

Вопросы на экзамен (по материалам 6-8 семестров)

На экзамене можно и нужно пользоваться персональным атласом структур. Экзамен проходит в устной форме, путем беседы. Время на подготовку – 20-30 минут. В билете – ТРИ вопроса (из каждого блока). После билета студент дополнительно рассказывает о 5-ти (выбранных случайным образом) структурах (структурных типах).

Блок 1

1. Закрытые элементы симметрии и их взаимодействие.
2. Классы симметрии кристаллов. Их разделение классов на категории и сингонии.
3. Международная символика точечных и пространственных групп.
4. Символика Шенфлиса точечных и пространственных групп.
5. Трансляция как элемент симметрии кристалла. 14 типов решеток Браве.
6. Трансляционные элементы симметрии и их взаимодействие.
7. Пространственные группы симметрии и принципы их графического представления.
8. Правильные системы точек и их характеристики.
9. Симметрия структур, построенных по закону плотнейших упаковок.
10. Ромбические пространственные группы. Специфика графиков и особенности вывода.

Блок 2

1. Основные вехи истории кристаллохимии. Кристаллохимия среди других наук о веществе. Основные задачи кристаллохимии.
 2. Свойства атомов, важные для кристаллохимии: угловая форма орбиталей, орбитальные радиусы, потенциалы ионизации и сродство к электрону, орбитальные электроотрицательности, поляризуемость, кислотно-основные свойства.
 3. Построение периодической системы элементов: принцип Паули, правило Гунда.
 4. Потенциалы ионизации и сродство к электрону. Периодическая зависимость от порядкового номера Z . Химические свойства и классификация элементов: металлы, полуметаллы и неметаллы.
 5. Понятие об электроотрицательности. Шкала электроотрицательности Полинга. Связь электроотрицательности с потенциалом ионизации и сродством к электрону (формула Малликена). Степень ионности связи и разность электроотрицательностей.
 6. Поляризуемость атомов и ионов. Ее связь с размерами атомов и ионов. Слоистые структуры как результат поляризации анионов.
 7. Структуры гомодесмические и гетеродесмические. Структурные мотивы, примеры структур с разными мотивами
 8. Координационные полиэдры и координационные числа. Связи между координационными числами разных атомов в структуре. Среднее координационное число.
 9. Структурный тип. Изоструктурность, изотипность, структурный класс. Гомеотипия.
 10. Структурные единицы кристалла. Мотив структуры. Кристаллохимические формулы.
 11. Эффективные радиусы ионов. Критерии вывода радиусов Ланде, Гольдшмидта, Полинга.
 12. Зависимость ионного радиуса от заряда, координационного числа, спинового состояния.
 13. Периодические зависимости ионных радиусов. Лантаноидное сжатие.
- Атомные и ковалентные радиусы. Их периодические зависимости. Соотношение между атомными и ионными радиусами

14. Ван-дер-ваальсовы радиусы. Их кристаллохимическое значение.
15. Распределение электронной плотности и «кристаллические» радиусы атомов. Сжатие аниона и расширение катиона в кристаллическом поле.
16. Эффективные заряды атомов в кристалле и методы их определения.
17. Структурные особенности разных типов связи: ионной, ковалентной, металлической, ван-дер-ваальсовой.
18. Ионная связь. Энергия решетки ионных кристаллов.
19. Цикл Борна-Габера. Формулы Борна-Майера и Борна-Ланде.
20. Энергия связи в кристаллах: энергия решетки, энергия атомизации. Потенциальная кривая химической связи.
21. Переходные типы химической связи в кристаллах. Степень ионности химической связи и разность электроотрицательностей. Структуры кристаллов, переходные от ионных к ковалентным.
22. Переходные типы химической связи в кристаллах. Структуры, переходные между металлическими и ковалентными.
23. Металлическая связь. Радиусы металлических атомов. Основные структуры металлов.
24. Остаточная (вандерваальсова) связь. Ван-дер-ваальсовы радиусы. Молекулярные кристаллы.
25. Диполь-дипольные взаимодействия. Поляризация аниона в низкосимметричных позициях структуры на примере кислорода в структуре шпинели. Причина образования слоистых структур: структурные типы CdI_2 и MoS_2
26. Водородная связь. Структура льда. Р-Т диаграмма H_2O .
27. Элементы теории кристаллического поля. Спиновое состояние. Ионы переходных металлов в кристаллическом поле. Расщепление d-электронов в октаэдрическом окружении. Радиусы ионов переходных металлов в высокоспиновом и низкоспиновом состояниях.
28. Предпочтение иона переходного металла к октаэдру или тетраэдру. Энергия стабилизации в кристаллическом поле.
29. Кислотно-основные свойства атомов и ионов.
30. Магнитные свойства атомов и ионов. Магнетизм в твердых телах.
31. Современные методы кристаллохимического прогноза. Критерии и принципы конструирования пробных структур.
32. Современные методы кристаллохимического прогноза. Возможные эмпирические методы уточнения пробных структур.
33. Современные методы кристаллохимического прогноза. Возможности атомистического полуэмпирического моделирования.
34. Современные методы кристаллохимического прогноза. Метод валентности связи.
35. Современные методы кристаллохимического прогноза. Метод DLS.
36. Современные методы кристаллохимического прогноза. Расчеты из первых принципов. Возможности и ограничения метода.
37. Эволюционные методы предсказания кристаллических структур.
38. Симметричная статистика минералов и неорганических соединений.
39. Причины ограниченности числа минеральных видов.
40. Современное программное обеспечение структурного моделирования различными методами.
41. Структурно несовершенные кристаллы. Классификация дефектов кристаллической структуры.
42. Эффект улавливания микропримеси.
43. Возможности теоретического моделирования структурных несовершенств кристалла.
44. Анионо-центрированная кристаллохимия. Катионы и анионы, наиболее склонные для описания с этих принципов.
45. Анионо-центрированная кристаллохимия. Примеры различных мотивов оксоцентрированных тетраэдров.

Блок 3

1. Основной закон кристаллохимии в формулировке Гольдшмидта и его современное понимание.
2. Основные категории кристаллохимии и соотношения между ними. «Тетраэдр» кристаллохимии.
3. Морфотропия. История изучения. Её закономерности (отношение радиусов катиона и аниона, поляризуемость и т. д).
4. Критерии устойчивости структур ионных кристаллов. Первое правило Полинга.
5. Локальный баланс валентностей (второе правило Полинга), примеры.
6. 3-е и 4-е Правило Полинга
7. 5-е правило Полинга – примеры и исключения.
8. Фактор толерантности для ABX_3 и AB_2X_4 . Модельные структуры Гольдшмидта.
9. Критерии устойчивости структурного типа для ковалентных кристаллов. Диаграммы Музера-Пирсона для бинарных соединений.
10. Критерии устойчивости структурного типа для ковалентных кристаллов. Правила Юм-Розери, Грима-Зоммерфельда.
11. Критерии устойчивости структурного типа для ковалентных кристаллов. Обобщенное правило Пирсона для сложных соединений.
12. Критерии устойчивости структурного типа для ковалентных кристаллов. 1 и 2 правило Парте.
13. Критерии устойчивости структурного типа для ковалентных кристаллов. Нормальные и обобщенные валентные соединения.
14. Структурная гомология. Производные и вырожденные структуры.
15. Структурная гомология. Фазы вычитания и внедрения.
16. Структурная гомология силикатов. Полисоматические серии на примере ряда сейдозерит-накафит.
17. Полисоматические серии Mg и Mn силикатов.
18. Фазы Юм-Розери. Структурные и электронные особенности, примеры.
19. Фазы Лавеса. Структурные и электронные особенности, примеры.
20. Фазы Цинля. Структурные и электронные особенности, примеры.
21. Гомологические серии оксидов и фторидов на основе структуры флюорита.
22. Полиморфные переходы 1 типа. Классификация и примеры.
23. Полиморфные переходы 2 типа. Классификация и примеры.
24. Полиморфные переходы 3 типа. Классификация и примеры.
25. Полиморфные переходы 4 типа. Классификация и примеры.
26. Полиморфные переходы 5 типа. Классификация и примеры.
27. Полиморфизм: определение, история открытия и изучения
28. Фазовая диаграмма SiO_2
29. Фазовая диаграмма ZrO_2
30. Полиморфные переходы в глубинных геосферах.
31. Политипизм. Отличие от полиморфизма. Основные способы обозначения. Примеры.
32. Изменение симметрии кристалла при изменении T и P. Координационные правила полиморфизма.
33. Основы количественной теории изоморфизма. Принципы расчета областей распада изоморфных смесей. Возможные методы моделирования смесимости в твердых телах.
34. Локальная структура твердых растворов замещения. Понятия виртуального кристалла, модель чередования связей. Податливость и релаксация позиции.

35. Внешние факторы изоморфизма. Влияние температуры и давления на изоморфизм
36. Внутренние факторы изоморфизма: роль различия свойств атомов (ионов) на смесимость.
37. Физико-химические основы изоморфизма. Роль энтропии и энтальпии смешения.
38. Соотношение между термодинамическими функциями смешения и типами диаграмм состояния на примере двухкомпонентной системы.
39. Критическая температура распада и ее связь с энергией смешения.
40. Изоморфные ряды. Роль лантаноидного сжатия в изоморфизме.
41. Изоморфизм, определение, история открытия и изучения. Классификация.
42. Эмпирические правила изоморфизма (Вегарда, Ретгерса, Гольдшмидта, Юм-Розери).
43. Правило полярности изоморфизма Гольдшмидта для гомо- и гетеровалентных замещений.
44. Диагональные ряды и звезды изоморфизма Ферсмана.
45. Полярность изоморфизма, влияние общей структурной единицы на смесимость. Примеры.

Блок 4

Знание структурных типов. Устная беседа (без подготовки) о 5-ти структурах. Разрешается пользоваться персональным атласом.

Список на сайте