

МИНОБРНАУКИ РОССИИ

**Федеральное государственное автономное образовательное
учреждение высшего образования "Пермский
государственный национальный исследовательский
университет"**

Кафедра физической химии

Авторы-составители: **Плотникова Мария Дмитриевна**

Рабочая программа дисциплины

КРИСТАЛЛОХИМИЯ

Код УМК 64562

Утверждено
Протокол №5
от «13» мая 2021 г.

Пермь, 2021

1. Наименование дисциплины

Кристаллохимия

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина входит в обязательную часть Блока « С.1 » образовательной программы по направлениям подготовки (специальностям):

Специальность: **04.05.01** Фундаментальная и прикладная химия
направленность Фундаментальная и прикладная химия

3. Планируемые результаты обучения по дисциплине

В результате освоения дисциплины **Кристаллохимия** у обучающегося должны быть сформированы следующие компетенции:

04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия (направленность : Фундаментальная и прикладная химия)

ОПК.1 Владеет базовыми знаниями о современной научной картине мира на основе положений, законов и методов математических и естественных наук

Индикаторы

ОПК.1.1 Имеет представление о научной картине мира на основе положений, законов и закономерностей естественных наук

4. Объем и содержание дисциплины

Специальность	04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия (направленность: Фундаментальная и прикладная химия)
форма обучения	очная
№№ триместров, выделенных для изучения дисциплины	7
Объем дисциплины (з.е.)	3
Объем дисциплины (ак.час.)	108
Контактная работа с преподавателем (ак.час.), в том числе:	42
Проведение лекционных занятий	14
Проведение практических занятий, семинаров	28
Самостоятельная работа (ак.час.)	66
Формы текущего контроля	Входное тестирование (1) Итоговое контрольное мероприятие (1) Письменное контрольное мероприятие (4)
Формы промежуточной аттестации	Зачет (7 триместр)

5. Аннотированное описание содержания разделов и тем дисциплины

Кристаллохимия.

Материал, излагаемый в курсе «Кристаллохимия», является базовым для курсов рентгенографии, физико-химического анализа, выполнения соответствующих практикумов и научно-исследовательской работы.

Понятие о кристалле. Законы кристаллографии. Симметрия кристаллов

Кристаллография — наука о кристаллах, их структуре, возникновении и свойствах. Она тесно связана с минералогией, физикой твёрдого тела и химией. Изучается строение, физические свойства кристаллов, условия их образования, разрабатываются методы исследования и определения вещества по кристаллической форме, физическим особенностям и т.п.

Предмет и задачи кристаллохимии. Анизотропия и симметрия физических свойств кристаллов

Предмет и история кристаллохимии. Общие свойства кристаллов. Основной закон кристаллохимии (Гольдшмидт – Капустинский).

Симметрия, симметрическое преобразование. Закон симметрии

Учение о симметрии. Операции симметрии. Группы симметрии. Закрытые операции и элементы симметрии. Поворот и поворот с инверсией. Поворотные и инверсионные оси. Плоскости симметрии. Свойства инверсионных осей. Проекция закрытых элементов симметрии. Взаимосвязь между закрытыми элементами симметрии.

Оси высшего порядка. Точечные группы, категории, семейства. Зеркальные повороты и зеркально-поворотные оси. Символика Шенфлиса.

Открытые операции и элементы симметрии. Винтовой поворот и отражение со скольжением. Винтовые оси и плоскости скользящего отражения.

Сочетания элементов симметрии с трансляциями. Взаимосвязь между элементами симметрии (симметричности). Пространственные группы.

Кристаллографические проекции. Принципы проектирования.

Кристаллографические проекции. Классификация проекций и принципы проектирования.

Стереографические и гномостереографические проекции. Сетка Вульфа. Проектирование кристаллов.

Геометрическая теория структуры кристалла. Кристаллографические символы

Кристаллическая структура. Трансляция. Группы трансляций. Кристаллическая решетка, базис.

Параллелограммы и параллелепипеды повторяемости. Индексы узлов, узловых рядов и плоскостей.

Межплоскостные расстояния. Вычисление параметров решетки.

Кристаллографические системы координат. Сингонии

Кристаллическая структура. Трансляция. Группы трансляций. Кристаллическая решетка, базис.

Параллелограммы и параллелепипеды повторяемости.

Симметрия кристаллической решетки. Голоэдрические группы. Особые направления в решетке.

Кристаллографические системы координат.

правила выбора.

Метод кристаллографического индцирования

Сингония. Кристаллографические точечные группы. Способы размещения узлов в элементарной ячейке.

Типы Бравэ. Основные структурные типы кубических решеток. Число формульных единиц в

элементарной ячейке. Индексы узлов, узловых рядов и плоскостей. Межплоскостные расстояния.

Вычисление параметров решетки.

Основные понятия кристаллохимии

Кристаллохимия — наука о кристаллических структурах и их связи с природой вещества. В разделе изучается пространственное расположение и химическая связь атомов в кристаллах, а также зависимость физических и химических свойств кристаллических веществ от их строения.

Описание и систематика кристаллических структур. Простейшие структурные типы

Кристаллохимия простых веществ. Металлы, основные структурные типы и аномальные структуры. Неметаллы.

Простейшие структуры соединений типа AB_2 и A_2B

Бинарные соединения. Структуры в рамках теории шаровых кладок и упаковок. Ажурные структурные мотивы (АСМ): структуры островные, цепочечные и ленточные, слоистые и координационные. Трехэлементные соединения. Перовскит. Сегнетоэлектрики. ВТСП. Шпинели (нормальные и обращенные). Коэффициент обращения в шпинелях. Ферриты.

Теория плотнейших упаковок

Плотнейшие шаровые упаковки (ПШУ). Мотивы упаковки: гексагональный и кубический. Пустоты в ПШУ: тетраэдрические и октаэдрические. Многослойные ПШУ. Слоистость ПШУ. Способы записи ПШУ. Шаровые кладки и пустоты в них.

Химические связи в кристаллах

Химические связи в кристаллах: ковалентные, ионные, металлические, вандерваальсовы. Координационное число и координационный полиэдр. Правило Юм-Розери. Гомо- и гетеродесмические структуры. Типы гетеродесмических структур: островные, цепочечные и ленточные, слоистые, каркасные. Символика записи координационных структур и фрагментов.

Изоструктурность. Изоморфизм и полиморфизм. Политипия

Изоморфизм и полиморфизм (Митчерлих). Аллотропия. Представление о термодинамической теории фазовых равновесий. Фазовые превращения в кристаллических системах. Фазы переменного состава. Твердые растворы, типы: замещения, внедрения, вычитания. Параметры решетки твердых растворов. Правило Вегарда. Условия проявления изоморфизма. Правило Руайе – Юм-Розери. Антиизоморфизм. Морфотропия и автоморфотропия. Политипия. Изотопная морфотропия. Изовалентный и гетеровалентный изоморфизм. Закон диагональных рядов Ферсмана. Разрыв смешиваемости в гетеровалентных изоморфных системах (Хлопин – Никитин). Изоморфизм с заполнением пространства. Фазы внедрения.

6. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

Освоение дисциплины требует систематического изучения всех тем в той последовательности, в какой они указаны в рабочей программе.

Основными видами учебной работы являются аудиторские занятия. Их цель - расширить базовые знания обучающихся по осваиваемой дисциплине и систему теоретических ориентиров для последующего более глубокого освоения программного материала в ходе самостоятельной работы. Обучающемуся важно помнить, что контактная работа с преподавателем эффективно помогает ему овладеть программным материалом благодаря расстановке необходимых акцентов и удержанию внимания интонационными модуляциями голоса, а также подключением аудио-визуального механизма восприятия информации.

Самостоятельная работа преследует следующие цели:

- закрепление и совершенствование теоретических знаний, полученных на лекционных занятиях;
- формирование навыков подготовки текстовой составляющей информации учебного и научного назначения для размещения в различных информационных системах;
- совершенствование навыков поиска научных публикаций и образовательных ресурсов, размещенных в сети Интернет;
- самоконтроль освоения программного материала.

Обучающемуся необходимо помнить, что результаты самостоятельной работы контролируются преподавателем во время проведения мероприятий текущего контроля и учитываются при промежуточной аттестации.

Обучающимся с ОВЗ и инвалидов предоставляется возможность выбора форм проведения мероприятий текущего контроля, альтернативных формам, предусмотренным рабочей программой дисциплины. Предусматривается возможность увеличения в пределах 1 академического часа времени, отводимого на выполнение контрольных мероприятий.

Процедура оценивания результатов обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья по дисциплине предусматривает предоставление информации в формах, адаптированных к ограничениям их здоровья и восприятия информации.

При проведении текущего контроля применяются оценочные средства, обеспечивающие передачу информации, от обучающегося к преподавателю, с учетом психофизиологических особенностей здоровья обучающихся.

7. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине

При самостоятельной работе обучающимся следует использовать:

- конспекты лекций;
- литературу из перечня основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля);
- текст лекций на электронных носителях;
- ресурсы информационно-телекоммуникационной сети "Интернет", необходимые для освоения дисциплины;
- лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение из перечня информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине;
- методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.

8. Перечень основной и дополнительной учебной литературы

Основная:

1. Кристаллография: зарождение, рост и морфология кристаллов : учебное пособие для бакалавриата и магистратуры / Н. И. Леонюк, Е. В. Копорулина, Е. А. Волкова, В. В. Мальцев. — Москва : Издательство Юрайт, 2019. — 152 с. — (Бакалавр и магистр. Академический курс). — ISBN 978-5-534-04738-7. — Текст : электронный // ЭБС Юрайт [сайт]. <https://www.urait.ru/bcode/438395>
2. Егоров-Тисменко Ю. К. Кристаллография и кристаллохимия: учебник для студентов вузов, обучающихся по специальности "Геология"/Ю. К. Егоров-Тисменко.-Москва:Книжный дом "Университет",2005, ISBN 5-98227-095-4.-592.-Библиогр.: с. 583-585
3. Урусов, В. С. Кристаллохимия. Краткий курс : учебник / В. С. Урусов, Н. Н. Ерёмин. — Москва : Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, 2010. — 256 с. — ISBN 978-5-211-05497-4. — Текст : электронный // Электронно-библиотечная система IPR BOOKS : [сайт]. <http://www.iprbookshop.ru/13343>

Дополнительная:

1. Рентгеноструктурный анализ веществ : методические указания к лабораторной работе / И. А. Коваленко, С. В. Бахтин, И. В. Богомолов, Е. В. Кузнецова. — Липецк : Липецкий государственный технический университет, ЭБС АСВ, 2010. — 24 с. — ISBN 2227-8397. — Текст : электронный // Электронно-библиотечная система IPR BOOKS : [сайт]. <http://www.iprbookshop.ru/22926>
2. Минералогия с основами кристаллографии : учебное пособие для академического бакалавриата / В. А. Буланов, А. И. Сизых, А. А. Белоголов ; под научной редакцией Ф. А. Летникова. — 2-е изд., перераб. и доп. — Москва : Издательство Юрайт, 2019. — 230 с. — (Бакалавр. Академический курс). — ISBN 978-5-534-07310-2. — Текст : электронный // ЭБС Юрайт [сайт]. <https://www.urait.ru/bcode/438854>

9. Перечень ресурсов сети Интернет, необходимых для освоения дисциплины

При освоении дисциплины использование ресурсов сети Интернет не предусмотрено.

10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине

Образовательный процесс по дисциплине **Кристаллохимия** предполагает использование следующего программного обеспечения и информационных справочных систем:

Перечень используемых информационных технологий: презентационные материалы (слайды по темам лекционных и практических занятий);

доступ в режиме on-line в Электронную библиотечную систему (ЭБС);

доступ в электронную информационно-образовательную среду университета;

тестирование

При освоении материала и выполнения заданий по дисциплине рекомендуется использование материалов, размещенных в Личных кабинетах обучающихся ЕТИС ПГНИУ (student.psu.ru).

При организации дистанционной работы и проведении занятий в режиме онлайн могут использоваться:

система видеоконференцсвязи на основе платформы BigBlueButton (<https://bigbluebutton.org/>).

система LMS Moodle (<http://e-learn.psu.ru/>), которая поддерживает возможность использования текстовых материалов и презентаций, аудио- и видеоконтент, а так же тесты, проверяемые задания, задания для совместной работы.

система тестирования Indigo (<https://indigotech.ru/>).

11. Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине

1. Лекционные занятия: Аудитория, оснащенная презентационной техникой (проектор, экран, компьютер/ноутбук) с соответствующим программным обеспечением, меловой (и) или маркерной доской.

2. Занятий семинарского типа (семинары, практические занятия): Аудитория, оснащенная презентационной техникой (проектор, экран, компьютер/ноутбук) с соответствующим программным обеспечением, меловой (и) или маркерной доской.

3. Для групповых (индивидуальных) консультаций - аудитория, оснащенная презентационной техникой (проектор, экран, компьютер/ноутбук) с соответствующим программным обеспечением, меловой (и) или маркерной доской.

4. Для проведения текущего контроля - аудитория, оснащенная меловой (и) или маркерной доской.

5. Аудитория для самостоятельной работы, оснащенная компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет», обеспеченная доступом в электронную информационно-образовательную среду университета.

Помещения Научной библиотеки ПГНИУ

Помещения научной библиотеки ПГНИУ для обеспечения самостоятельной работы обучающихся:

1. Научно-библиографический отдел, корп.1, ауд. 142. Оборудован 3 персональными компьютера с доступом к локальной и глобальной компьютерным сетям.

2. Читальный зал гуманитарной литературы, корп. 2, ауд. 418. Оборудован 7 персональными компьютерами с доступом к локальной и глобальной компьютерным сетям.

3. Читальный зал естественной литературы, корп.6, ауд. 107а. Оборудован 5 персональными

компьютерами с доступом к локальной и глобальной компьютерным сетям.

4. Отдел иностранной литературы, корп.2 ауд. 207. Оборудован 1 персональным компьютером с доступом к локальной и глобальной компьютерным сетям.

5. Библиотека юридического факультета, корп.9, ауд. 4. Оборудована 11 персональными компьютерами с доступом к локальной и глобальной компьютерным сетям.

6. Читальный зал географического факультета, корп.8, ауд. 419. Оборудован 6 персональными компьютерами с доступом к локальной и глобальной компьютерным сетям.

Все компьютеры, установленные в помещениях научной библиотеки, оснащены следующим программным обеспечением:

Операционная система ALT Linux;

Офисный пакет Libreoffice.

Справочно-правовая система «КонсультантПлюс»

**Фонды оценочных средств для аттестации по дисциплине
Кристаллохимия**

**Планируемые результаты обучения по дисциплине для формирования компетенции.
Индикаторы и критерии их оценивания**

ОПК.1

Владеет базовыми знаниями о современной научной картине мира на основе положений, законов и методов математических и естественных наук

Компетенция (индикатор)	Планируемые результаты обучения	Критерии оценивания результатов обучения
<p>ОПК.1.1 Имеет представление о научной картине мира на основе положений, законов и закономерностей естественных наук</p>	<p>Знать: основные правила и законы геометрической кристаллографии; Уметь: применять законы кристаллографии для описания реальных кристаллических структур различного уровня сложности (уметь правильно выбирать системы координат, расположение атомов в кристаллических структурах, определять индексы плоскостей и направлений); Владеть: навыком описания параметров кристаллической структуры на основании данных о взаимном расположении атомов.</p>	<p align="center">Неудовлетворител</p> <p>Не знает основные правила и законы геометрической кристаллографии; не умеет применять законы кристаллографии для описания реальных кристаллических структур различного уровня сложности (не умеет правильно выбирать системы координат, расположение атомов в кристаллических структурах, определять индексы плоскостей и направлений). Не владеет навыками расчетов кристаллохимических параметров вещества, навыками определения структурных единиц кристалла и определения критериев устойчивости структуры.</p> <p align="center">Удовлетворительн</p> <p>Имеет общие, но не структурированные знания об основных правилах и законах геометрической кристаллографии; частично умеет применять законы кристаллографии для описания реальных кристаллических структур различного уровня сложности (частично умеет правильно выбирать системы координат, расположение атомов в кристаллических структурах, определять индексы плоскостей и направлений). В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы применение навыков расчета кристаллохимических параметров вещества, навыков определения структурных единиц кристалла и определения критериев устойчивости структуры.</p> <p align="center">Хорошо</p> <p>Имеет сформированные, но содержащие отдельные пробелы знания об основных</p>

Компетенция (индикатор)	Планируемые результаты обучения	Критерии оценивания результатов обучения
		<p style="text-align: center;">Хорошо</p> <p>правилах и законах геометрической кристаллографии; в целом успешно, но с некоторыми пробелами умеет применять законы кристаллографии для описания реальных кристаллических структур различного уровня сложности (умеет правильно выбирать системы координат, расположение атомов в кристаллических структурах, определять индексы плоскостей и направлений). Фрагментарное применение навыков расчета кристаллохимических параметров вещества, навыков определения структурных единиц кристалла и определения критериев устойчивости структуры.</p> <p style="text-align: center;">Отлично</p> <p>Имеет сформированные систематические знания об основных правилах и законах геометрической кристаллографии; успешно применяет законы кристаллографии для описания реальных кристаллических структур различного уровня сложности (умеет правильно выбирать системы координат, расположение атомов в кристаллических структурах, определять индексы плоскостей и направлений). Владеет навыками расчетов кристаллохимических параметров вещества, навыками определения структурных единиц кристалла и определения критериев устойчивости структуры.</p>

Оценочные средства текущего контроля и промежуточной аттестации

Схема доставки : 14/0/28/66зачет

Вид мероприятия промежуточной аттестации : Зачет

Способ проведения мероприятия промежуточной аттестации : Оценка по дисциплине в рамках промежуточной аттестации определяется на основе баллов, набранных обучающимся на контрольных мероприятиях, проводимых в течение учебного периода.

Максимальное количество баллов : 100

Конвертация баллов в отметки

«отлично» - от 81 до 100

«хорошо» - от 61 до 80

«удовлетворительно» - от 49 до 60

«неудовлетворительно» / «незачтено» менее 49 балла

Компетенция (индикатор)	Мероприятие текущего контроля	Контролируемые элементы результатов обучения
Входной контроль	Предмет и задачи кристаллохимии. Анизотропия и симметрия физических свойств кристаллов Входное тестирование	Знать и уметь изображать основные геометрические фигуры на плоскости и в пространстве. Знать геометрическую структуру простейших молекул (вода, метан и т.д.). Знать основные законы и понятия физической химии.
ОПК.1.1 Имеет представление о научной картине мира на основе положений, законов и закономерностей естественных наук	Симметрия, симметрическое преобразование. Закон симметрии Письменное контрольное мероприятие	Знать элементы симметрии, знать и успешно применять основные законы теории симметрии
ОПК.1.1 Имеет представление о научной картине мира на основе положений, законов и закономерностей естественных наук	Кристаллографические проекции. Принципы проектирования. Письменное контрольное мероприятие	Знать принципы построения стереографических проекций кристаллических многогранников. Уметь решать задачи с помощью сетки Вульфа.
ОПК.1.1 Имеет представление о научной картине мира на основе положений, законов и закономерностей естественных наук	Метод кристаллографического индентирования Письменное контрольное мероприятие	Знать правила симметрических преобразований кристаллических многогранников. Уметь применять эти правила при описании конкретных многогранников.

Компетенция (индикатор)	Мероприятие текущего контроля	Контролируемые элементы результатов обучения
ОПК.1.1 Имеет представление о научной картине мира на основе положений, законов и закономерностей естественных наук	Теория плотнейших упаковок Письменное контрольное мероприятие	Знать правила кристаллографического индцирования. Уметь описывать и систематизировать основные типы кристаллических структур. Владеть навыками расчета базиса и координационного числа кристаллической структуры.
ОПК.1.1 Имеет представление о научной картине мира на основе положений, законов и закономерностей естественных наук	Изоструктурность. Изоморфизм и полиморфизм. Политипия Итоговое контрольное мероприятие	Знать основные понятия структурной кристаллографии и кристаллохимии. Уметь описывать любую кристаллическую структуру с точки зрения кристаллохимии. Владеть навыками расчета основных кристаллографических параметров.

Спецификация мероприятий текущего контроля

Предмет и задачи кристаллохимии. Анизотропия и симметрия физических свойств кристаллов

Продолжительность проведения мероприятия промежуточной аттестации: **1 часа**

Условия проведения мероприятия: **в часы аудиторной работы**

Максимальный балл, выставляемый за мероприятие промежуточной аттестации: **0**

Проходной балл: **0**

Показатели оценивания	Баллы
Задания с генерацией ответа (по 2 балла за каждый правильный ответ)	10
Тестовые задания с выбором ответа (по 1 баллу за каждый правильный ответ)	4

Симметрия, симметрическое преобразование. Закон симметрии

Продолжительность проведения мероприятия промежуточной аттестации: **1 часа**

Условия проведения мероприятия: **в часы аудиторной работы**

Максимальный балл, выставляемый за мероприятие промежуточной аттестации: **15**

Проходной балл: **7**

Показатели оценивания	Баллы
Знать и правильно применять при решении задач теоремы о сочетании элементов симметрии	7
Правильное построение кристаллографической проекции и изображение элементов симметрии на ней	4
Правильно определена сингония кристалла, изображенного на кристаллографической проекции	3
Правильно определена вид симметрии кристалла, изображенного на кристаллографической проекции	1

Кристаллографические проекции. Принципы проектирования.

Продолжительность проведения мероприятия промежуточной аттестации: **1 часа**

Условия проведения мероприятия: **в часы аудиторной работы**

Максимальный балл, выставляемый за мероприятие промежуточной аттестации: **10**

Проходной балл: **5**

Показатели оценивания	Баллы
Построить стереографические проекции направления и плоскости заданные сферическими координатами	4
Найти полюс дуги большого круга	2
Построить стереографическую проекцию дуги малого круга	2
Измерить угловое расстояние между двумя направлениями	2

Метод кристаллографического индцирования

Продолжительность проведения мероприятия промежуточной аттестации: **1 часа**

Условия проведения мероприятия: **в часы аудиторной работы**

Максимальный балл, выставляемый за мероприятие промежуточной аттестации: **15**

Проходной балл: **7**

Показатели оценивания	Баллы
Правильное определение всех элементов симметрии кристаллического многогранника. Изображение их на рисунке.	7
Определение простой формы кристаллического многогранника	3
Определение формулы симметрии кристаллического многогранника	3
Определение сингонии кристаллического многогранника	2

Теория плотнейших упаковок

Продолжительность проведения мероприятия промежуточной аттестации: **1 часа**

Условия проведения мероприятия: **в часы аудиторной работы**

Максимальный балл, выставляемый за мероприятие промежуточной аттестации: **30**

Проходной балл: **15**

Показатели оценивания	Баллы
Определение базиса кристаллической структуры	7
Расчет количества атомов, приходящихся на элементарную ячейку кристаллического вещества. Определение его кристаллографической формулы.	6
Определение координационного числа каждого сорта атомов	5
Правильное определение индексов плоскостей	4
Правильное изображение направлений на рисунке в соответствии с индексами	3
Расчет кристаллографической плотности вещества.	3
Определение координационного многогранника каждого сорта атомов	2

Изоструктурность. Изоморфизм и полиморфизм. Политипия

Продолжительность проведения мероприятия промежуточной аттестации: **2 часа**

Условия проведения мероприятия: **в часы аудиторной работы**

Максимальный балл, выставляемый за мероприятие промежуточной аттестации: **30**

Проходной балл: **15**

Показатели оценивания	Баллы
Задания с выбором ответа из предложенных вариантов (по 1 баллу за каждый правильный ответ)	16
Задания с развернутым ответом (по 2 балла за каждый правильный ответ)	14