

## Билеты к экзамену по ХТТ (2016)

### Билет 1

1. Симметрия молекул и кристаллов. Определение элемента и операции симметрии. Закрытые и открытые операции симметрии. Закрытые операции симметрии, совместимые с трансляцией. Матричное и графическое представление операций симметрии. Произведение операций симметрии. Определение группы симметрии. Генераторы группы. Правильная система точек, точка общего и частного положения, кратность позиции.

2. Поглощение рентгеновского излучения. Зависимость интенсивности излучения от толщины кристалла. Влияние размера кристалла на ширину рефлексов. Формула Шеррера.

### Билет 2

1. Симметрия кристаллов. Трансляционная симметрия. Решетка Бравэ. Базис структуры. Одномерные, двумерные и трёхмерные решётки Бравэ. Группа Бравэ. Элементарная ячейка кристалла. Критерии выбора элементарных ячеек. Примитивная и условная элементарная ячейка. Связь метрики элементарной ячейки и кристаллической системы.

2. Ассоциаты точечных дефектов. Природа взаимодействия и различные типы ассоциатов. Центры окраски. Образование кластеров точечных дефектов и сверхструктур. Плоскости кристаллографического сдвига.

### Билет 3

1. Сходственные элементы симметрии. Кристаллографический класс. Кристаллическая система. Критерии, по которым происходит разделение на кристаллические системы. Выбор кристаллографических осей для различных кристаллических систем. Номенклатура ПГС.

2. Хаотическая и направленная диффузия. Диффузия в градиенте концентрации. 1-й закон Фика. Диффузия в поле механических напряжений – эффект Горского.

### Билет 4

1. Пространственные группы симметрии. Номенклатура ПГС. Независимая область. Два способа описания структуры кристалла. Международные таблицы по кристаллографии, общая информация.

2. Дислокации. Определение дислокации. Виды дислокаций. Контур и вектор Бюргерса. Свойства вектора Бюргерса. Энергия дислокации.

### Билет 5

1. Сходственные элементы симметрии. Кристаллографический класс. Влияние симметрии на физические свойства кристаллов. Принципы симметрии Кюри и Неймана. Почему центрально симметричный кристалл не может быть пьезоэлектриком, сегнетоэлектриком и пироэлектриком?

2. Метод порошка. Рентгенофазовый анализ. Применение метода порошка.

#### Билет 6

1. Описание строения кристаллов в плотнейших упаковках. Гексагональная и кубическая плотнейшие упаковки. Значения координационных чисел и ПГС для каждой упаковки. Плотность упаковки. Металлическая связь. Примеры металлов, имеющих ГПУ, КПУ и ОЦК структуры.
2. Дислокации. Скольжение дислокаций. Барьер Пайерлса-Набарро. Плоскость скольжения. Примеры систем скольжения (ГЦК, ОЦК металлы). Переползание дислокаций.

#### Билет 7

1. Влияние типа связи на структуру кристаллов. Ковалентная связь. Почему монокристаллы с ковалентными связями имеют низкие значения коэффициента упаковки? Определение изоструктурности и изотипности. Примеры веществ, относящихся к структурным типам меди, магния, альфа-железа, алмаза.
2. Модель свободных электронов. Энергия Ферми. Как связана энергия Ферми с плотностью электронного газа? Как зависит теплоёмкость электронного газа от температуры?

#### Билет 8

1. Ионная связь. Принципы построения ионных кристаллов. Какие пустоты есть в плотнейших упаковках? Сколько пустот каждого типа приходится на один шарик плотнейшей упаковки? Размеры пустот. Координационный полиэдр и координационное число. Структурные типы NaCl, NiAs, вюрцита, сфалерита и антифлюорита. Какие ионы образуют плотнейшую упаковку? Какие типы пустот и в каком количестве заняты?
2. Дислокации. Плотность дислокаций. Образование дислокаций. Источник Франка-Рида. Методы наблюдения дислокаций.

#### Билет 9

1. Особенности строения ионных кристаллов. Постоянная Моделунга. Энергия кристаллической решётки.
2. Определение фазы. Полиморфные фазовые переходы и реакции выделения. Фазовые переходы 1-го и 2-го рода (по классификации Эренфеста). Связь с классификацией Гиббса.

#### Билет 10

1. Структурный тип перовскита. Какие изменения (вариации) возможны в семействе перовскитов? Нормальная и обращенная шпинель. Примеры.

2. Реакции твёрдое + газ. Окисление металлов. Основные стадии. Теория Вагнера.

#### Билет 11

1. Описание кристаллических структур в полиэдрах. Координационный полиэдр и координационное число. Структура силикатов. Взаимосвязь между химическими формулами и структурой силикатов.

2. Влияние дислокаций на механические свойства кристаллов. Факторы, влияющие на подвижность дислокаций (дислокации леса, примесные атомы, дисперсные частицы).

#### Билет 12

1. Факторы, определяющие структуру молекулярных кристаллов. Почему структуры молекулярных кристаллов имеют низкую симметрию? Почему плотность льда меньше плотности жидкой воды?

2. Электронное строение твёрдых тел. В чём недостаток модели свободных электронов? Теорема Блоха. Модель почти свободных электронов. Какое следствие имеет периодичность решётки кристалла для его электронной структуры?

#### Билет 13

1. Типы точечных дефектов. Механизмы образования точечных дефектов по Шоттки и по Френкелю. Примеры соединений, в которых преобладает один из этих механизмов. Причины образования точечных дефектов в кристаллах. Эффективный заряд точечного дефекта. Концентрация тепловых точечных дефектов. Энергия образования тепловых точечных дефектов.

2. Теория зародышеобразования. Образование метастабильных фаз.

#### Билет 14

1. Дефекты нестехиометрии. Различные варианты нестехиометрии на примере оксидов металлов. Влияние давления кислорода на концентрацию дефектов и проводимость кристаллов. Какие факторы определяют область гомогенности нестехиометрического кристалла?

2. Окисление металлов. Особенности роста слоя оксида для случая, когда скорость процесса определяется диффузией катионов.

#### Билет 15

1. Влияние примесных атомов на концентрацию точечных дефектов. Эффективный заряд примесного атома. Какие структурные дефекты образуются при введении примесных атомов, имеющих отрицательный или положительный эффективный заряд? Примеры образования структурных дефектов при введении примесных атомов в вещества, в которых преобладают дефекты: а) по Шоттки; б) по Френкелю в катионной подрешётке; в) по Френкелю в анионной подрешётке.

2. Частичные дислокации, определение и влияние на различные процессы. Дефекты упаковки. Двойникование. Сдвиговые фазовые переходы.

#### Билет 16

1. Диффузия в твердых телах. Основные механизмы диффузии. Вакансионный механизм диффузии. Выражения для коэффициента диффузии вакансии и атома.

2. Электронное строение твёрдых тел. Приближение сильной связи. Классификация твёрдых тел на основе их электронной структуры.

#### Билет 17

1. Ионная проводимость. Соотношение Нернста - Энштейна. Методы измерения ионной проводимости. Число переноса. Параметры, которые можно получить из температурной зависимости ионной проводимости. Температурная зависимость ионной проводимости кристаллов NaCl, допированных CaCl<sub>2</sub>.

2. Квазикристаллы. Какие вещества образуют квазикристаллы? Способы получения квазикристаллов. Строение квазикристаллов. Свойства квазикристаллов.

#### Билет 18

1. Ионная проводимость. Методы измерения ионной проводимости. Влияние примесных атомов на ионную проводимость в AgCl. Эффект Коха-Вагнера. Факторы, определяющие подвижность ионов.

2. Эффекты Киркендаля и Френкеля. Образование пор при окислении металлов.

#### Билет 19

1. Твёрдые электролиты. Основные причины высокой ионной подвижности в твёрдых электролитах. Примеры твёрдых электролитов (AgI, β-глинозём). Примеры применения твёрдых электролитов (кислородные сенсоры, топливные элементы, литий-ионные аккумуляторы).

2. Реконструктивные и деформационные фазовые переходы. Примеры. Как влияет изменение температуры и давления на кристаллическую структуру.

#### Билет 20

1. Дифракция рентгеновских лучей. Факторы, определяющие положение рефлекса и его интенсивность. Условие дифракции Лауэ и Брэггов.

2. Жидкокристаллическое состояние. Типичные примеры химических соединений, термотропные и лиотропные жидкие кристаллы. Нематические, холестерические и смектические жидкие кристаллы. Применение жидких кристаллов.

#### Билет 21

1. Обратная решётка. Определение. Связь векторов обратной и прямой решёток. Как определяются вектора обратной решётки (направление и длина). Связь между индексами Миллера и координатами точек в обратном пространстве. Квадратичные формы, общее выражение. Выражения для кубической, тетрагональной и ромбической решёток Бравэ.

2. Коэффициент Пиллинга–Бэдвордса. Влияние значения коэффициента Пиллинга–Бэдвордса на механизм и кинетику твёрдофазной реакции.

#### Билет 22

1. Векторное условие дифракции. Построение Эвальда. Использование понятия обратной решётки для описания явления дифракции на кристаллических структурах. Варианты реализации метода дифракции: метод вращающегося кристалла, метод Лауэ, метод порошка.

2. Реакции твёрдое + твёрдое. Особенности. Влияние диффузии на кинетику и пространственное развитие реакции.

#### Билет 23

1. Основные задачи дифракционных исследований. Симметрия дифракционной картины. Закон Фриделя и Лауэ-классы.

2. Особенности кинетики реакций в твёрдой фазе. Формально-кинетический подход. Степень превращения. Кинетическая кривая. Физико-геометрические модели.

#### Билет 24

1. Структурная амплитуда. Атомный фактор рассеяния. Погасания рефлексов, связанные с центровками и открытыми элементами симметрии. Последовательность анализа погасаний для определения ПГС кристалла. Что такое дифракционная группа?

2. Реакции термического разложения. Особенности реакций. Влияние упругих напряжений на реакции термического разложения.

#### Билет 25

1. Каковы закономерности изменения ионных радиусов в периодической системе? Как соотношение между размерами катионов и анионов влияет на структуру ионных кристаллов? Приведите диапазоны значений отношений радиусов катиона и аниона, в которых устойчивы структурные типы сфалерита  $ZnS$ ,  $NaCl$ ,  $CsCl$ .

2. Особенности роста слоя оксида для случая, когда скорость процесса определяется диффузией кислорода.