. X-ray photoelectron spectroscopy. Magnetic resonance.

Химическая термодинамика

Chemical Thermodynamics

Основные понятия термодинамики: изолированные и открытые системы, равновесные и неравновесные системы, термодинамические переменные, температура.

Basic concepts of thermodynamics: Isolated and open systems, equilibrium and non-equilibrium systems, thermodynamic variables, temperature.

Первый закон термодинамики. Теплота, работа, внутренняя энергия, энтальпия, теплоемкость. Закон Гесса. Второй закон термодинамики. Энтропия и её изменения в обратимых и необратимых процессах.

First law of thermodynamics. Heat, work, internal energy, enthalpy, heat capacity. Hess's law. Second law of thermodynamics. Entropy and entropy changes in equilibrium and non-equilibrium processes.

Фундаментальные уравнения термодинамики (уравнения Гиббса). Энергия Гиббса, энергия Гельмгольца. Условия равновесия и самопроизвольные процессы. Уравнение Гиббса – Гельмгольца. Работа и теплота химических процессов. Химические потенциалы.

Fundamental thermodynamic relations (Gibbs equations). Gibbs and Helmholtz energies. Equilibrium conditions and spontaneous processes. Gibbs-Helmholtz equation. Work and heat of chemical processes. Chemical potentials.

Химическое равновесие. Закон действующих масс. Различные виды констант равновесия и связь между ними.

Chemical equilibrium. Law of mass action. Different types of equilibrium constants and relations between them.

Микро- и макросостояния химических систем. Распределение Максвелла–Больцмана. Статистические средние значения макроскопических величин. Ансамбли Гиббса. Микроканоническое и каноническое распределения. Расчет числа состояний в квазиклассическом приближении.

Microstates and macrostates of a chemical system. Maxwell-Boltzmann distribution. Statistical means of microscopic variables. Gibbs ensembles. Microcanonical and canonical distributions. Quasiclassical determination of the number of states.

Каноническое распределение Гиббса. Сумма по состояниям как статистическая характеристическая функция. Статистические выражения для основных термодинамических функций. Молекулярная сумма по состояниям и сумма по состояниям макроскопической системы. Поступательная, вращательная, электронная и колебательная суммы по состояниям. Статистический расчет энтропии.

Canonical Gibbs measure. Partition function as the statistical characteristic function. Statistical definitions of the main thermodynamic functions. Molecular partition function, partition function of a macroscopic system. Translational, rotational, vibrational and electronic partition functions. Statistical definition of entropy.

Распределения Бозе–Эйнштейна и Ферми–Дирака. Вырожденный идеальный газ. Электроны в металлах. Статистическая теория Эйнштейна идеального кристалла. Теория Дебая. Точечные дефекты кристаллических решеток. Равновесные и неравновесные дефекты.

Bose-Einstein and Fermi-Dirac statistics. Degenerated ideal gas. Electrons in metals. Statistical Einstein theory for ideal crystals. Debye theory. Point defects in crystals. Equilibrium and non-equilibrium defects.

Основные положения термодинамики неравновесных процессов. Локальное равновесие. Флуктуации. Функция диссипации.

Basic concepts of non-equilibrium thermodynamics. Local equilibrium. Fluctuations. Dissipation function.

Понятия компонента, фазы, степени свободы. Правило фаз Гиббса. Однокомпонентные системы. Диаграммы состояния. Фазовые переходы. Двухкомпонентные системы. Диаграммы состояния двухкомпонентных систем.

Concepts of component, phase and degree of freedom. Gibbs phase rule. Pure (one-component) systems. Phase diagrams. Phase transitions. Two-component systems and their phase diagrams.

Адсорбция и поверхностные явления. Структура поверхности и пористость адсорбента. Локализованная и делокализованная адсорбция. Мономолекулярная и полимолекулярная

адсорбция. Адсорбционное равновесие. Изотермы и изобары адсорбции. Константа адсорбционного равновесия.

Adsorption and surface phenomena. Structure of the surface, adsorbent' porosity. Localized and delocalized adsorption. Mono- and multilayer adsorption. Adsorption equilibrium. Adsorption isotherms and isobars. Adsorption equilibrium constant.

Кинетика

Chemical kinetics

Кинетическая теория газов. Распределение Максвелла. Транспортные свойства. Диффузия. Теплопроводность. Ионная подвижность. Электропроводность.

Gas kinetic theory. Maxwell distribution. Transport properties. Diffusion. Thermal conductivity. Ion mobility. Electric conductivity.

Основные понятия химической кинетики. Простые и сложные реакции, молекулярность и скорость простой реакции. Кинетические кривые. Кинетические уравнения. Константа скорости и порядок реакции.

Basic concepts of chemical kinetics. Elementary and complex reactions, molecularity and rate of elementary reaction. Kinetic curves. Kinetic equations. Reaction rate constant and order.

Зависимость скорости реакции от температуры. Уравнение Аррениуса. Энергия активации. Теория переходного состояния. Путь реакции. Статистический расчет константы скорости.

Reaction rate dependence on temperature. Arrhenius equation. Activation energy. Transition state theory. Reaction path. Statistical reaction rate theory.

Катализ

Catalysis

Гомогенный катализ. Кислотно-основной катализ. Кинетика и механизм реакций специфического кислотного катализа. Функции кислотности Гаммета. Кинетика и механизм реакций общего кислотного катализа.

Homogeneous catalysis. Acid-base catalysis. Kinetics and mechanism of specific acid-base catalytic reactions. Hammett acidity function. Kinetics and mechanism of general acid-base catalytic reactions.

Гетерогенный катализ. Определение скорости гетерогенной каталитической реакции. Селективность катализаторов. Роль адсорбции в кинетике гетерогенных каталитических реакций. Неоднородность поверхности катализаторов, нанесенные катализаторы. Энергия активации гетерогенных каталитических реакций.

Heterogeneous catalysis. Rate of heterogeneous catalytic reaction. Selectivity of catalysts. Adsorption in heterogeneous catalytic reaction kinetics. Surface heterogeneity of catalysts, supported catalysts. Activation energy of heterogeneous catalytic reactions.

Электрохимия и материалы для хранения и преобразования энергии

Electrochemistry and materials for energy storage and conversion

Электрохимические ячейки, анод, катод, фарадеевские и не-фарадеевские процессы. Закон Фарадея, двойной слой, емкость, ток, потенциал. Термодинамическая обратимость, свободная энергия Гиббса, ЭДС ячейки, полуреакции и потенциалы восстановления, формальные потенциалы, электроды сравнения, электрохимические потенциалы, проводимость, электропроводность.

Electrochemical cells, anode, cathode. Faradaic and non-Faradaic processes. Faraday's law, double layer, capacitance, current, potential. Thermodynamic reversibility, reversibility and Gibbs free energy, cell EMF, half-reactions and reduction potentials, formal potentials, reference electrodes, electrochemical potentials, conductivity

Гомогенная и гетерогенная электрохимическая кинетика, уравнение Нернста, кинетика Батлера-Фольмера, стандартная константа скорости, ток-перенапряжение, уравнение Тафеля, плотность тока обмена.

Homogenous and heterogeneous electrochemical kinetics, Nernst equation, Butler-Volmer kinetics, standard rate constant, current-overpotential, Tafel equation, exchange current density.

Вольтамперометрия с линейной разверткой потенциала, циклическая вольтамперометрия, квадратно-волновая вольтамперометрия, хроноамперометрия, хронопотенциометрия, ультрамикроразъемные электроды.

Linear sweep voltammetry, cyclic voltammetry, square wave voltammetry, chronoamperometry, chronopotentiometry, ultramicroelectrodes.

Двойные электрические слои, теория Гуи-Чепмена, модификация Стерна, адсорбция на поверхности, потенциал нулевого заряда, изотермы адсорбции.

Electrochemical double layers, Gouy-Chapman theory, Stern modification, surface adsorption, potential of zero charge, adsorption isotherms.

Материалы для электрохимических источников тока и устройств хранения энергии. Металл-ионные аккумуляторы и суперконденсаторы.

Materials for electrochemical energy sources and storage devices. Metal-ion batteries and supercapacitors.

Полупроводники, металлы и сверхпроводники. Молекулярный дизайн органических полупроводников. Дизайн сопряженных полимеров. Молекулярная и супрамолекулярная структура органических полупроводников.

Semiconductors, metals and superconductors. Molecular design of organic semiconductors. Design of conjugated polymers. Molecular and supramolecular structures of organic semiconductors.

Транспорт зарядов в супрамолекулярных структурах. Экспериментальные методы исследования зарядово-транспортных свойств органических полупроводников: преимущества и недостатки.

Charge transport in supramolecular assemblies. Experimental techniques for investigation of charge transport properties of organic semiconductors: advantages and disadvantages.

Электрохромные устройства и дисплеи. Органические светоизлучающие диоды и дисплеи на их основе.

Electrochromic devices and displays. Organic light-emitting diodes and OLED displays.

Органические полевые транзисторы. Печатная электроника. Газовые и жидкостные сенсоры на основе органических полевых транзисторов. Электронный нос и электронный язык.

Organic field-effect transistors. Printable electronics. Organic field-effect transistor-based sensors for gaseous and liquid analytes. Electronic nose and electronic tongue.

Устройства памяти на основе органических материалов.

Memory devices based on organic materials.

Органическая фотовольтаика. Солнечные батареи на основе самоупорядочивающихся молекулярных систем. Органические солнечные батареи.

Organic photovoltaics. Solar cells based on self-assembling molecular architectures. Organic solar cells.

Гибридная фотовольтаика: «перовскитные» солнечные батареи и устройства на основе нанокристаллов неорганических полупроводников, стабилизированных органическими лигандами (квантовые точки)

Hybrid photovoltaics: “perovskite” solar cells and devices based on inorganic nanocrystals stabilized with organic ligands (quantum dots).

Литература

Literature

R. J. Silbey, R. A. Alberty, M. G. Bawendi, *Physical Chemistry*, 4th Edition, Wiley 2004 (ISBN 10: 047121504X ISBN 13: 9780471215042)

P. Atkins, J. de Paula, *Physical Chemistry*, 9th Edition, W. H. Freeman, 2009 (ISBN 10: 1429218126 ISBN 13: 9781429218122) or later editions as “Atkins’ Physical Chemistry”.

C. Borgnakke, R. E. Sonntag, *Fundamentals of Thermodynamics*, 8th Edition, (ISBN-13: 978-1118131992; ISBN-10: 1118131991).

W. A. Harrison, *Electronic Structure and the Properties of Solids*, Dover, 1989 (ISBN 10: 0486660214 ISBN 13: 9780486660219).

I. Chorkendorff, J. W. Niemantsverdriet, *Concepts of Modern Catalysis and Kinetics*, Wiley-VCH, 2003 (ISBN: 9783527305742, ISBN: 9783527602650).

A. J. Bard, L. R. Faulkner, *Electrochemical Methods: Fundamentals and Applications*, 2nd Edition, Wiley, 2001 (ISBN: 978-0-471-04372-9).

Fundamentals of Crystallography, C. Giacovazzo (Ed.), 3rd Edition, Oxford University Press 2011 (ISBN: 9780199573653).

V. Pecharsky, P. Zavalij, *Fundamentals of Powder Diffraction and Structural Characterization of Materials*, Springer Science 2003 (ISBN 0-387-24147-7).

E.J. Mittemeijer, *Diffraction Analysis of the Microstructure of Materials*, Springer Series in Materials Science, Volume 68, 2004 (ISBN 3-540-40519-4).

M. De Graef, M. McHenry, *Structure of Materials*, Cambridge University Press 2007. ISBN 978-0-521-651-51-6).

M. Ladd, R. Palmer, *Structure Determination by X-ray Crystallography*, Springer Science 2013. (ISBN 78-1-4614-3956-1).

S. Van Smaalen, *Incommensurate Crystallography*, Oxford University Press, 2007 (ISBN 978-0-19-857082-0).

W. Tress, *Organic Solar Cells: Theory, Experiment, and Device Simulation*, Springer, 2014 (ISBN 978-3-319-10097-5).

Advanced Concepts in Photovoltaics, A. J. Nozik, G. Conibeer and M. C. Beard (Eds.), Royal Society of Chemistry, Cambridge, 2014 (ISBN 1849735913).

Organic Electronics. I: Materials, Manufacturing and Applications, H. Klauk (Ed.), Wiley-VCH, 2006 (ISBN 9783527312641).

Organic Electronics. II: More Materials and Applications, H. Klauk (Ed.), Wiley-VCH, 2012 (ISBN 978-3-527-32647-1).

Lithium Batteries: Advanced Technologies and Applications, B. Scrosati, K. M. Abraham, W. A. van Schalkwijk and J. Hassoun (Eds.), Wiley, 2013 (ISBN 978-1-118-18365-6).

B. G. Streetman, S. K. Banerjee Solid State Electronic Devices, 7th Edition, Pearson Prentice Hall, 2016 (ISBN-13: 978-0133356038, ISBN-10: 0133356035).

L. Freris, D. Infield, Renewable Energy in Power Systems, Wiley, 2008 (ISBN 978-0-470-01749-4).