

## ПРОГРАММА

вступительных экзаменов в магистратуру по направлению 240100 «Химическая технология»

### Магистерская программа «Химическая технология неорганических веществ и материалов»

#### Дисциплина «Химия твердого тела»

##### 1. Геометрическая кристаллография

Химия твердого тела как самостоятельная дисциплина. Использование сведений из химии твердого тела для описания свойств, внешнего и внутреннего строения твердых тел. Способы получения твердых тел

Кристаллография. Основные понятия и определения. Симметрия кристаллов. Элементы симметрии: центр симметрии, плоскости симметрии, оси симметрии. Определение элементов симметрии. Теоремы сочетания элементов симметрии

Категории сингонии и виды симметрии кристаллических многогранников.

Формы кристаллов. Простые формы и комбинации. Изучение 4 простых форм. Стереографические проекции простых форм.

Законы геометрической кристаллографии. Закон постоянства углов, закон целых чисел. Теоремы к выбору кристаллографических осей. Установка кристаллов. Точные методы определения символов граней. Символы классов симметрии. Международные символы. Символы Шенфлиса. Формы реальных кристаллов. Усложненные формы и типы сростаний кристаллов

##### 2. Кристаллохимия

Понятие о кристаллической структуре и пространственной решетке. Симметрия структур кристаллов. Решетки Бравэ. Закрытые и открытые элементы симметрии

Понятие пространственной группы симметрии. Элементы симметрии бесконечных фигур: плоскости скользящего отражения и винтовые оси. Описание кристаллохимических ячеек. Определение числа атомов в элементарной ячейке. Понятие структурной единицы. Координационное число и координационный многогранник. Символы узлов кристаллохимических ячеек. Понятие базиса решетки.

Описание основных структурных типов кристаллических решеток. Структуры типа  $Aj$ ,  $AX$ ,  $A_2X$ ,  $AX_2$ , шпинели и др. Типы химической связи в кристаллах. Гомодесмические и гетеродесмические структуры. Классификация кристаллических структур по типу химической связи и характеру межъядерных расстояний.

Атомные и ионные радиусы. Устойчивость кристаллических структур.

Энергия кристаллической решетки. Взаимосвязь относительных размеров катионов и анионов. Плотнейшие упаковки в структурах. Многослойные упаковки.

Дефекты кристаллических структур. Типы дефектов в структурах. Стехиометрические дефекты. Точечные дефекты. Дефекты Шоттки и Френкеля. Понятие и типы центров окраски минералов.

Нестехиометрия. Типы нестехиометрии кристаллов. Кластеры - агрегаты дефектов. Антиструктурные дефекты. Протяженные (литейные дефекты). Краевые и винтовые дислокации.

Изоморфизм и полиморфизм. Твердые растворы замещения и внедрения. Изоморфные замещения в структуре природных апатитов. Изоструктурный изоморфизм. Полиморфизм. Полиморфные превращения диоксида кремния, нитрата аммония, оксида алюминия.

### 3. Применение физико-химических методов для исследования структуры твердых тел

Химическое строение твердых веществ. Понятие остова твердого тела. Основные пути получения активных твердых тел. Химия кластеров. Основы классификации и строение

Химия поверхности твердых тел. Поверхностные центры. Бренстодовские и Льюисовские кислотные центры. Твердые кислоты и основания. Кислотно-основные свойства поверхности оксидов алюминия и кальция. Сверхкислоты и сверхоснования.

Основные представления о росте кристаллов. Теории роста кристаллов. Образование минералов и горных пород в земной коре. Краткие сведения о методах выращивания кристаллов. Выращивание из паров, растворов, расплавов. Основные закономерности твердофазных реакций. Химическая сборка. Реакции внедрения и ионного обмена как методы получения новых соединений на основе существующих структур.

Рентгенометрия кристаллов. Формула Вульфа-Брегга. Возможности и сущность рентгеновских методов анализа. Рентгеноструктурный анализ. Расшифровка рентгенограмм.

Термические методы анализа. Термогравиметрический анализ. Устройство деривато графа. Изучение полиморфных превращений и механизмов разложения неорганических соединений. Основы инфракрасной спектроскопии. Спектроскопия ядерного магнитного резонанса

Влияние вида симметрии на физико-химические свойства. Твердых тел. Элементы физико-химической механики. О связи между энергией решетки, удельной поверхностной энергией, твердостью и прочностью ионных кристаллов. Понятие и определение твердости и спайности минералов. Вид симметрии и оптическая активность кристаллов. Оптические свойства кристаллов. Окраска, блеск минералов.

## Дисциплина «Теоретические основы технологии неорганических веществ»

### 1. Термодинамические свойства газов, жидкостей, твердых тел. Уравнение состояния

Уравнение состояния реальных газов. Теплоемкость и теплопроводность газов, жидкостей и твердых тел. Вязкость газов и газовых смесей. Фугитивность. Дроссельный эффект. Диффузия газов и газовых смесей.

### 2. Фазовые равновесия в гетерогенных системах

Основы физико-химического анализа гетерогенных фазовых равновесий в трех- и четырех компонентных системах. Равновесие в четырехкомпонентной системе ( $\text{NaCl-NH}_4\text{HCO}_3\text{-NaHCO}_3\text{-NH}_4\text{Cl}$ ). Физикохимические основы синтеза карбамида. Влияние технологических параметров (температура, давление, химический состав) на выход карбамида. Растворимость газов в жидкостях под давлением.

### 3. Ионный обмен

Сорбция при ионном обмене. Основные свойства ионитов. Особенности термодинамики и кинетики ионного обмена. Использование в химической технологии.

### 4. Экстракция

Избирательное извлечение веществ из смешивающихся растворителей. Методы экстракции. Извлечение кислот и солей из водных растворов. Обезвоживание растворов и кристаллизация.

### 5. Химическое равновесие в гетерогенно-каталитических реакциях

Влияние давления, температуры, химического состава. Расчет равновесия сложных химических реакций.

### 6 Кинетика химических (гетерогенно-каталитических реакций)

Механизмы каталитических реакций. Метод маршрутов. Скорости гетерогенно-каталитических реакций. Оптимальные условия для обратимых гетерогенно-каталитических реакций. Оптимизация температурного режима контактного аппарата. Экономическая оптимизация.

### 7. Массоперенос и теплоперенос в гетерогенно-каталитических реакциях

Процессы теплопереноса и массопереноса в гетерогеннокаталитических

реакциях в изотермических и адиабатических условиях.

## 8. Кинетика некаталитических реакций с участием твердой фазы

Механизм и кинетика реакций. Кинетические уравнения. Кинетика растворения твердых тел в жидкости. Кинетика растворения газа в жидкости. Плазмохимический синтез. Механохимический синтез.