

# Вопросы к экзамену

## Блок 1

1. Свойства атомов, важные для кристаллохимии: угловая форма орбиталей, орбитальные радиусы.
2. Понятие об электроотрицательности. Шкала электроотрицательности Полинга. Связь электроотрицательности с потенциалом ионизации и сродством к электрону (формула Малликена).
3. Эффективные радиусы ионов. Критерии вывода радиусов Ланде, Гольдшмидта, Полинга. Зависимость ионного радиуса от заряда, координационного числа, спинового состояния.
4. Атомные радиусы. Их периодические зависимости. Соотношение между атомными и ионными радиусами. Ван-дер-ваальсовы радиусы.
5. Распределение электронной плотности и «кристаллические» радиусы атомов. Эффективные заряды атомов в кристалле.
6. Ионная связь. Энергия решетки ионных кристаллов. Цикл Борна-Габера. Формулы Борна-Майера и Борна-Ланде.
7. Ионы переходных металлов в кристаллическом поле. Предпочтение иона переходного металла к октаэдру или тетраэдру. Энергия стабилизации в кристаллическом поле.
8. Переходные типы химической связи в кристаллах. Степень ионности химической связи и разность электроотрицательностей. Структуры кристаллов, переходные от ионных к ковалентным.
9. Переходные типы химической связи в кристаллах. Структуры, переходные между металлическими и ковалентными.
10. Металлическая связь. Основные структуры металлов.
11. Остаточная (ван-дер-ваальсова) связь. Поляризация аниона в низкосимметричных позициях структуры. Примеры молекулярных структур.
12. Водородная связь и ее особенности. Структура льда.
- 13 Критерии устойчивости структурного типа для ковалентных кристаллов. Диаграммы Музера-Пирсона.
14. Критерии устойчивости структурного типа для ковалентных кристаллов. Правила Юм-Розери, Грима-Зоммерфельда, Музера-Пирсона, Партэ.
15. Критерии устойчивости структур ионных кристаллов. Первое правило Полинга. Правило Магнуса-Гольдшмидта.
16. Фактор толерантности на примере  $ABX_3$  и  $AB_2X_4$
17. Локальный баланс валентностей (второе правило Полинга), примеры.

18. 3-е и 4-е правила Полинга, примеры.
19. Эмпирические правила изоморфизма (Вегаарда, Ретгерса, Гольдшмидта, Юм-Розери, Гольдшмидта, полярности, ассистирования, депрессии). Диагональные ряды и звезды изоморфизма Ферсмана.
20. Внешние и внутренние факторы изоморфизма. Влияние температуры и давления, роль различия свойств атомов на изоморфизм.
21. Физико-химические основы изоморфизма. Роль энтропии и энтальпии смешения. Критическая температура распада и ее связь с энергией смешения. Принципы расчета областей распада изоморфных смесей.
22. Локальная структура твердых растворов замещения. Понятия виртуального кристалла, модель чередования связей. Податливость позиции.
23. Структурная гомология. Производные и вырожденные структуры.
24. Структурная гомология. Фазы вычитания и внедрения.
25. Структурная классификация полиморфизма.
26. Политипизм. Отличие от полиморфизма. Основные обозначения. Примеры.
27. Изменение симметрии кристалла при изменении  $T$  и  $P$ . Координационные правила полиморфизма.
28. Группы плотнейших упаковок, их взаимосвязь. Примеры структур с плотнейшими упаковками.
29. Многослойные плотнейшие упаковки, их обозначения в различных символиках, принципы построения, примеры структур.
30. Методы кристаллохимического прогноза. Особенности полуэмпирического моделирования.