

**ПРОГРАММА
ВСТУПИТЕЛЬНОГО ЭКЗАМЕНА
ПО НАПРАВЛЕНИЮ ПОДГОТОВКИ
03.06.01 ФИЗИКА И АСТРОНОМИЯ:
ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ**

ПОЯСНИТЕЛЬНАЯ ЗАПИСКА

Физика конденсированного состояния занимается развитием новых методов синтеза твердых веществ и их изучение физико-химическими методами, путей идентификации и характеристики материалов, описанием их структуры, а также новыми стратегиями получения материалов с желаемыми и контролируруемыми свойствами (электронными, магнитными, диэлектрическими, оптическими, адсорбционными или каталитическими и др.).

Цель вступительных экзаменов - выяснить степень овладения студентами научными основами, позволяющими установить взаимосвязь "состав - строение - свойства - условия получения" основных классов материалов и применить эти знания для управляемого получения соединений.

Для сдачи экзамена необходимо:

- ✓ знать природу, химическую связь и строение твердых тел, научные основы классификации, физические и химические свойства основных классов материалов;
- ✓ знать основные закономерности процессов кристаллизации и процессов роста, а также природу твердофазных реакций; владеть основами управляемого получения материалов на основе знаний фазовых диаграмм, термодинамики, кинетики и структурной кристаллохимии;
- ✓ овладеть элементами теории дефектов, знать закономерности процессов дефектообразования в кристаллах,
- ✓ представлять современный уровень развития методов исследования состава и строения соединений; иметь практические и экспериментальные навыки для понимания специфики каждого физического и физико-химического методов, знать их возможности и ограничения, уметь сочетать несколько методов для решения конкретных задач материаловедения, ориентироваться в областях применения основных методов исследования дефектов кристаллической структуры;
- ✓ иметь теоретические знания, необходимые для понимания физических принципов экспериментальных методов и интерпретации результатов различных физических и физико-химических методов исследования, позволяющие в дальнейшем самостоятельно овладевать новыми достижениями в той или иной области знания;
- ✓ знать методы и средства выполнения расчетов, способов компьютерного моделирования;
- ✓ знать передовой отечественный и зарубежный опыт в области химии твердого тела и в конкретной специфической области знания;

В соответствии с этими требованиями в программу курсов введены вопросы из следующих базовых и профилирующих курсов:

"Кристаллография", "Методы исследования состава и структуры соединений", "Кристаллофизика материалов электронной техники", "Физика и химия твердого тела", "Физика и химия твердофазных процессов", "Физико-химический анализ и термодинамика гетерогенных процессов", "Диффузия и диффузионно-контролируемые процессы", "Дифракционные методы исследования кристаллических материалов", "Методы исследования реальной кристаллической структуры", "Радиофизика", "Физика переходных элементов", "Неорганическая химия", "Физическая химия".

РАЗДЕЛ I

Структура твердых тел.

Понятие структуры (макроструктура, микроструктура и субструктура, атомно-кристаллическая структура, электронная структура).

Классификация твердых тел, имеющие кристаллическое (монокристалл, текстура, поликристалл, нанокристалл) и некристаллическое (аморфные вещества, стекла, полимеры, жидкие кристаллы) строение. Аперриодические структуры. Супрамолекулярные образования. Основные свойства кристаллов. Симметрия. Точечные группы. Трансляционная симметрия. Решетка Бравэ. Пространственные группы.

Основные понятия и категории химической кристаллографии (кристаллохимии). Теория плотнейших шаровых упаковок и плотных шаровых кладок. Кристаллохимические закономерности в периодической системе элементов Д.И.Менделеева. Межатомные и межмолекулярные связи в кристаллах. Основные закономерности, правила и соотношения образования кристаллических структур с различным характером связи. Основы динамической, сравнительной и энергетической кристаллохимии.

Дефектообразование в твердых телах

Классификация дефектов (точечные, линейные, двумерные и объемные). Виды точечных дефектов, их взаимодействие, методы определения вида и концентрации. Ассоциаты точечных дефектов. Роль точечных дефектов в образовании сверхструктур, структур кристаллографического сдвига и гомологических рядов. Радиационные дефекты. Квазихимические реакции и уравнение электронейтральности.

Виды одномерных дефектов. Дислокации (краевые, винтовые, смешанные). Вектор Бюргерса. Движение дислокаций. Полные и частичные дислокации. Дислокации и рост кристаллов. Двумерные дефекты (внутренняя и внешняя поверхности кристаллов). Границы блоков. Дефекты упаковки. Трехмерные дефекты: двойники и закономерные сrostки. Элементы двойникования. Группы антисимметрии для описания двойников.

Электронное строение твердого тела

Основы квантовой химии твердых тел. Зонная теория. Экспериментальные методы исследования зонной структуры. Классификация

твердых тел (диэлектрики, полупроводники, металлы). Теория поля лигандов. Динамика кристаллической решетки. Два вида динамики - макро и микродинамика. Экспериментальное определение упругих модулей твердых тел. Эффекты анагармонизма колебаний атомов кристаллической решетки.

РАЗДЕЛ II

Явления на поверхности твердых тел

Структура поверхности и поверхностные явления. Поверхностная энергия. Физическая адсорбция на поверхности твердых тел. Хемосорбция. Хемосорбция на металлах и полупроводниках. Кинетика хемосорбции. Адсорбция из жидкой фазы. Реакции на поверхности раздела. Катализ. Классическое представление о катализе. Гетерогенный катализ. Природа катализатора.

Объемные превращения в твердых телах.

Виды объемных превращений. Классификация превращений. Фазовые превращения I и II рода. Фазовые превращения типа порядок-беспорядок. Переходы спинового состояния. Структурные изменения при фазовых переходах. Несоразмерные фазы. Кооперативный эффект Яна-Теллера. Механизмы фазовых переходов. Мартенситные превращения. Распад пересыщенного твердого раствора. Жидкокристаллическое состояние. Некристаллическое состояние и фазовые переходы в стеклах. Бездиффузионные превращения. Причины фазовых превращений в твердых телах.

Фазовые равновесия. Диаграммы состояния.

Однокомпонентные системы. Двухкомпонентные системы. Т-Х и Р-Т-Х диаграммы состояния бинарных и тройных систем. Проблемы нестехиометрии фаз на основе двух и трехкомпонентных систем. Термодинамика гетерогенных равновесий. Методы определения границ областей гомогенности фаз на основе двух и трех компонентов.

Реакционная способность твердых тел. Методы получения твердых тел.

Реакционная способность твердых тел. Реакции, включающие только одну твердую фазу. Реакции твердое-газ. Реакции твердое-твердое. Реакции твердое-жидкость. Химия интеркаляции. Экспериментальные методы изучения реакций между твердыми фазами. Факторы, влияющие на реакционную способность. Методы получения кристаллических материалов (керамические, химические, высокого давления, золь-гель, криохимические, (MOCVD и CVD). Рост кристаллов. Выращивание кристаллов из газовой фазы. Выращивание кристаллов из расплава. Кристаллизация из раствора. Теории роста. Нитевидные кристаллы и пленки (механизмы и кинетика роста, свойства).

РАЗДЕЛ III

Взаимосвязь структура - свойство. Основные свойства твердых тел

Скалярные, векторные и тензорные свойства кристаллов. Принципы Неймана и Кюри. Указательная и характеристические поверхности. Термодинамическое описание линейных кристаллофизических эффектов.

Применение теории групп для анализа кристаллофизических эффектов. Квадратичные кристаллофизические эффекты.

1. Электрические свойства. Электропроводность металлов (приближенное время релаксации и механизмы релаксации, плотность электрического тока и плотность потока энергии, термоэлектрические эффекты). Твердые растворы и интерметаллические соединения. Кристаллохимия металлов и интерметаллидов. Электропроводность полупроводников (энергетические зоны, энергетические уровни примесей и дефектов, статистика носителей заряда, подвижность и проводимость, эффекты сильных электрических полей). Кристаллохимия полупроводников. Явление сверхпроводимости (основные свойства идеальных сверхпроводников, феноменология сверхпроводимости, элементы микроскопической теории, низко и высокотемпературная сверхпроводимость). Кристаллохимия низко и высокотемпературных сверхпроводников. Аспекты дизайна материалов. Диэлектрики (поляризация диэлектриков, сегнетоэлектрики, антисегнетоэлектрики, собственная электропроводность, суперионники, структурно-чувствительная проводимость, электропроводность в сильных полях). Кристаллохимия диэлектриков.

2. Магнитные свойства. Магнитное поле в магнетиках. Диамагнетизм и парамагнетизм. Кооперативный магнетизм (феноменология ферро- и антиферромагнетизма, микроскопические представления, энергия анизотропии, магнитострикция, доменная структура ферромагнетиков, процессы перемагничивания). Ферромагнетизм (эффекты сильных магнитных полей, магнитосопротивление). Ферриты. Кристаллохимия магнитных материалов.

3. Оптические свойства. Макроскопическая теория. Оптические свойства металлов (поглощение и дисперсия, аномальный скин-эффект, внешний фотоэлектрический эффект). Оптические свойства полупроводников и диэлектриков (поглощение свободными носителями, фундаментальное поглощение, экситонное поглощение, центры окраски, фотоэлектрические и магнитооптические эффекты). Оптическая индикатриса и ее свойства. Двухлучевое преломление света. Нелинейные оптические эффекты. Люминесценция. Индуцированное излучение (квантовая система с двумя уровнями, квантовая система с тремя и четырьмя уровнями). Взаимодействия мощного когерентного излучения с веществом (оптические нелинейные эффекты, воздействие потоков энергии на вещество). Кристаллохимия лазерных материалов и материалов нелинейной оптики. 4. Химические сенсоры. Физико-химические эффекты. Классификационные признаки и классы химических сенсоров. Термодинамические основы теории химических сенсоров. Адсорбционные процессы, используемые в химической сенсорике.

РАЗДЕЛ IV

Методы исследования состава и строения твердых тел.

1. Радиохимия. Основные виды радиоактивного распада. Ядерные реакции. Закон радиоактивного распада (постоянная распада, период полураспада, статистика радиоактивного распада, применение биномиального распределения, распределения Пуассона и распределения Гаусса для обработка результатов радиохимических экспериментов). Регистрация радиоактивных излучений (калориметрические и химические методы; автордиография; ионизационные камеры и детекторы радиоактивных излучений). Методы получения радиоактивных изотопов (искусственные ядерные реакции, сечение ядерной реакции). Методы меченых атомов и нейтронного активационного анализа.

2. Спектроскопия колебательная (ИК и КР) и резонансная (ядерный магнитный резонанс - ЯМР, ядерный квадрупольный резонанс - ЯКР, парамагнитный резонанс - ПМР). Рентгеновская абсорбционная спектроскопия (EXAFS, XANES). Электронная спектроскопия.

3. Рентгенография. Основы теории дифракции (интерференция волн, уравнение Вульфа-Брэгга, дифракция от кристаллов, условия Лауэ, обратная решетка, интерференционное уравнение и сфера отражения). Интенсивность дифракционного отражения в кинематическом приближении (амплитуда рассеяния, функция электронной плотности, факторы интенсивности). Два этапа структурного анализа. Методы рентгено съемки монокристаллов (метод Лауэ, методы вращения и качания кристалла, методы рентгенгонометра; четырехкружные гониометры) и прикладные задачи, решаемые с помощью этих методов. Определение атомно-кристаллической структуры (синтез Фурье, фазовая проблема; метод проб и ошибок, метод межатомной функции Паттерсона, метод тяжелого атома, прямые методы, метод деформационной электронной плотности). Рентгенография поликристаллических материалов и прикладные задачи, решаемые методом порошка. Структурный анализ поликристаллических образцов (факторы интенсивности; уточнение кристаллической структуры полнопрофильными методами). Электронография (дифракция электронов высоких и низких энергий). Нейтронная дифракция и родственные методы. Задачи, решаемые с помощью нейтронографии и электронографии. Особенности синхротронного излучения. Дифракционное исследование аморфных и стеклообразных твердых тел. Основы динамической теории (две схемы отражения; характеристика кристаллов по степени поглощения; рассмотрение Дарвина, "столик" Дарвина; рассмотрение Лауэ-Эвальда; понятие о дисперсионной поверхности). Интерференционные явления в тонких и поглощающих кристаллах (взаимодействие преломленной и дифрагированной волны, взаимодействие двух преломленных или двух дифрагированных волн; пенделозунг-эффект; аномальная проходимость рентгеновского излучения, эффект Бормана). Основные методы исследования реальной структуры кристаллов (двух и трехкристальная спектрометрия; основные методы рентгеновской топографии: Шульца, Фудживара, Ланга, Бормана, Берга-

Баррета; рентгендифракционные методы). Рентгеновская интерферометрия. Картины муара.

4. Электронная микроскопия (трансмиссионная электронная микроскопия - TEM, сканирующая трансмиссионная микроскопия - STEM, сканирующая электронная микроскопия - SEM, электронная микроскопия высокого разрешения - HREM).

Вопросы к экзамену.

1. Типы химической связи, их характеристика. Влияние типа связи на свойства кристаллов (электропроводность, пластичность, оптические и др.).
2. Ионная модель структуры кристаллов. Ионные радиусы, координационные числа. Энергия решётки.
3. Операции и элементы симметрии кристаллов.
4. Координаты узлов и индексы плоскостей.
5. Геометрические условия дифракции рентгеновских лучей в кристалле.
6. Экспериментальные методы рентгеновской дифракции.
7. Индексы Миллера. Элементарная ячейка, основные векторы трансляции. Трансляционная и точечная симметрия.
8. Решетки Бравэ. Кристаллические классы. Пространственные группы симметрии. Базис.
9. Основные кристаллические структуры. Кубические решетки.
10. Основные кристаллические структуры. Структуры полупроводниковых кристаллов.
11. Математическое описание симметрии кристаллов. Предельные группы симметрии, их соподчинение.
12. Характеристическая симметрия физического явления. Закон Кюри-Шубникова. Принцип суперпозиции симметрии.
13. Полярный и аксиальный вектора. Матрица направляющих косинусов. Определение тензора.
14. Типы дефектов кристаллической решетки.
15. Термодинамически равновесная концентрация дефектов.
16. Виды дислокаций. Вектор Бюргерса.
17. Скольжение и переползание дислокаций.
18. Основные правила составления кристаллохимических уравнений: соотношение мест; создание мест; баланс масс; электронейтральность.
19. Закон действующих масс в применении к кристаллам с дефектами.
20. Зонная диаграмма твердых тел с ионизованными точечными дефектами.
21. Тепловое разупорядочение решетки одноатомного кристалла.
22. Бинарный кристалл-. Термодинамика образования дефектов по Шоттки.
23. Бинарный кристалл. Термодинамика образования дефектов по Френкелю.

24. Высокотемпературное равновесие в твердом теле: кинетика установления равновесия: зависимость равновесной концентрации собственных дефектов от температуры синтеза.
25. Условия синтеза стехиометрического соединения MX.
26. Влияние парциального давления паров элементов на собственное разупорядочение твердого тела.
27. Влияние энергии диссоциации неметалла на собственное разупорядочение твердого тела.
28. Расчет газофазного равновесия при синтезе твердого тела.
29. Электронно-дырочное равновесие.
30. Расчет констант ионизации собственных дефектов.
31. Полное собственное разупорядочение соединения MX: дефекты V_x , n , V_m , p .
32. Основные принципы управления доминирующим разупорядочением твердого тела.
33. Высокотемпературное равновесие примесных соединений: доминирующая роль примесных дефектов в одноатомном кристалле.
34. Высокотемпературное равновесие примесных соединений: доминирующая роль примесных дефектов в бинарном кристалле.
35. Высокотемпературное равновесие примесных соединений: доминирующая роль примесных дефектов в трехкомпонентном кристалле.
36. Влияние давления паров компонента решетки твердого тела на растворимость примеси.
37. Низкотемпературное равновесие точечных дефектов твердого тела.
38. Взаимодействие дефектов в кристаллах: общие положения; ассоциаты.
39. Физико-химические основы управления процессами ассоциации.
40. Равновесие дефектов нестехиометрии в кристаллах трехкомпонентных соединений.
41. Отображение нарушений стехиометрии на T-X- диаграммах.
42. Отображение нарушений стехиометрии на P-X- диаграммах.
43. P-T-X диаграмма состояния кристаллов с дефектами.
44. Стадии твердофазных реакций. Константа скорости реакции как функция нестехиометрии продукта реакции.
45. Влияние посторонних примесей на скорость твердофазной реакции.
46. Влияние протяженных дефектов на кинетику твердофазных процессов.
47. Влияние дефектов на процессы спекания.