

ВОПРОСЫ К ЭКЗАМЕНУ ПО КУРСУ

«СОВРЕМЕННАЯ ХИМИЯ ТВЕРДОГО ТЕЛА»

1. Понятие о кристаллах. Особенности симметрии кристаллов.
2. Основы кристаллохимии. Модель плотнейших шаровых упаковок (ПШУ).
3. Модели строения ионных кристаллов. Правила Полинга. Электроотрицательность.
4. Теория кристаллического поля.
5. Ковалентное взаимодействие: особенности. описание в терминах орбиталей. Понятие о методах прямого пространства в описании ковалентного взаимодействия.
6. Квантовая химия. Методы перехода к одноэлектронным уравнениям.
7. Квантовая химия твердого тела. Теорема Блоха. Выбор k-точек для расчета.
8. Квантовая химия твердого тела. Интерпретация результатов расчета.
9. Термодинамическое равновесие. Условие равновесия. Свободная энергия системы.
10. Равновесие в системе многих фаз. Правило фаз и его физический смысл.
11. Фазовые диаграммы однокомпонентных, двухкомпонентных систем.