

**МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ИНГУШСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

Кафедра химии

УТВЕРЖДАЮ

Проректор по УР и КО

_____ Льянова С.А.

« 29 » _____ июня _____ 2023 г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
КРИСТАЛЛОХИМИЯ**

Факультет: химико-биологический

Направление подготовки /специальность: 04.03.01. Химия

Программа: бакалавриат

Квалификация (степень) выпускника: бакалавр

Форма обучения: очная

**МАГАС
2023**

1. ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Целями освоения дисциплины «Кристаллохимия» являются:

- изучение фундаментальных понятий, представлений и физико-химических моделей, используемых при описании структуры химических соединений в кристаллическом состоянии и в практическом использовании полученных знаний для решения конкретных научных и технических задач;
- формирование системных знаний, позволяющих глубже понять явления природы, теоретически осмыслить широкий круг химических явлений;
- развитие у студентов знаний и умений в решении практических вопросов в области кристаллохимии;
- развитие научного мировоззрения студентов.

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОПОП ВО

Дисциплина «Кристаллохимия» относится к части, формируемой участниками образовательных отношений; и изучается в 5 семестре.

Дисциплина «Кристаллохимия» представляет собой теоретическую основу для изучения последующих курсов химического профиля – физической химии, коллоидной химии, химической технологии, физических методов исследования.

Таблица 2.1.

Связь дисциплины «Кристаллохимия» с предшествующими дисциплинами и сроки их изучения

Код дисциплины	Дисциплины, предшествующие дисциплине «Кристаллохимия»	Семестр
Б1.О.12	Математика	1,2
Б1.О.16	Физика	1,2
Б1.О.15	Информатика	1,2
Б1.О.06	Неорганическая химия	2,3
Б1.В.06	Квантовая химия	4

Таблица 2.2.

Связь дисциплины «Кристаллохимия» с последующими дисциплинами и сроки их изучения

Код дисциплины	Дисциплины, следующие за дисциплиной «Кристаллохимия»	Семестр
Б1.О.07	Органическая химия	6,7
Б1.О.08	Физическая химия	6,7

Б1.О.28	Физические методы исследования	6
Б1.В.05	Химическая технология	8
Б1.В.ДВ.03.01	Коллоидная химия	8

В результате освоения дисциплины обучающийся должен:

Знать:

- основы дифракционного метода исследования кристаллов;
- фундаментальные понятия, терминологию и символику кристаллохимии;
- общие принципы характеристики и интерпретации кристаллических структур;
- систематическую кристаллохимию;
- начала обобщенной кристаллохимии,

Уметь:

- использовать первичную кристаллоструктурную информацию для определения основных особенностей строения кристаллических веществ;
- решать задачи по кристаллохимии;
- осуществлять поиск необходимой кристаллоструктурной информации;
- самостоятельно формулировать задачу физико-химического исследования в химических системах;
- пользуясь полученными знаниями, уметь выбирать оптимальные пути и методы решения поставленных задач;
- проводить физико-химические исследования систем и процессов с использованием современных методов и приборов ФХМА;
- проводить физико-химические расчеты;
- пользоваться справочной литературой;
- графически отображать полученные зависимости;
- анализировать и обсуждать результаты физико-химических исследований;
- вести научную дискуссию.

Владеть:

- навыками организационных и технологических приемов в сфере своей профессиональной деятельности в области изучения кристаллов и твердых веществ.

3. КОМПЕТЕНЦИИ ОБУЧАЮЩЕГОСЯ, ФОРМИРУЕМЫЕ В РЕЗУЛЬТАТЕ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование элементов следующих компетенций в соответствии с ФГОС ВО и ОПОП ВО по данному направлению подготовки:

Код компетенции	Наименование компетенции	Индикатор достижения компетенции	В результате освоения дисциплины обучающийся должен:
<i>Универсальные компетенции и индикаторы их достижения</i>			
УК-1	Способен осуществлять поиск, критический анализ и	УК-1.1. Анализирует задачу, выделяя ее базовые составляющие	Знать: - понятие и классификация систем;

	синтез информации, применять системный подход для решения поставленных задач	щие;	<ul style="list-style-type: none"> - структуру и закономерности функционирования систем; - особенности системного подхода в научном познании; - понятие о системе, её целях, задачах и общих принципах; - основные технологии поиска и сбора информации; - форматы представления информации в компьютере; - правила использования средств связи; - информационно-поисковые системы и базы данных; - технологию осуществления поиска информации; - технологию систематизации полученной информации; - способы статистической обработки данных, представленных в различных измерительных шкалах и анализ полученных результатов; - виды и формы работы с педагогической и научной литературой; - требования к оформлению библиографии (списка литературы). <p>Уметь:</p> <ul style="list-style-type: none"> - работать с информацией, представленной в различной форме; - обрабатывать данные средствами стандартного программного обеспечения; - синтезировать информацию, представленную в различных источниках; - выбирать источники информации, адекватные поставленным задачам и соответствующие научному мировоззрению; - осуществлять поиск информации; - интерпретировать и ранжировать информацию, требуемую для решения поставленной задачи. <p>Владеть:</p> <ul style="list-style-type: none"> - персональным компьютером и поисковыми сервисами; - методиками аналитико-синтетической обработки информации из различных информационно-поисковых систем (предметизация, аннотирование, реферирование).
		УК-1.2. Определяет, интерпретирует и ранжирует информацию, требуемую для решения поставленной задачи;	
		УК-1.3. Осуществляет поиск информации для решения поставленной задачи по различным типам запросов;	
		УК-1.4. При обработке информации отличает факты от мнений, интерпретаций, оценок, формирует собственные мнения и суждения, аргументирует свои выводы и точку зрения;	
		УК-1.5 Рассматривает и предлагает возможные варианты решения поставленной задачи, оценивая их достоинства и недостатки.	

<i>Профессиональные компетенции и индикаторы их достижения</i>			
ПК-2	Способен использовать современную аппаратуру при проведении научных исследований.	ПК-2.1. Знает технические данные современной химической аппаратуры, с целью получения достоверных результатов научных исследований	Знать: <ul style="list-style-type: none"> - принципы работы современных аналитических приборов; - теоретические основы химических, физических, физико-химических методов анализа; - принципы работы современных аналитических приборов, используемых при проведении собственных научных исследований. Уметь: <ul style="list-style-type: none"> - получать и интерпретировать аналитический сигнал при проведении анализа; - проводить отбор и подготовку проб к анализу, применять современную аппаратуру при анализе сложных по химическому составу объектов, осуществлять математическую обработку полученных экспериментальных данных, интерпретировать полученные результаты исследований; - использовать инструментальные методы анализа при проведении научных исследований. Владеть: <ul style="list-style-type: none"> - навыками работы на современном аналитическом оборудовании; - навыками работы на современной аппаратуре при проведении химических экспериментов; - методами регистрации обработки результатов химических экспериментов навыками работы на современной аппаратуре при проведении собственных научных исследований.
		ПК-2.2. Умеет использовать современную аппаратуру при проведении научных исследований	
		ПК-2.3. Владеет базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований.	

4. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Таблица 4.1.

Объем дисциплины и виды учебной работы

Вид учебной работы	Всего часов	5 семестр
Общая трудоемкость дисциплины	108	108

Аудиторные занятия	72	72
Лекции	36	36
Лабораторные занятия	36	36
Самостоятельная работа студентов (СРС)	36	36

**5. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ, СТРУКТУРИРОВАННОЕ ПО ТЕМАМ
(РАЗДЕЛАМ) С УКАЗАНИЕМ ОТВЕДЕННОГО НА НИХ КОЛИЧЕСТВА
АКАДЕМИЧЕСКИХ ИЛИ АСТРОНОМИЧЕСКИХ ЧАСОВ И ВИДОВ УЧЕБНЫХ ЗАНЯТИЙ**

Таблица 5.1.

Структура и содержание дисциплины

Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 зачетных единиц, 144 часа.

	Раздел дисциплины	Семестр		Виды учебной работы (час)				Формы контроля
				Лек-ции	Лабо-ратор-ные работы	Самос-тояте-льные работы		
1.	Модуль 1							
1.1.	Учение о симметрии	5		6	6	6		Задачи
1.2.	Симметрия кристаллической решетки	5		6	6	6		Опрос, задачи
1.3.	Рентенография	5		4	4	4		
2.	Модуль 2							
2.1.	Химические связи в кристаллах	5		2	2	2		Опрос
2.2.	Шаровые кладки и упаковки	5		2	2	2		Опрос
2.3.	Кристаллохимические радиусы	5		4	4	4		Опрос
2.4.	Изоморфизм и полиморфизм	5		4	4	4		Опрос
3.	Модуль 3							
3.1.	Кристаллохимия простых веществ	5		4	4	4		Опрос
3.2.	Шаровые кладки и упаковки	5		4	4	4		Опрос
	Итого:			36	36	36		

5.2. Содержание дисциплины «Кристаллохимия»

Введение

1. Предмет и задачи кристаллохимии. Основные методы анализа и способы моделирования кристаллических структур
2. Основные аспекты кристаллохимии
3. Многообразие кристаллических структур

Общая кристаллохимия. Симметрия молекул.

1. Операции и элементы симметрии. Теоремы о сочетании закрытых элементов симметрии
2. Точечные группы симметрии. Международные символы и символы Шенфлиса
3. Системы эквивалентных позиций. Изогоны и изоэдры.
4. Единичные и полярные направления. Полярность и хиральность молекул

Симметрия кристаллов

1. Группы трансляций. Строение кристаллов. Симметрия решеток. Типы решеток. Кристаллографические системы координат. Элементарная ячейка
2. Открытые операции и элементы симметрии. Элементы симметричности. Пространственные группы симметрии.

Описание и систематика кристаллических структур

1. Число формульных единиц и рентгеновская плотность. Межатомные расстояния, валентные и торсионные углы. Среднеквадратичные плоскости. Координационное число и координационный полиэдр.
2. Структурные типы и изоструктурность. Простейшие структурные типы. Методы изображения и описания структур.
3. Семейства кристаллических структур. Основные, цепочечные, слоистые, каркасные и координационные структуры. Структурные классы.

Химические связи в кристаллах

1. Общая теория межатомных взаимодействий. Типы химической связи
2. Межатомные расстояния и прочность связи.
3. Систематика кристаллических структур по типу связи. Гомо- и гетеродесмические структуры.

Кристаллохимические радиусы атомов

1. Физический смысл, типы радиусов
2. Модели молекул. Принцип плотной упаковки

Энергия кристаллохимических структур

1. Основные термодинамические соотношения. Энергия ионных, ковалентных, металлических структур
2. Энергия молекулярных и других кристаллов.
3. Расчет оптимальной структуры кристаллов.

Зависимость свойств кристаллохимических веществ от их структуры

1. Описание физических свойств с помощью тензоров.
2. Зависимость электрических свойств от симметрии
3. Двулучепреломление, оптическая активность и энантиморфизм кристаллов.
4. Полупроводники, сверхпроводники, сегнетоэлектрики, ферриты, твердые электролиты. Проводимость органических молекулярных комплексов. Топохимические реакции в твердых телах.

Реальные кристаллы

1. Точечные дефекты. Дислокации. Мозаичность. Структура поверхности и твердых пленок.
2. Влияние дефектов кристаллов на их свойства. Доменные структуры.

Систематическая кристаллохимия. Структуры простых веществ

1. Основные структурные типы металлов (медь, магний и др.). Аномальные кристаллические структуры.
2. Структуры простых веществ – неметаллов.
3. Координация атомов. Изменение характера структуры по группам периодической системы.

Структуры бинарных соединений

1. Структуры интерметаллических соединений (AB). Семейства меди, магния, α -железа.
2. Структуры соединений металлов с неметаллами (AX).
3. Шаровые упаковки и кладки. Ажурные структуры. Факторы, определяющие выбор структурного типа. Роль химической связи.
4. Особенности координации переходных и непереходных металлов. Кластеры.
5. Структуры соединений металлов (XY)

Кристаллохимия силикатов

1. Основные черты строения силикатов. Классификация структур. Зависимость физических свойств от строения.
2. Изовалентный и гетеровалентный изоморфизм в силикатах.
3. Природные и синтетические цеолиты, их структура и применение. Пентасилы.

Органическая кристаллохимия

1. Стереохимия органических молекул. Конформации. Симметрия. Конформационный полиморфизм.
2. Теория плотной упаковки молекул. Основные межмолекулярные контакты. Координационное число. Неуплотненные и плотнейшие молекулярные упаковки.
3. Специфические межмолекулярные контакты. Межмолекулярные водородные связи
4. Энергия межмолекулярного взаимодействия. Структурные подклассы и анизотропия свойств.
5. Термодинамические функции органического кристалла.
6. Структуры полимеров и биополимеров. Белки и полинуклеотиды.

6. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

В процессе обучения используются традиционные образовательные технологии (лекции, семинары, практические работы) и активные инновационные образовательные технологии

1. Семинар в диалоговом режиме применяется в основном при обсуждении выступлений студентов с докладами (рефератами)
2. Групповой разбор результатов контрольных работ
3. Встречи с сотрудниками и руководителями профильных лабораторий и предприятий - потенциальными работодателями выпускников.

В целом при изучении курса активные и интерактивные формы проведения занятий составляют не менее 30% аудиторных занятий.

7. ПЕРЕЧЕНЬ УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ ОБУЧАЮЩИХСЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

7.1. Перечень-учебно-методического обеспечения для обучающихся по дисциплине:

- 1..М.П.Шаскольская. Кристаллография. М.: Высшая школа, 1984.
2. Бокий Г.Б. Кристаллохимия. М.: Наука, 1971.
3. Зоркий П.М. Симметрия молекул и кристаллических структур. М.: МГУ, 1986
4. Зоркий П.М. Задачник по кристаллохимии и кристаллографии. М.: МГУ, 1981.

7.2. Указания для обучающихся по освоению дисциплины

Таблица 7.1.

Содержание самостоятельной работы обучающихся

<i>Номер раздела (темы)</i>	<i>Темы/вопросы, выносимые на самостоятельное изучение</i>	<i>Кол-во часов</i>	<i>Формы работы</i>
1.	Основы рентгеноструктурного анализа.	8	опрос
2.	Динамика кристаллохимических структу.	6	опрос
3.	Изоморфизм и полиморфизм.	6	опрос
4.	Важнейшие структуры тернарных соединений.	8	опрос
5.	Строение конденсированных фаз с частичной упорядоченностью.	8	опрос

8. ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА ДЛЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ УСПЕВАЕМОСТИ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

Примерные вопросы для собеседования

1. История развития кристаллохимии.
2. Предмет и задачи кристаллохимии. Взаимосвязь состава, строения и свойств химических веществ.
3. Способы и варианты классификации кристаллов: по размерам, симметрии, структуре.
4. Классификация по симметрии: категории, сингонии, классы, группы.
5. Понятие о кристаллической решетке и атомной структуре кристаллического вещества.
6. Понятие об элементарной ячейке. Типы ячеек по симметрии. Многовариантность выбора ячеек, примитивные и непримитивные ячейки.
7. Правила однозначного выбора элементарных ячеек. 14 типов решеток Бравэ.

8. Основные элементы кристаллической решетки: узлы, ряды, плоскости, их характеристики. Кристаллографические плоскости как важнейший элемент решетки.
9. Межплоскостные расстояния, ретикулярная плотность, закономерности роста граней.
10. Квадратичные формы. Вывод для прямоугольных решеток.
11. Индексы в примитивных и непримитивных решетках. Законы погасания для центрированных ячеек.
12. Понятие об обратной решетке. Квадратичные формы в терминах обратной решетки.
13. Структурные типы: понятие, классификация, основные характеристики.
14. Симметрия кристаллов: элементы симметрии, законы их взаимодействия.
15. Простые формы: понятие, основные названия, классификация, роль в дифракционных методах.
16. Правила построения стереографической проекции элементов симметрии и граней кристаллов.
17. Понятие о пространственной симметрии: элементы симметрии, понятие о пространственных группах.
18. Способы вывода пространственных групп подстановкой координат и перемножением матриц.
19. Химическая связь в кристаллах: ионная, металлическая, ковалентная. Системы атомных и ионных радиусов.
20. Концепция плотнейших упаковок. Характеристики упаковок: слойность, типы пустот, коэффициент компактности.
21. Понятие о твердых растворах. Изоморфное замещение, растворы внедрения и вычитания.
22. Дефекты кристаллической структуры: точечные дефекты, протяженные дефекты.
23. Энергетика дефектообразования.
24. Понятие о дифракции волн, источники вторичных волн для рентгеновских лучей.
25. Дифракция - как избирательное отражение.
26. Формула Вульфа-Брэгга.
27. Кристаллографическая плотность.
28. Экспериментальное определение числа формульных единиц в ячейке.
29. Сложение волн, рассеянных атомами.
30. Вывод формулы для расчета структурного фактора по координатам атомов.

Примеры заданий контрольных работ

Контрольная работа 1 (по анализу структурных типов)

- 1). Название структурного типа.
- 2). Сингония.
- 3). Тип решетки Бравэ.
- 4). Число формульных единиц в элементарной ячейке.
- 5). Координационные числа и координационные многогранники.
- 6). Наличие и тип плотнейшей упаковки. Заселенность пустот.

Контрольная работа 2 (по анализу симметрии и формы кристаллических многогранников)

- 1). Сингония.
- 2). Группа (форма) симметрии.
- 3). Стереографическая проекция элементов симметрии.
- 4). Гномостереографическая проекция граней.
- 5). Число и название простых форм
- 6). Координаты базисных атомов.

Критерии оценки ответа студента при выполнении контрольной работы

Оценка	Требования к знаниям
отлично	приведены полные правильные решения, ответы грамотно аргументированы
хорошо	допущены незначительные погрешности при ответах на вопросы, аргументация была не полной
удовлетворительно	в ответах на некоторые вопросы допущены грубые ошибки, часть выводов не аргументирована или аргументирована неправильно
неудовлетворительно	ответы на 50 и более % вопросов ошибочны, большинство выводов не аргументированы или аргументированы неправильно

Примерные тестовые задания

Тест 1

- Симметрия и правильность внешней формы природных кристаллических многогранников - это:
а) отличительная особенность кристаллических многогранников
б) обязательная особенность кристаллических многогранников
в) отличительная и обязательная особенность кристаллических многогранников
г) отличительная, но не обязательная особенность кристаллических многогранников
- Элементарная ячейка:
а) должна обладать наименьшей симметрией.
б) должна обладать наивысшей симметрией.
в) не должна обладать симметрией
г) не должна обладать наименьшей симметрией.
- Некоторый элемент симметрии, который делит фигуру на две части, расположенные друг относительно друга как предмет и его зеркальное отражение, называется:
а) ось симметрии, б) плоскость симметрии, в) центр симметрии, г) элемент симметрии.
- Линия пересечения двух плоскостей под углом 90^0 является осью симметрии:
а) 2 порядка, б) 3 порядка, в) 4 порядка, г) 6 порядка.
- Формула симметрии тетрагональной дипирамиды:
а) $3L_44L_36L_29PC$, б) L_44L_25PC , в) $6L_29PC$, г) L_44L_25P ,
- Только из одной грани состоит:
а) моноэдр, б) пинакоид, в) диэдр.

Тест 2

- Если для любой точки кристалла, взятой внутри него, найдется такая, что свойства кристалла в обеих этих точках совершенно аналогичны, то кристаллы:
а) анизотропны, б) однородны, в) неоднородны, г) симметричны
- Ячейка, внутри которой нет узлов:
а) называется параллелограммом,
б) является примитивной элементарной ячейкой

- в) является сложной ячейкой
 - г) является пространственной решеткой
3. Некоторый элемент симметрии, при повороте вокруг которого на некоторый определенный угол, фигура совмещается сама с собой, называется:
 - а) ось симметрии, б) плоскость симметрии, в) центр симметрии,
 - г) элемент симметрии.
 4. Линия пересечения четырех плоскостей под углом 45^0 является осью симметрии:
 - а) 2 порядка, б) 3 порядка, в) 4 порядка, г) 6 порядка.
 5. Формула симметрии тригональной дипирамиды:
 - а) $4L_36L_29PC$, б) L_34L_24PC , в) L_39PC , г) L_33L_24P ,
 6. Над лункой первого слоя находится шар второго слоя. Пустота в обоих случаях окружена четырьмя шарами. Пустоты называются:
 - а) тетраэдрическими, б) октаэдрическими, г) гексаэдрическими

Тест 3

1. Если почти все физические свойства кристалла в различных направлениях различны, то кристаллы:
 - а) анизотропны, б) однородны, в) неоднородны, г) симметричны
2. Ретикулярная плотность это:
 - а) число узлов на единицу площади
 - б) число узлов на единицу объема
 - в) число вершин на единицу объема
 - г) число узлов на единицу объема
3. Некоторый элемент симметрии внутри фигуры, через которую проведена любая прямая, встречает одинаковые точки по обе стороны от центра на равных расстояниях, называется:
 - а) ось симметрии, б) плоскость симметрии, в) центр симметрии, г) элемент симметрии.
4. Кристаллы низшей категории не имеют осей симметрии порядка выше:
 - а) 3, б) 2, в) 4, г) 6.
5. Формула симметрии гексагональной дипирамиды:
 - а) $3L_44L_36L_29PC$, б) L_66L_27PC , в) $6L_29PC$, г) L_44L_25P ,

Тест 4

1. Кратчайшее из возможных расстояний между одинаковыми точками в _____ ряду называется:
 - а) узел, б) ряд, в) параметр ряда, г) грань ряда.
2. Структура кристалла это:
 - а) беспорядочное расположение частиц в пространстве;
 - б) конкретное расположение частиц в пространстве;
 - в) сочетание узлов и граней;
 - г) это способ представления периодичности повторения в пространстве отдельных материальных частиц или групп частиц.

3. Элементарный угол поворота определяется
а) $n=360/\alpha$, б) $n=360 \cdot \alpha$, в) $n=\alpha/360$.
4. В высшей категории только одна сингония:
а) кубическая, б) тетрагональная, в) тригональная, г) ромбическая.
5. Формула симметрии тетрагональной призмы:
а) $3L_44L_36L_29PC$, б) L_44L_25PC , в) $6L_29PC$, г) L_44L_25P ,
6. Изоморфными являются вещества:
а) твердые вещества, сходные по химическому составу и имеющие разные по форме кристаллы
б) твердые вещества, сходные по химическому составу и имеющие близкие по форме кристаллы
в) твердые вещества, разные по химическому составу, и разные по форме кристаллы
г) твердые вещества, разные по химическому составу, но имеющие близкие по форме кристаллы

Тест 5

1. Сдвиг точки бесконечного ряда на один период идентичности вдоль направления трансляции это:
а) перенос системы, б) симметричное преобразование,
в) преобразование системы, г) несимметричное преобразование
2. По закону постоянства углов кристаллов:
а) во всех кристаллах данного вещества при одинаковых условиях углы между соответствующими гранями кристаллов постоянны.
б) во всех кристаллах любого вещества при одинаковых условиях углы между соответствующими гранями кристаллов постоянны.
в) в некоторых кристаллах данного вещества при одинаковых условиях углы между соответствующими гранями кристаллов постоянны.
г) во всех кристаллах данного вещества при одинаковых условиях углы между соответствующими гранями кристаллов непостоянны.
3. Угол поворота вокруг линии пересечения двух плоскостей симметрии:
а) больше угла между плоскостями
б) вдвое больше угла между плоскостями
в) вдвое меньше угла между плоскостями
г) равен углу между плоскостями
4. Тригональная, тетрагональная, гексагональная сингонии относятся к категории:
а) низшей, б) средней, в) высшей.
5. Формула симметрии тетрагональной пирамиды:
а) L_44PC , б) L_44L_25PC , в) $6L_29PC$, г) L_44PC ,

Тест 6

1. Одинаковые точки, связанные между собой трансляциями в бесконечном ряду называются:
а) вершинами, б) узлами, в) гранями, г) ячейками
2. Чему равны двойные отношения параметров для двух любых граней:
а) отношению малых целых чисел

- б) отношению больших целых чисел
- в) отношению малых дробных чисел
- г) отношению дробных и целых чисел

3. Если есть четная ось симметрии и на ней центр симметрии, то перпендикулярно к ней проходит:
а) плоскость, б) ось, в) центр, г) ось и плоскость.

4. Ромбическая, моноклинная, триклинная сингонии относятся к категории:
а) низшей, б) средней, в) высшей.

5. Формула симметрии тригональной пирамиды:

- а) L_4PC , б) L_3PC , в) L_3P , г) L_4PC ,

и, в) петлями, параллелограммами

Тест 7

1. Что такое операции симметрии:

- а) отражение, б) вращение, в) отражение и вращение, г) перенос из одной точки в другую

2. Если есть ось симметрии n -го порядка и вдоль нее проходит плоскость симметрии, то таких плоскостей:

- а) n , б) $n-1$, в) $n+1$, г) $2n$

3. Формула симметрии куба:

- а) $3L_44L_36L_29PC$, б) $3L_44L_36L_26PC$, в) $3L_46L_29PC$, г) $3L_44L_36L_29P$,

4. Формула симметрии гексагональной пирамиды:

- а) L_64PC , б) L_64L_26PC , в) $6L_6PC$, г) L_6P .

5. Над лункой первого слоя находится шар второго слоя. Пустота в обоих случаях окружена шестью шарами. Пустоты называются:

- а) тетраэдрическими, б) октаэдрическими, г) гексаэдрическими

Критерии оценки ответа студента при выполнении тестовых заданий

Оценка	Требования к знаниям
отлично	Оценка «отлично» выставляется студенту, если он глубоко и прочно освоил программный материал, исчерпывающе, последовательно, четко и логически стройно его излагает, умеет тесно увязывать теорию с практикой, свободно справляется с задачами, вопросами и другими видами применения знаний, причем не затрудняется с ответом при видоизменении заданий, правильно обосновывает принятое решение.
хорошо	Оценка «хорошо» выставляется студенту, если он твердо знает материал, грамотно и по существу излагает его, не допуская существенных неточностей в ответе на вопрос, правильно применяет теоретические положения при решении практических вопросов и задач, владеет необходимыми навыками и приемами их выполнения.
удовлетворительно	Оценка «удовлетворительно» выставляется студенту, если он имеет знания только основного характера, но не усвоил его

	деталей, допускает неточности, недостаточно правильные формулировки, нарушения логической последовательности в изложении программного материала, испытывает затруднения при обосновании ответа.
неудовлетворительно	Оценка «неудовлетворительно» выставляется студенту, который не знает значительной части программного материала, допускает существенные ошибки, имеет затруднения при ответе на вопросы и обосновании ответов. Как правило, оценка «неудовлетворительно» ставится студентам, которые не могут продолжить обучение без дополнительных занятий по соответствующей дисциплине.

Типовые вопросы к коллоквиуму по теории симметрии и основам геометрического строения кристаллов

- 1). Понятие о пространственной симметрии
- 2). Основные пространственные элементы симметрии: плоскости скользящего отражения, винтовые оси.
- 3). Особенности взаимодействия пространственных элементов симметрии, координатный способ вывода групп симметрии.
- 4). Правильные системы точек, общие и частные системы.
- 5). Кратность правильных систем точек, роль правильных систем в структурном анализе.
- 6). Химическая связь в кристаллах, координационное число.
- 7). Системы атомных и ионных радиусов.
- 8). Концепция плотнейших упаковок атомов и ионов, основные типы упаковок: двухслойная и трехслойная.
- 9). Основные типы пустот и принципы расчета их заселенности.
- 10). Понятие о твердых растворах, основные типы растворов: замещения, внедрения, вычитания.
- 11). Основные фазовые диаграммы с твердыми растворами.
- 12). Пределы растворимости, закон Вегарда.
- 13). Дефекты кристаллической структуры, точечные и протяженные дефекты.

Критерии оценивания ответов

Коллоквиум считается сданным, если отвечающий дает достаточно полный ответ, понимает связь материала данного раздела с другими, в случае затруднений откликается на подсказки и наводящие вопросы.

Коллоквиум считается несданным, если отвечающий не может дать развернутого ответа, ему не помогают подсказки и наводящие вопросы.

Типовые вопросы к защите по лабораторным работам

- 1). Основные типы решеток, решетки Бравэ.
- 2). Примитивные и центрированные решетки.
- 3). Кристаллическая решетка и индексы Миллера.
- 4). Квадратичные формы ортогональных сингоний.
- 5). Принципы индизирования высокосимметричных кристаллов.
- 6). Расчет параметров решетки по межплоскостным расстояниям.
- 7). Элементарные принципы дифракции.
- 8). Условия дифракции по Лауэ.

- 9). Метод вращения.
- 8). Формула Вульфа-Брэгга и «отражательная» дифракция.
- 9). Рентгенофазовый анализ.
- 10). Основные причины погасаний дифракционных рефлексов.
- 11). Зависимость структурного фактора от координат и индексов Миллера.

Критерии защиты лабораторной работы

Работа считается защищенной при следующих условиях:

- участие в выполнении работы;
- предоставление отчета, оформленного в соответствии с учебно-методическими пособиями к лабораторным работам;
- краткие, но достаточно содержательные ответы на 2–3 вопроса из прилагаемого списка.

При невыполнении любого из требований, перечисленных выше, остальные могут быть зачтены, но работа не будет считаться защищенной, пока не будут выполнены все требования.

Примерные контрольные вопросы к зачету

1. Предмет и задачи кристаллохимии. Кристаллохимия как часть химии и как метод исследования химических веществ. Основной закон кристаллохимии (Гольдшмидт, Капустинский). Общие свойства кристаллов. Формула Эйлера-Декарта.
2. Основные этапы истории рентгеноструктурного анализа и кристаллохимии.
3. Типы химических связей в кристаллах. Энергия связей. Гомо- и гетеродесмические структуры. Характер структуры. Примеры.
4. Структурные типы. Изоструктурность. Описание простейших кристаллических структур.
5. Изоморфизм. Структура твердых растворов.
6. Полиморфизм, политипия, морфотропия. Монотропные и энантиотропные полиморфные превращения.
7. ПШУ и ПШК. Описание кристаллических структур простых веществ в рамках представлений о ПШУ и ПШК.
8. Пустоты в ПШУ и ПШК. Описание кристаллических структур бинарных и тернарных соединений в рамках представлений о ПШУ и ПШК. Примеры.
9. Кристаллические структуры металлов.
10. Кристаллические структуры простых веществ, образованных р-элементами VIII, VII и VI групп периодической системы.
11. Кристаллические структуры простых веществ, образованных р-элементами V, IV и III групп периодической системы.
12. Кристаллические структуры интерметаллидов.
13. Кристаллические структуры бинарных соединений, описываемые в рамках представлений о ПШУ и ПШК.
14. Общая характеристика кристаллических структур бинарных соединений. Примеры. Ажурные структурные мотивы.
15. Общая характеристика кристаллических структур тернарных соединений.
16. Структурный тип перовскита. Сегнетоэлектрики.
17. Структурный тип шпинели. Нормальная (прямая) и обращенная шпинель. Коэффициент обращения. Ферриты и их свойства.
18. Структуры силикатов. Цеолиты.
19. Значение рентгеноструктурного анализа и кристаллохимии для химии и молекулярной биологии. Базы структурных данных.
20. Понятие о рентгенографии. Автоматические дифрактометры.
21. Метод порошка в рентгенографии. Индексы Миллера. Межплоскостные расстояния. Уравнение Брэгга-Вульфа. Порядок отражения. Рентгенограмма. Представление о рентгенофазовом анализе.

22. Сравнение разных дифракционных методов изучения кристаллической структуры.
23. Группы симметрии. Операции и элементы симметрии. Закрытые операции и элементы симметрии. Инверсия. Поворотные и инверсионные оси, свойства. Описание симметрии неперiodических объектов. Примеры.
24. Точечные группы, символы, принципы их построения. Предельные группы. Примеры.
25. Проекция элементов симметрии.
26. Символики Германа-Могена и Шенфлиса. Зеркальные повороты и зеркально-поворотные оси, соотношения с инверсионными.
27. Трансляции, их дискретные группы. Кристаллическая решетка, ее базис. Примитивные и непримитивные параллелограммы и параллелепипеды повторяемости.
28. Симметрия решетки. Голоэдрические группы, их свойства. Особые направления в решетке, их свойства.
29. Кристаллографические координатные системы, их выбор. Базис кристаллографической координатной системы. Координатный крест. Элементарная ячейка. Параметры решетки. Виды кристаллографических координатных систем для разных типов симметрии решетки. Сингония.
30. Способы размещения узлов в элементарной ячейке. Типы Бравэ. Проекция элементарной ячейки.
31. Основные структурные типы для кубической сингонии. Число формульных единиц в элементарной ячейке. Рентгеновская плотность кристалла.
32. Кристаллографические точечные группы. Симметрия кристаллического много-гранника. Примеры.
33. Открытые операции и элементы симметрии.
34. Пространственные группы симметрии (симморфные и несимморфные), принцип их вывода.
35. Кристаллохимические радиусы, соотношение с орбитальными. Ионные радиусы. Метод Ланде. Металлические, ковалентные, вандерваальсовы радиусы. Поправки Гольд-шмидта.

Критерии оценки ответа на зачете

Оценка	Критерии ответа
Зачтено	Глубокое и хорошее знание и понимание предмета, в том числе терминологии и основных понятий; теоретических закономерностей; фактических данных; обстоятельный, логический и грамотный ответ во время сдачи зачета; удельный вес ошибок при контрольном тестировании – не более 50%.
Незачтено	Слабое знание основной терминологии, теоретических закономерностей, фактических данных, ошибочный ответ на зачете; удельный вес ошибок при контрольном тестировании – более 50%.

9. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

9.1. Учебная литература:

а) основная:

1. М.П.Шаскольская. Кристаллография. М.: Высшая школа, 1984.

2. И.Нараи-Сабо. Неорганическая кристаллохимия. Будапешт, 1968.
3. Бокий Г.Б. Кристаллохимия. М.: Наука, 1971.
4. Зоркий П.М. Симметрия молекул и кристаллических структур. М.: изд-во Моск. Ун-та, 1986
5. Зоркий П.М. Задачник по кристаллохимии и кристаллографии. М.: Изд-во Московского ун-та, 1981.
6. Ванштейн Б.К. Современная кристаллография. Т.1,2. М.: Наука, 1979.

б) дополнительная:

1. Порай-Кошиц М.А. Основы структурного анализа химических соединений. М.: Высш.шк., 1982.
2. Китайгородский А.И. Молекулярные кристаллы. М.: Наука, 1971
3. Уэллс А. Структурная неорганическая химия: в 3т.М.: Мир, 1987-1988,Т.1,2,3.

9.2. Интернет-ресурсы

1. http://c-books.narod.ru/pryanishnikov1_2_1.html
2. <http://alhimic.ucoz.ru/load/26>
3. <http://www.chem.msu.su/rus/teaching/org.html>
4. <http://www.xumuk.ru>
5. <http://chemistry.narod.ru>
6. <http://www.media.ssu.samara.ru/lectures/deryabina/index/html>
7. ChemSoft 2004

9.3. Программное обеспечение

Университет обеспечен необходимым комплектом лицензионного и свободно распространяемого программного обеспечения, в том числе отечественного производства.

Каждый обучающийся в течение всего периода обучения обеспечен индивидуальным неограниченным доступом к электронной информационно-образовательной среде университета из любой точки, в которой имеется доступ к информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» как на территории университета, так и вне ее.

Университет обеспечен следующим комплектом лицензионного программного обеспечения.

1. Лицензионное программное обеспечение, используемое в ИнгГУ
 - 1.1. Microsoft Windows 7
 - 1.2. Microsoft Office 2007
 - 1.3. Программный комплекс ММИС “Визуальная Студия Тестирования”
 - 1.4. Антивирусное ПО Eset Nod32
 - 1.5. Справочно-правовая система “Гарант”

Наряду с традиционными изданиями студенты и сотрудники имеют возможность пользоваться электронными полнотекстовыми базами данных:

Таблица 9.1.

Название ресурса	Ссылка/доступ
Электронная библиотека онлайн «Единое окно к образовательным ресурсам»	http://window.edu.ru
«Образовательный ресурс России»	http://school-collection.edu.ru
Федеральный образовательный портал: учреждения, программы, стандарты, ВУЗы, тесты ЕГЭ, ГИА	http://www.edu.ru –
Федеральный центр информационно-образовательных	http://fcior.edu.ru -

ресурсов (ФЦИОР)	
ЭБС "КОНСУЛЬТАНТ СТУДЕНТА". Электронная библиотека технического вуза	http://polpred.com/news
Издательство «Лань». Электронно-библиотечная система	http://www.studentlibrary.ru -
Русская виртуальная библиотека	http://rvb.ru –
Издательство «Лань». Электронно-библиотечная система	http://e.lanbook.com -
Еженедельник науки и образования Юга России «Академия»	http://old.rsue.ru/Academy/Archives/Index.htm
Научная электронная библиотека «e-Library»	http://elibrary.ru/defaultx.asp -
Электронно-библиотечная система IPRbooks	http://www.iprbookshop.ru -
Электронно-справочная система документов в сфере образования «Информо»	http://www.informio.ru
Информационно-правовая система «Гарант»	Сетевая версия, доступна со всех компьютеров в корпоративной сети ИнГГУ
Электронно-библиотечная система «Юрайт»	https://www.biblio-online.ru

10. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Требования к аудитории для лекционных и практических занятий: бесшумная светлая аудитория на 25 посадочных мест с доской.

Требования к аудитории для лабораторных занятий: лаборатория 60-70 м² с вытяжкой, общим и местным (над шестью рабочими столами) освещением, канализацией (холодная и горячая вода).

Требования к специализированному оборудованию: вытяжной шкаф, химически стойкая раковина, шесть лабораторных столов со стойким покрытием, один стол преподавателя, двенадцать лабораторных стульев, доска, технические и аналитические весы.

Теоретический курс:

1. Лекции, презентации
2. Контрольные тесты.
3. Список вопросов для проведения коллоквиумов.
4. Таблицы- бумажный вариант большого формата.
5. Варианты заданий для контрольных работ.

Лабораторный практикум:

1. Тематика и описание лабораторных работ (специально разработанный и изданный лабораторный практикум для студентов химического направления).
2. Набор химических реактивов к каждой лабораторной работе.
3. Лабораторные установки, оборудование.

11. МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ДЛЯ ОБУЧАЮЩИХСЯ ПО ОСВОЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ

Для успешного освоения лекционного материала обучающиеся должны посещать лекции и конспектировать их в специальную тетрадь.

Очень полезно перед текущей лекцией просмотреть материал предыдущей.

При конспектировании следует записывать лишь основные положения, по-следовательность выводов законов и уравнений, воспроизводить необходимые схемы и рисунки. Если возникают вопросы по части материала и нет возможности выяснить их сразу, следует отметить оставшееся непонятным и после лекции (в свободное время) найти соответствующий материал в литературе, Интернете или выяснить у преподавателя во время практических занятий или на консультациях.

При подготовке к контрольным работам необходимо повторить соответствующий материал. По контрольной № 1 наиболее важные вопросы:

- номенклатура структурных типов;
- основные типы решеток;
- методика подсчета числа атомов и формульных единиц (молекул), приходящихся на элементарную ячейку;
- выявление плотнейшей упаковки;
- определение типа плотнейшей упаковки;
- анализ заселенности пустот;
- координационные числа и координационные многогранники.

По контрольной работе № 2:

- принципы построения стереографической проекции элементов симметрии;
- принципы построения гномостереографической проекции граней кристаллического многогранника;
- размножение граней элементами симметрии;
- особенности взаимодействия элементов симметрии друг с другом;
- классификация простых форм;
- основные типы простых форм.

Рекомендуется также внеурочное посещение лаборатории с целью повторения материала по изучению кристаллов на моделях, имеющихся в лаборатории, поскольку этот наглядный материал не может быть доступным вне лаборатории. Рекомендуется обращаться к персоналу лаборатории за необходимыми разъяснениями и консультациями.

При подготовке к практическим и лабораторным занятиям необходимо повторить теоретическую часть как по конспектам лекций и учебникам, так и по соответствующему учебно-методическому пособию.

Коллоквиум призван закрепить материал по пространственной симметрии и геометрическим закономерностям формирования структуры и внешней формы кристаллов. При подготовке к коллоквиуму также необходимо тщательно проработать материал, используя конспекты лекций, учебные и учебно-методические пособия, другие источники (справочники, энциклопедии, Интернет).

Зачет с оценкой – это завершающее оценочное средство по дисциплине, позволяющее уточнить уровень усвоения материала обучающимися. При подготовке к зачету, в общем, рекомендуются те же действия, что и в случае других контрольных мероприятий: тщательная проработка материала по конспектам лекций, учебным и учебно-методическим пособиям, другим источникам. Кроме этого, необходимо выделить наиболее трудные разделы и сформулировать вопросы преподавателю к консультации перед зачетом.

Рабочая программа дисциплины «Кристаллохимия» составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО по специальности 04.03.01. «Химия (уровень бакалавриата)», утвержденного приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от 17 июля 2017 г. № 671

Программу составила: к.т.н., профессор кафедры химии Арчакова Р.Д.

Рабочая программа утверждена на заседании кафедры химии

Протокол заседания № 10 от «20» июня 2023 г.

Рабочая программа одобрена учебно-методическим советом химико-биологического факультета

Протокол заседания № 10 от «26» июня 2023 г.

Программа рассмотрена на заседании Учебно-методического совета университета

Протокол заседания № 10 от «28» июня 2023 г.

Сведения о переутверждении программы на очередной учебный год и регистрации изменений

Учебный год	Решение кафедры (№ протокола, дата)	Внесенные изменения	Подпись зав. кафедрой