

## *Вопросы к экзамену по ХТТ (2014)*

*I. Перечень вопросов, уверенные ответы на которые необходимы для получения положительной оценки.*

1. **Закрытые и открытые операции симметрии. Основные виды. Матрицы преобразования координат. Графические и буквенно-цифровые обозначения. Сочетание операций симметрии друг с другом.**
2. **Пространственные группы симметрии. Определение. Распределение по кристаллическим системам. Обозначения. Информация в Международных таблицах. Кристаллографический класс. Определение. Примеры.**
3. **Трансляционная симметрия. Группа трансляций. Решетка Бравэ. Элементарная ячейка. Число формульных единиц в ячейке. Правильные системы точек. Частные и общие позиции. Симметрия позиции. Кратность позиции.**
4. **Основные понятия, используемые при описании симметрии кристаллов: Пространственная группа симметрии, кристаллографический класс, решетка Бравэ, группа Бравэ, кристаллическая система.**
5. **Влияние характера химической связи на структуру кристалла. Основные принципы описания кристаллических структур – ионных кристаллов, металлических кристаллов, ковалентных кристаллов, молекулярных кристаллов. Основные структурные типы. Полиморфизм и политипизм.**
6. **Плотные упаковки в молекулярных, моноатомных, бинарных кристаллах. Структуры шпинелей и перовскитов.**
7. **Описание структур в координационных полиэдрах. Структуры силикатов.**
8. **Дифракция рентгеновского излучения кристаллами. Условия Лауэ. Уравнение Вульфа-Брэгга. Структурная амплитуда. Условия погасания. Дифракционные методы исследования структуры кристаллов. Основные варианты дифракционных методов. Виды излучения, используемого для дифракционного изучения структуры кристаллов.**
9. **Метод порошка. Основные принципы. Уравнение Вульфа-Брэгга. Факторы, определяющие интенсивность рефлексов на дифрактограмме. Фактор повторяемости рефлексов. Информация о структуре, которую дает метод порошка.**
10. **Индексы Миллера. Индексирование порошковых дифрактограмм (на примере кубической системы). Расчет параметров элементарной ячейки по рентгенографическим данным.**
11. **Точечные дефекты в кристаллах. Основные виды. Беспорядок по Френкелю и Шоттки. Обозначения дефектов по Креггеру и Винку. Равновесная концентрация тепловых точечных дефектов.**
12. **Точечные дефекты, обусловленные нестехиометрией кристаллов. Квазихимические равновесия. Обозначения дефектов по Креггеру и Винку. Влияние внешней атмосферы на концентрацию точечных дефектов.**
13. **Точечные дефекты, обусловленные присутствием примесных атомов. Влияние примеси на концентрацию точечных дефектов в кристаллах, склонных к нестехиометрии.**
14. **Электронное строение металлов, диэлектриков, собственных и примесных полупроводников. Связь электронных свойств окислов с их нестехиометрией. Основные виды нестехиометрии в оксидах металлов.**

15. Диффузия в твердых телах. Основные механизмы диффузии. Выражения для коэффициента диффузии в кристаллах. Энергия активации диффузии. Диффузия в поле механических напряжений – эффект Горского.
16. Ионная проводимость в кристаллах. Влияние примесных атомов на ионную проводимость. Изотерма Коха-Вагнера. Параметры, которые можно получить из температурной зависимости ионной проводимости.
17. Дислокации. Определение. Контур и вектор Бюргерса. Краевые и винтовые дислокации. Энергия дислокации.
18. Дислокации. Основные виды движения дислокаций. Влияние дислокаций на механические свойства твердых тел.

*II. Перечень вопросов, которые будут предложены тем, кто претендует на оценки «4» и «5». Для оценки «4» надо иметь представление о том, что спрашивается. Для оценки «5» надо уметь дать развернутый и глубокий ответ, показав способность применять для ответа весь материал курса в целом.*

1. Какие факторы следует учитывать при изучении реакций термического разложения, твердое + газ и твердое + твердое? Почему реакции твердое + твердое всегда экзотермичны? Каковы особенности реакций твердое + твердое в системах, где твердые тела – органические молекулярные кристаллы?
2. Управление реакционной способностью твердых веществ. Какие существуют способы ускорения твердофазных химических реакций? Пространственное развитие реакций в твердых телах. Факторы, влияющие на него, и способы управления им.
3. Реакционная способность твердых веществ. Роль идеальной структуры. Роль дефектов. Реакционная способность твердых веществ. Роль механических напряжений. Роль диффузии. Обратная связь. Влияние предыстории твердого образца на его реакционную способность.
4. Ионная проводимость суперионников.
5. Топохимические и топотаксиальные реакции. Метод предшественника. Получение метастабильных форм.
6. Применения химии твердого тела в фармации и материаловедении.
7. Возможные процессы, инициируемые механическим воздействием на твердые тела и вызывающие химические реакции или полиморфные превращения.

*В билете будет два вопроса из разных разделов курса + задача, подобная тем, что решались на семинарах, контрольных работах и семинарах. Обычно задается еще один вопрос из раздела курса, не отраженного в двух вопросах билета и задаче. Возможны еще дополнительные задачи и вопросы, особенно, если только по ответу на билет не удастся однозначно определить уровень знаний. При подготовке к ответу не разрешается пользоваться учебниками, конспектами, интернетом и, конечно, шпаргалками. На экзамене иметь при себе калькулятор для решения задач.*