

Федеральное государственное бюджетное образовательное  
учреждение высшего образования  
«САРАТОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ  
ИМЕНИ ГАГАРИНА Ю.А.»

УТВЕРЖДАЮ  
Проректор  
по научной работе  
Д.Ю. Петров  
«31» мая 2019 г.



ПРОГРАММА  
ВСТУПИТЕЛЬНОГО ЭКЗАМЕНА В АСПИРАНТУРУ  
ПО СПЕЦИАЛЬНОЙ ДИСЦИПЛИНЕ

НАПРАВЛЕНИЕ – 04.06.01 «Химические науки»

НАПРАВЛЕННОСТЬ – «Химия твердого тела»

Саратов, 2019

# ПРОГРАММА ВСТУПИТЕЛЬНОГО ЭКЗАМЕНА В АСПИРАНТУРУ ПО СПЕЦИАЛЬНОЙ ДИСЦИПЛИНЕ

## ВОПРОСЫ

### СТРОЕНИЕ ТВЕРДОГО ТЕЛА

- 1 Химия твердого тела как раздел химической науки.
- 2 Химическая связь в твердом теле. Основные составляющие межмолекулярных взаимодействий. Ван-дер-ваальсовы молекулы. Кластеры атомов и молекул. Водородная связь. Молекулярные комплексы. Молекулярные кристаллы. Супермолекулы и супрамолекулярная химия. Особенности строения полимеров.
- 3 Ассоциаты и кластеры в жидкостях. Мицеллообразование и строение мицелл. Кристаллизация из растворов и расплавов. Зародышеобразование и рост кристаллов.
- 4 Поверхность конденсированных фаз. Особенности строения поверхности твердых тел. Структура границы раздела конденсированных фаз.
- 5 Описание симметрии кристаллических структур. Точечные группы симметрии. Трансляционная симметрия, решетки Бравэ. Элементарная ячейка. Кристаллические системы (сингонии). Пространственные группы симметрии. Кристаллографические классы.
- 6 Влияние характера химической связи на структуру кристалла. Основные структурные типы. Полиморфизм и политипизм. Описание структур в координационных полиэдрах. Структура силикатов и титанатов.
- 7 Дифракционные методы исследования структуры кристаллов. Основные варианты дифракционных методов. Уравнение Вульфа-Брэггов.
- 8 Метод порошка, основные принципы. Факторы, определяющие интенсивность рефлексов. Индексирование порошковых дифрактограммы и расчет параметров элементарной ячейки. Влияние на дифракционную картину размера частиц, образования сверхструктур, наноструктур, микронапряжений.
- 9 Некристаллические твердые тела: несоизмерные структуры, квазикристаллы, аморфные твердые тела. Жидкие кристаллы.
- 10 Точечные дефекты в кристаллах, основные виды. Беспорядок по Френкелю и Шоттки. Равновесная концентрация тепловых точечных дефектов. Точечные дефекты, обусловленные присутствием примесных атомов. Квазихимические равновесия.
- 11 Точечные дефекты, обусловленные нестехиометрией кристаллов. Влияние внешней атмосферы на концентрацию точечных дефектов. Основные виды нестехиометрии в оксидах металлов. Твердые растворы.
- 12 Электронное строение металлов и диэлектриков, собственных и примесных полупроводников. Связь электронных свойств окислов с их нестехиометрией.
- 13 Диффузия в твердых телах. Основные механизмы диффузии. Диффузия в поле механических напряжений. Диффузия и химические реакции с участием твердых тел.

- 14 Ионная проводимость в кристаллах. Влияние примесных атомов на ионную проводимость. Ионная проводимость суперионников.
- 15 Протяженные дефекты, основные виды. Дислокации. Краевые и винтовые дислокации, основные виды движения дислокаций.

## КИНЕТИКА И ТЕРМОДИНАМИКА РЕАКЦИЙ С УЧАСТИЕМ ТВЕРДЫХ ТЕЛ

- 16 Реакционная способность твердых веществ, роль идеальной структуры, дефектов, диффузии, механических напряжений. Обратная связь. Управление реакционной способностью твердых веществ.
- 17 Пространственное развитие реакций в твердых телах. Факторы, влияющие на него и способы управления. Топохимические и топотаксиальные реакции. Метод предшественника. Влияние предыстории твердого образца на его реакционную способность.
- 18 Размерные эффекты в химии твердого тела. Нанокристаллы, классификация, особенности строения, условия формирования. Сверхструктуры, модулированные структуры. Паракристаллы. Методы исследования наноматериалов. Методы синтеза нанокристаллических порошков.
- 19 Термоаналитические методы в химии твердого тела. Термогравиметрия, термомеханический анализ, дифференциальная сканирующая калориметрия для решения задач химии твердого тела.
- 20 Механохимия, особенности механохимических превращений. Типы механического воздействия, типы мельниц. Механизмы механохимических реакций.
- 21 Влияние давления на структуру твердых тел. Металло-органические каркасные структуры – принципы дизайна, применения. Применение химии твердого тела в фармации и материаловедении.
- 22 Основные понятия и законы термодинамики в химии твердого тела. Основные понятия термодинамики: изолированные и открытые системы, равновесные и неравновесные системы, термодинамические переменные, температура, Уравнения состояния. Уравнения состояния для конденсированных систем.
- 23 Первый закон термодинамики. Теплота, работа, внутренняя энергия, энтальпия, теплоемкость. Особенности применения первого закона термодинамики для твердофазных систем.
- 24 Второй закон термодинамики. Энтропия и ее изменения в обратимых и необратимых процессах. Особенности применения второго закона термодинамики для твердофазных систем.
- 25 Элементы статистической термодинамики. Микро- и макросостояния химических систем. Термодинамическая вероятность и ее связь с энтропией. Изменение энтропии в конденсированных системах.
- 26 Гетерогенные системы. Понятия компонента, фазы, степени свободы.
- 27 Однокомпонентные системы. Диаграммы состояния однокомпонентных систем на примере  $\text{TiO}_2$  и  $\text{SiO}_2$ . Фазовые переходы первого и второго рода. Двухкомпонентные системы. Различные диаграммы состояния двухкомпонентных систем.

- 28 Адсорбция и поверхностные явления. Адсорбция. Адсорбент, адсорбат. Структура поверхности и пористость адсорбента. Изотермы и изобары адсорбции.
- 29 Химическая кинетика твердофазных реакций. Простые и сложные реакции скорость простой реакции. Основной постулат химической кинетики. Способы определения скорости реакции. Кинетические кривые. Кинетические уравнения. Константа скорости.
- 30 Феноменологическая кинетика сложных химических реакций. Принцип независимости элементарных стадий. Кинетические уравнения для обратимых, параллельных и последовательных реакций. Квазистационарное приближение.
- 31 Кинетика гетерогенных химических реакций. Макрокинетика. Роль диффузии в кинетике гетерогенных реакций. Гетерогенный катализ. Кинетика и механизм гетерогенных каталитических реакций.
- 32 Электрохимия твердого тела. Твердые электролиты и электродные материалы. Электрохимические реакции в твердом теле. Двойной электрический слой. Модельные представления о структуре двойного электрического слоя.

## ОСНОВНАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Эткинс П, де Паула Дж. Физическая химия. В 3 частях. М.: Мир, 2007.
2. Ярославцев А.Б. Химия твердого тела. М., Изд-во Научный мир, 2009.
3. Чупрунов Е.В., Хохлов А.Ф., Фадеев М.А. Основы кристаллографии. М., Физматлит, 2006.
4. Бутягин П.Ю. Химическая физика твердого тела. М., изд-во МГУ, 2006.
5. Третьяков Ю.Д. Введение в химию твердофазных материалов. М., изд-во МГУ, 2006.
6. Сергеев Г.Б. Нанохимия. М., изд-во МГУ, 2003.
7. Уваров Н.Ф., Болдырев В.В. Размерные эффекты в химии твердого тела // Успехи химии, т. 70, 2001, с. 307.
8. Бокштейн Б.С., Ярославцев А.Б. Диффузия атомов и ионов в твердых телах. М., изд-во МИСиС, 2005.
9. Уваров Н.Ф. Композиционные твердые электролиты. Новосибирск, изд-во СО РАН, 2008.
10. Бернштейн Дж. Полиморфизм молекулярных кристаллов / Пер. с англ.; под ред. М.Ю. Антипина, Т.В. Тимофеевой. М.: Наука, 2007.

## ДОПОЛНИТЕЛЬНАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Горшков В, Кузнецов И. Основы физической химии. М.: Бином. 2012.
2. Харитонов Ю.Г. Физическая химия. М.: ГЭОТАР-Медиа, 2013.
3. Стромберг А. Г., Семченко Д. П. Физическая химия. М.: Высшая школа. 2009.
4. Кудряшева Н. С., Бондарева Л. Г. Физическая химия. М.: Юрайт. 2013.
5. Вест А. Химия твердого тела и ее приложения. В 2-х томах. М.: Мир, 1988.
6. Ашкрофт Н., Мермин Н. Физика твердого тела. М.: Мир, 1973.
7. Бокий Г.Б. Кристаллохимия. М.: Наука, 1971.

- 8 Лидьярд А. Ионная проводимость кристаллов. М.: Иностран. лит., 1962.
- 9 Нанотехнологии в ближайшем десятилетии. Прогноз, направления исследований. Сборник./ Под ред. Рока М., Уильямса Р.С., Аливисатоса П.М., Изд-во Мир, 2002.
- 10 Новиков И.И., Розин К.М. Кристаллография и дефекты в кристаллической решетке. М.: Наука, 1990.
- 11 Порай-Кошиц М.А. Основы структурного анализа химических соединений. М.: Высш. шк., 1989.
- 12 Современная кристаллография / Под ред. Б.К. Вайнштейна. М.: Наука, 1979.
- 13 Третьяков Ю.Д. Твердофазные реакции. М.: Химия, 1978.
- 14 Денисов Е. Т., Саркисов О. М., Лихтенштейн Г. И. Химическая кинетика. М.: Химия, 2000.
- 15 Болдырев В.В. Химия твердого тела, вчера и сегодня // Журнал Российского химического общества им. Д.И.Менделеева, т. 44, 2000, с. 14-24.
- 16 Пущаровский Д.Ю. Рентгенография минералов. М.: ЗАО «Геоинформмарк», 2000.

Программное обеспечение и Интернет-ресурсы:

1. Сайт Кембриджского банка данных CCDC <http://www.ccdc.cam.ac.uk/>.
2. Кристаллографический сервер Бильбао <http://www.crust.ehu.es/>.

Председатель  
экзаменационной комиссии



Директор ФТИ  
проф. Гороховский А.В.