

ФЕДЕРАЛЬНОЕ АГЕНТСТВО ПО ОБРАЗОВАНИЮ
Государственное образовательное учреждение высшего
профессионального образования «Уральский государственный университет им.
А.М. Горького»

ИОНЦ «Нанотехнологии и перспективные материалы»

Химический факультет

Кафедра физической химии

ВОПРОСЫ ДЛЯ САМОКОНТРОЛЯ ПО КУРСУ
**«ДЕФЕКТЫ И СВОЙСТВА ПЕРСПЕКТИВНЫХ ОКСИДНЫХ
МАТЕРИАЛОВ»**

ЕКАТЕРИНБУРГ 2008

1. - Что называется дефектом?
2. - Что такое кристаллическая структура?
3. - Что такое дефектная структура?
4. - Записать схему образования дефектов по Френкелю для кристалла ABO_3 .
5. - Записать схему образования дефектов по Шоттки для кристалла ABO_3 .
6. - Записать константу равновесия реакции образования дефектов по Френкелю для кристалла ABO_3 .
7. - Записать константу равновесия реакции образования дефектов по Шоттки для кристалла ABO_3 .
8. - Написать реакцию собственного электронного разупорядочения для кристалла ABO_3 в предположении квазисвободной природы электронов.
9. - Написать реакцию собственного электронного разупорядочения для кристалла ABO_3 в предположении квазисвободной природы электронов.
10. - Записать константу равновесия реакции собственного электронного разупорядочения для кристалла ABO_3 в предположении локализованной природы электронов.
11. - Записать константу равновесия реакции собственного электронного разупорядочения для кристалла ABO_3 в предположении квазисвободной природы электронов.
12. - Написать все возможные реакции дефектообразования для кристалла ABO_3 .
13. - Записать условие электронейтральности для предыдущего случая.
14. - Применить метод Броуэра для анализа дефектной структуры ABO_3 в области избытка кислорода.
15. - Применить метод Броуэра для анализа дефектной структуры ABO_3 в области точной стехиометрии кислорода.
16. - Применить метод Броуэра для анализа дефектной структуры ABO_3 в области дефицитной нестехиометрии кислорода.

- 17.- Построить диаграмму Броуэра для всей области изменения кислородной нестехиометрии ABO_3 .
- 18.- Вывести точное соотношение для парциального давления кислорода как функции избыточной нестехиометрии кислорода ABO_3 в предположении локализованной природы электронных дефектов.
- 19.- Вывести точное соотношение для парциального давления кислорода как функции дефицитной нестехиометрии кислорода ABO_3 с учетом делокализованной природы электронных дефектов.
- 20.- Вывести соотношение для концентрации локализованной электронной дырки как функции дефицитной нестехиометрии кислорода ABO_3 .
- 21.- Вывести соотношение для концентрации делокализованной электронной дырки как функции избыточной нестехиометрии кислорода ABO_3 .
- 22.- Дать определение удельной электропроводности кристалла.
- 23.- Что такое подвижность носителя заряда в кристалле?
- 24.- От каких факторов зависит подвижность носителя заряда в кристалле?
- 25.- Как зависит подвижность электронного носителя заряда в кристалле от температуры при прыжковом механизме проводимости?
- 26.- Как зависит подвижность электронного носителя заряда в кристалле от температуры при туннельном механизме проводимости?
- 27.- Схематически изобразить зонную диаграмму $LaCoO_3$ при частичном замещении лантана на щелочноземельной металл.
- 28.- Схематически изобразить зонную диаграмму $LaCoO_3$ при частичном замещении кобальта на двухвалентный металл.
- 29.- Схематически изобразить зонную диаграмму $LaCoO_3$ при частичном замещении лантана на щелочноземельной металл и кобальта - на двухвалентный металл.
- 30.- Задачи математического моделирования физико-химических систем.
- 31.- Математическая модель дефектной структуры.

- 32.- Прямая и обратная задача математического моделирования физико-химической системы.
- 33.- Способы определения параметров модели.
- 34.- Что такое верификация предложенной модели физико-химической системы?
- 35.- Какая модель называется адекватной?
36. Записать выражение для деформации кристалла ABO_3 , если он подвергается одновременно термическому и химическому расширению.
37. Что такое радиус иона в кристалле?
38. Как определяются радиусы ионов в кристалле?
39. Чем различные шкалы ионных радиусов в твердых телах отличаются друг от друга?
40. Будет ли кристалл ABO_3 расширяться при постоянной температуре, если электронные дефекты имеют делокализованную природу?