

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«ДАГЕСТАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
Химический факультет

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

КРИСТАЛЛОХИМИЯ

Кафедра физической и органической химии химического факультета

Образовательная программа

04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

Профиль подготовки

Неорганическая химия, аналитическая химия, органическая химия

Уровень высшего образования

Специалитет

Форма обучения

Очная

Статус дисциплины: базовая

Махачкала, 2020 г.

Рабочая программа дисциплины «Кристаллохимия» составлена в 2020 году в соответствии с требованиями ФГОС ВО по специальности 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия (уровень специалитета) от «12» сентября 2016 г. № 1174.

Разработчик(и): кафедра физической и органической химии, Магомедова Асият Омаровна, к.х.н.

Рабочая программа дисциплины одобрена:

на заседании кафедры физической и органической химии

от «19» февраля 2020 г., протокол № 6

Зав. кафедрой И.М. Абдулагатов проф. Абдулагатов И.М.

(подпись)

на заседании Методической комиссии химического факультета

от «21» февраля 2020 г., протокол № 6.

Председатель У.Г. Гасангаджиева Гасангаджиева У.Г.

(подпись)

Рабочая программа дисциплины согласована с учебно-методическим управлением «УМ» 03 2020 г. И.М. Абдулагатов

(подпись)

Аннотация рабочей программы дисциплины

Дисциплина “Кристаллохимия” входит в базовую часть образовательной программы Б1.Б.24 специалитета по направлению 04.05.01 “Фундаментальная и прикладная химия”.

Дисциплина реализуется на факультете химическом кафедрой физической и органической химии.

Содержание дисциплины охватывает круг вопросов, связанных с изучением общих принципов строения кристаллов, с основами учения о симметрии кристаллов, структурной кристаллографии и рентгеноструктурного анализа.

Дисциплина нацелена на формирование следующих компетенций выпускника: ОК-7, ОПК-1, 2, 5.

Преподавание дисциплины предусматривает проведение следующих видов учебных занятий: лекции, практические занятия, самостоятельная работа.

Рабочая программа дисциплины предусматривает проведение следующих видов контроля успеваемости в форме коллоквиумов, контрольных работ и промежуточный контроль в форме экзамена.

Объем дисциплины 5 зачетных единиц, в том числе в академических часах по видам учебных занятий.

Се- мestr	Учебные занятия						Форма промежуточной аттестации (зачет, дифференцированный зачет, экзамен)	
	в том числе							
	Контактная работа обучающихся с преподавателем							СРС, в том числе экзамен
	Все го	Лек- ции	Лабора- торные занятия	Практи- ческие занятия	КСР	кон- сульта- ции		
7 сем.	180	36	-	54	-	-	54+36	Экзамен

3. Цели освоения дисциплины

Целью освоения дисциплины “Кристаллохимия” является знакомство студентов с общими принципами строения кристаллов, с основами учения о симметрии кристаллов, структурной кристаллографии и рентгеноструктурного анализа.

2. Место дисциплины в структуре ОПОП специалитета

Дисциплина “Кристаллохимия” входит в базовую часть образовательной программы Б1.Б.24 специалитета по направлению 04.05.01 “Фундаментальная и прикладная химия”. Содержание курса базируется на знаниях, приобретенных при изучении неорганической и физической химии, математики, физики. Материал, излагаемый в курсе “Кристаллохимия” необходим при изучении специальных дисциплин, таких как рентгенография, физико-химический анализ и т.д.

3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины (перечень планируемых результатов обучения)

Код компетенции из ФГОС ВО	Наименование компетенции из ФГОС ВО	Планируемые результаты обучения
ОК-7	Готовность к саморазвитию, самореализации, использованию творческого потенциала	Знает: предметную область химии. Умеет: работать самостоятельно и в коллективе, формулировать результат; публично представить собственные и известные научные результаты. Владеет: способностью к самоорганизации и к самообразованию; навыками самостоятельной научно-исследовательской работы; способностью формулировать результат.
ОПК-1	Способность воспринимать, развивать и использовать теоретические основы традиционных и новых разделов химии при решении профессиональных задач	Знает: теоретические основы традиционных и новых разделов кристаллохимии Умеет: воспринимать, развивать и использовать теоретические основы традиционных и новых разделов кристаллохимии Владеет: теоретическими основами кристаллохимии при решении профессиональных задач
ОПК-2	Владение навыками химического эксперимента, синтетическими и аналитическими методами получения и исследования химических веществ и реакций	Знает: методы исследования структуры кристаллических тел. Умеет: осуществлять химический эксперимент по предлагаемой методике, анализировать полученные экспериментальные данные, интерпретировать полученные экспериментальные результаты. Владеет: навыками эксперимента, методами исследования структу-

		ры кристаллических веществ
ОПК-5	Способность к поиску, обработке, анализу научной информации и формулировке на их основе выводов и предложений	<p>Знает: источники поиска научной информации по традиционным и новым разделам кристаллохимии</p> <p>Умеет: искать, обрабатывать и анализировать научную информацию по кристаллохимии с дальнейшим формированием на их основе определенных выводов и предложений</p> <p>Владеет: основами современных методов анализа научной информации</p>

4. Объем, структура и содержание дисциплины.

4.1. Объем дисциплины составляет 5 зачетных единиц, 180 академических часов.

4.2. Структура дисциплины.

№ п/п	Разделы и темы дисциплины	Се-местр	Не-деля се-местра	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу студентов и трудоемкость (в часах)				Са-мо-сто-я-тель-ная ра-бо-та	Формы текущего кон-троля успеваемости (по неделям семестра) Форма промежуточной аттестации (по семестрам)
				Лек-ции	Пр-акт-за-ня-тия	Ла-бо-ра-то-рия	Ко-нт-ро-ль-ная ра-ба.		
Модуль 1. Основы геометрической кристаллографии									
1	Решетки. Основные определения.	7		2	4			2	Устный опрос, контрольная работа, коллоквиум
2	Симметрия. Операции и элементы симметрии решеток.	7		4	4			2	Устный опрос, контрольная работа, коллоквиум
3	Точечные группы симметрии. Пространственные группы симметрии	7		4	4			2	Устный опрос, контрольная работа, коллоквиум
4	Кристаллографические многогранники. Простые формы.	7		2	4			2	Устный опрос, контрольная работа, коллоквиум
	Итого		36	12	16			8	
Модуль 2. Систематическая кристаллохимия									
5	Координационные числа и координационные полиэдры.	7		2	4			2	Устный опрос, контрольная работа, коллоквиум
6	Структурные типы. Описание и сопо-	7		6	4			2	Устный опрос, контрольная работа,

	ставление. Описание структур в терминах ПШУ.								коллоквиум
7	Типы химической связи в кристаллах.	7		2	4			2	Устный опрос, контрольная работа, коллоквиум
8	Основные категории кристаллохимии.	7		2	4			2	Устный опрос, контрольная работа, коллоквиум
	Итого		36	12	16			8	
Модуль 3. Основы дифракционных методов исследования кристаллов.									
9	Основные этапы рентгеноструктурного анализа.	7		2	4			5	Устный опрос, контрольная работа, коллоквиум
10	Дифракция рентгеновских лучей.	7		2	4			5	Устный опрос, контрольная работа, коллоквиум
11	Сравнение дифракционных методов изучения кристаллической структуры (рентгенография, нейтронография, электронография).	7		4	6			4	Устный опрос, контрольная работа, коллоквиум
	Итого		36	8	14			14	
Модуль 4. Реальные кристаллы.									
12	Реальные кристаллы. Дефекты в кристаллах.	7		2	4			12	Устный опрос, контрольная работа, коллоквиум
13	Тензорное описание физических свойств кристаллов.	7		2	4			12	Устный опрос, контрольная работа, коллоквиум
	Итого		36	4	8			24	
Модуль 5. Подготовка к экзамену.									
	Итого		36 180	36	54			54+ 36	экзамен экзамен

4.3. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам).

4.3.1. Содержание лекционных занятий по дисциплине

Модуль 1. Основы геометрической кристаллографии

Тема 1. Решетки. Основные определения.

Предмет и задачи кристаллохимии. Основные аспекты кристаллохимии. Многообразие кристаллических структур. Взаимосвязь кристаллохимии с другими науками о кристаллическом состоянии. Обратная решетка. Символы узлов решетки. Понятие узлового ряда и узловой плоскости. Теорема об узловых плоскостях. Индексы Миллера.

Тема 2. Симметрия. Операции и элементы симметрии решеток

Симметрия кристаллов. Элементы симметрии: центр, плоскость и ось симметрии. Операции симметрии: точечные и пространственные. Обозначения точечных элементов и операций симметрии. Обозначения Бравэ, международная символика, символика Шенфлиса.

Тема 3. Точечные группы симметрии. Пространственные группы симметрии

Точечные группы симметрии. Категории. Виды симметрии. Сингонии. Принципы символики Шенфлиса для точечных групп. Принципы символики Германа-Могена. Элементарная ячейка. Группы трансляций. Решетки Бравэ. Пространственные группы симметрии. Симморфные и несимморфные группы симметрии. Обозначения пространственных групп симметрии. Кристаллическая решетка и кристаллическая структура.

Тема 4. Кристаллографические многогранники. Простые формы

Простые формы кристаллов. Комбинации. Общие и частные простые формы. Открытые и закрытые простые формы. Простые формы низших сингоний. Простые формы средних сингоний. Простые формы кубической сингонии.

Модуль 2. Систематическая кристаллохимия

Тема 5. Координационные числа и координационные полиэдры

Число формульных единиц в ячейке и рентгеновская плотность. Координационные числа. Координационные многогранники.

Тема 6. Структурные типы. Описание и сопоставление. Описание структур в терминах ПШУ

Структурные типы. Описание и сопоставление важнейших структурных типов. Описание структур в терминах плотнейших шаровых упаковок (ПШУ). Кубическая и гексагональная ПШУ. Слои ПШУ. Координационные числа, координационные полиэдры в ПШУ. Тетраэдрические и октаэдрические пустоты в ПШУ.

Тема 7. Типы химической связи в кристаллах

Типы химических связей в кристаллах. Гомо- и гетеродесмические структуры. Характер кристаллической структуры. Координационные, островные, цепочечные, слоистые, каркасные структуры. Кристаллохимические радиусы атомов. Металлические и ионные радиусы. Энергия кристаллических структур. Ковалентные и Ван-дер-ваальсовы радиусы. Промежуточные типы связи.

Тема 8. Основные категории кристаллохимии

Основные категории кристаллохимии. Изоморфизм. Изовалентные и гетеровалентные замещения. Морфотропия и морфотропные ряды. Полиморфизм. Термодинамика полиморфных превращений. Политипия.

Модуль 3. Основы дифракционных методов исследования кристаллов.

Тема 9. Основные этапы рентгеноструктурного анализа

Основные этапы рентгеноструктурного анализа. Рентгеновские лучи.

Тема 10. Дифракция рентгеновских лучей

Дифракция рентгеновских лучей. Геометрическое условие дифракции. Уравнение Вульфа-Брэгга. Индексы узловых сеток. Уравнения Лауэ. Уравнение Вульфа-Брэгга. Индексы узловых сеток.

Тема 11. Сравнение дифракционных методов изучения кристаллической структуры (рентгенография, нейтронография, электронография)

Три метода получения дифракционной картины и их использование. Метод порошка в рентгенографии. Рентгенофазовый анализ. Сравнение дифракционных методов изучения кристаллической структуры. Рентгенография. Нейтронография. Электронография.

Модуль 4. Реальные кристаллы.

Тема 12. Реальные кристаллы. Дефекты в кристаллах.

Кристаллохимия простых, бинарных, тройных неорганических соединений. Кристаллохимия силикатов: основные черты строения и их классификация. Реальные кристаллы. Точечные, линейные, поверхностные дефекты.

Тема 13. Тензорное описание физических свойств кристаллов

Зависимость физических свойств кристаллов от их симметрии. Свойства, описываемые тензорами второго ранга. Тепловые свойства. Пиро- и пьезоэлектрические свойства. Оптические свойства кристаллов.

4.3.2. Содержание лабораторно-практических занятий по дисциплине

Модуль 1. Основы геометрической кристаллографии

Тема 1. Решетки. Основные определения.

1. Предмет и задачи кристаллохимии.
2. Основные аспекты кристаллохимии.
3. Многообразие кристаллических структур.
4. Свойства, характерные для кристаллических тел.
5. Взаимосвязь кристаллохимии с другими науками о кристаллическом состоянии.
6. Решетка: одномерная, двумерная, трехмерная.
7. Узлы решетки, узловые прямые и узловые плоскости и их символы.
8. Теорема об узловых плоскостях.
9. Правила определения индексов Миллера.

Тема 2. Симметрия. Операции и элементы симметрии решеток.

1. Симметрия геометрических фигур.
2. Элементы симметрии: центр симметрии, оси симметрии, плоскость симметрии.
3. Операции симметрии: точечные и пространственные.

Тема 3. Точечные группы симметрии. Пространственные группы симметрии.

1. Вывод 32 точечных групп симметрии.
2. Категории и сингонии.

3. Виды симметрии
4. Принципы символики Бравэ.
5. Принципы символики Шенфлиса.
6. Принципы символики Германа-Могена.
7. Пространственные группы симметрии.
7. Симморфные и несимморфные группы симметрии.
9. Обозначения пространственных групп симметрии.
10. Решетки Бравэ.

Тема 4. Кристаллографические многогранники. Простые формы

1. Простые формы кристаллов и их комбинации.
2. Простые формы низших сингоний.
3. Простые формы средних сингоний.
4. Простые формы кубической сингонии.

Модуль 2. Систематическая кристаллохимия

Тема 5. Координационные числа и координационные полиэдры

1. Число формульных единиц в ячейке и рентгеновская плотность.
2. Координационные числа.
3. Координационные многогранники.

Тема 6. Структурные типы. Описание и сопоставление. Описание структур в терминах ПШУ.

1. Кристаллические структуры чистых металлов.
2. Структуры типа алмаза и графита.
3. Структуры типа NaCl и CsCl.
4. Структуры типа сфалерита и вюрцита.
5. Структуры типа флюорита и нитрида бора.
6. Описание структур в терминах плотнейших шаровых упаковок (ПШУ).
7. Кубическая и гексагональная ПШУ.
8. Слои ПШУ. Обозначения ПШУ.
9. Координационные числа, координационные полиэдры в ПШУ.
10. Тетраэдрические и октаэдрические пустоты в ПШУ.

Тема 7. Типы химической связи в кристаллах.

1. Основные типы химической связи в кристаллах.
2. Промежуточные типы химической связи.
3. Гомо и гетеродесмические структуры.
4. Классификация структурных типов.
5. Кристаллохимические радиусы атомов.
6. Металлические и ионные радиусы.
7. Коэффициент плотности упаковки металлических и ионных кристаллов.
8. Ковалентные и ван-дер-ваальсовы радиусы.
9. Энергия кристаллических структур.

Тема 8. Основные категории кристаллохимии.

1. Изоморфизм. Совершенный и несовершенный изоморфизм.
2. Твердые растворы.
3. Морфотропия. Автоморфотропия.
4. Полиморфизм. Полиморфные превращения.
5. Классификация типов полиморфизма.
6. Политипия.

Модуль 3. Основы дифракционных методов исследования кристаллов.

Тема 9. Основные этапы рентгеноструктурного анализа.

1. Рентгеновское излучение.
2. Характеристика рентгеновского излучения.
3. Рентгеноструктурный анализ.

Тема 10. Дифракция рентгеновских лучей.

1. Геометрическое условие дифракции рентгеновских лучей: условие Вульфа-Брэгга.
2. Условия Лауэ.
3. Способы получения дифракционных картин.

Тема 11. Сравнение дифракционных методов изучения кристаллической структуры (рентгенография, нейтронография, электронография)

1. Качественный фазовый анализ.
2. Индексирование рентгенограмм. Определение типа решеток.
3. Электронография
4. Нейтронография.

Модуль 4. Реальные кристаллы

Тема 12. Реальные кристаллы.

1. Точечные дефекты.
2. Линейные, поверхностные, объемные дефекты.
3. Дефекты в ионных и ковалентных структурах.

Тема 13. Тензорное описание физических свойств кристаллов (семинар) Практическое занятие 2. Описание физических свойств с помощью тензоров

1. Взаимосвязь структуры кристаллов и их физических свойств.
2. Скалярные и тензорные величины.
3. Тензорное описание физических свойств.
4. Пиро- и пьезоэлектрические свойства кристаллов.
5. Оптические свойства кристаллов.

5. Образовательные технологии

В ходе освоения дисциплины предусматривается применение следующих активных методов обучения:

- Выполнение практических работ с элементами исследования.
- Отчетные занятия по разделам “Основы геометрической кристаллографии”, “Систематическая кристаллохимия”, “Реальные кристаллы”, “Основы дифракционных методов исследования”.
- Выполнение студентами индивидуальной исследовательской работы по анализу реального объекта с поиском и выбором метода и схемы определения на практических занятиях.
- Разбор конкретных ситуаций.
- Круглый стол.

6. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов.

Виды и порядок выполнения самостоятельной работы

1. Изучение рекомендованной литературы.
2. Подготовка реферата, презентации и доклада.
3. Решение задач.
4. Подготовка к коллоквиуму.
5. Подготовка к экзамену.

№	Вид самостоятельной работы	Вид контроля	Учебно-методич. обеспечение
1.	Изучение рекомендованной литературы.	Устный опрос по разделам дисциплины.	См. разделы 7.3, 8, 9 данного документа.
2.	Подготовка реферата (до 10-15 страниц), презентации и доклада (25-30 минут)	Прием реферата, презентации, доклада и оценка качества их исполнения на мини конференции.	См. разделы 6.2 и 6.3, 8, 9 данного документа.
3.	Решение задач	Проверка домашних задач.	См. разделы 7.3, 8, 9 данного документа.
4.	Подготовка к коллоквиуму	Промежуточная аттестация в форме контрольной работы.	См. разделы 7.3, 8, 9 данного документа.
5.	Подготовка к экзамену.	Устный опрос, либо компьютерное тестирование.	См. разделы 7.3, 8, 9 данного документа.

1. Текущий контроль: подготовка реферата, презентации и доклада.
2. Текущий контроль: решение задач.
3. Промежуточная аттестация в форме контрольной работы.

Текущий контроль успеваемости осуществляется непрерывно, на протяжении всего курса. Прежде всего, это устный опрос по ходу практических занятий, выполняемый для оперативной активизации внимания студентов и оценки их уровня восприятия. Для текущего контроля используется и такой вид самостоятельной работы как подготовка рефератов, содержание которых

будет представлено публично на практическом занятии и сопровождается презентацией. Выбор темы реферата согласуется с лектором.

Промежуточный контроль проводится в форме контрольной работы, в которой содержатся теоретические вопросы и задачи.

Итоговый контроль проводится либо в виде устного экзамена, либо в форме тестирования.

Оценка “отлично” ставится за уверенное владение материалом курса. Оценка “хорошо” ставится при полном выполнении требований к прохождению курса и умении ориентироваться в изученном материале. Оценка “удовлетворительно” ставится при достаточном выполнении требований к прохождению курса и владении конкретными знаниями по программе курса. Оценка “неудовлетворительно” ставится, если требования к прохождению курса не выполнены и студент не может показать владение материалом.

7. Фонд оценочных средств для проведения текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины.

7.1. Перечень компетенций с указанием этапов их формирования в процессе освоения образовательной программы.

Перечень компетенций с указанием этапов их формирования приведен в описании образовательной программы.

Код компетенции из ФГОС ВО	Наименование компетенции из ФГОС ВО	Планируемые результаты обучения	Процедура освоения
ОК-7	Готовность к саморазвитию, самореализации, использованию творческого потенциала	<i>Знает</i> : предметную область химии. <i>Умеет</i> : работать самостоятельно и в коллективе, формулировать результат; публично представить собственные и известные научные результаты. <i>Владеет</i> : способностью к самоорганизации и к самообразованию; навыками самостоятельной научно-исследовательской работы; способностью формулировать результат.	Устный опрос, письменный опрос
ОПК-1	Способностью воспринимать, развивать и использовать теоретические основы традиционных и новых разделов химии при решении профессиональных задач	<i>Знает</i> : теоретические основы традиционных и новых разделов кристаллохимии <i>Умеет</i> : воспринимать, развивать и использовать теоретические основы традиционных и новых разделов кристаллохимии <i>Владеет</i> : теоретическими основами кристаллохимии при решении профессиональных задач	Устный опрос, письменный опрос
ОПК-2	Владением навыками химического эксперимента, синтетическими и аналитическими методами получения и исследования	<i>Знает</i> : методы исследования структуры кристаллических тел. <i>Умеет</i> : осуществлять химический эксперимент по предлагаемой методике, анализировать полученные экспериментальные данные, интерпретировать полученные экспериментальные результаты	Письменный опрос

3) $\frac{6}{m}$

4) 622

8. Какая формула по международной символике соответствует совокупности элементов симметрии $3L_2$?

1) 2

2) 222

3) 32

4) 23

9. Какая формула по международной символике соответствует совокупности элементов симметрии $3L_4 4L_3 6L_2 9PC$?

1) $m\bar{3}m$

2) $\frac{2}{m}$

3) 432

4) $\frac{4}{m}mm$

10. Какая формула по международной символике соответствует совокупности элементов симметрии $3L_2 4L_3$?

1) $\frac{4}{m}$

2) 32

3) 3243

4) 23

11. Как запишется точечная группа $\frac{2}{m}$ по символике Шенфлиса?

1) D_{2h}

2) D_2

3) C_{2h}

4) C_{4h}

12. Как запишется точечная группа 222 по символике Шенфлиса?

1) D_2

2) D_{222}

3) C_{2h}

4) C_{6h}

13. Чему в пространственной решетке соответствуют грани кристалла?

1) ячейкам

2) сеткам

3) рядам

4) ничему

14. Какое максимальное число осей симметрии 3-го порядка может быть в кристалле?

1) три

2) пять

3) шесть

4) четыре

15. Какое максимальное число осей симметрии 6-го порядка может быть в кристалле?

1) три

2) шесть

3) одна

4) две

16. Чему равен элементарный угол поворота оси симметрии 2-го порядка?

1) 180°

2) 360°

3) 90°

4) 120°

17. К какой сингонии относится ромбододекаэдр?

1) кубической

2) такой фигуры нет в кристаллографии

3) гексагональной

4) ромбической

18. Сколько граней у додекаэдра?

- 3) гексагональный кубоктаэдр 4) тетраэдр
30. Какой координационный многогранник характерен для структурного типа алмаза?
- 1) тригональная призма 2) тетраэдр
3) октаэдр 4) треугольник
31. Какой координационный многогранник характерен для структурного типа меди?
- 1) кубоктаэдр 2) куб
3) тетраэдр 4) октаэдр
32. Какая из перечисленных структур относится к гетеродесмическим структурам?
- 1) CO_2 2) NaCl
3) алмаз 4) сфалерит
33. Определить слойность (число слоев) в периоде следующей плотнейшей шаровой упаковки: ...кГГ...
- 1) 6 2) 8
3) 10 4) 9
34. Определить слойность (число слоев) в периоде следующей плотнейшей шаровой упаковки: ...кГГГ...
- 1) 12 2) 15
3) 8 4) 3
35. В кристаллической структуре AB_2C_4 атомы С образуют плотнейшую упаковку. Координационное число атомов А равно 4, а атомов В – 6. Какая часть пустот заполнена?
- 1) 1/4 октаэдрических и 1/8 тетраэдрических пустот
2) 1/2 октаэдрических и 1/8 тетраэдрических пустот
3) 1/8 октаэдрических и 1/2 тетраэдрических пустот
4) 1/6 октаэдрических и 1/2 тетраэдрических пустот
36. В кристаллической структуре состава $A_xB_yC_{12}$ атомы С образуют плотнейшую шаровую упаковку, атомы А занимают 3/8 тетраэдрических пустот, а атомы В – 2/3 октаэдрических пустот. Найти x и y.
- 1) $x=5$ и $y=6$ 2) $x=9$ и $y=8$
3) $x=7$ и $y=8$ 4) $x=3$ и $y=4$
37. Чему равна плотность алмаза, если параметр кубической ячейки алмаза $3,59 \text{ \AA}$? Структурный тип считать известным.
- 1) $1,47 \text{ г/см}^3$ 2) $2,67 \text{ г/см}^3$
3) $5,23 \text{ г/см}^3$ 4) $3,51 \text{ г/см}^3$
38. Параметры ортогональной ячейки одного из нитратов: $a=5,13$, $b=9,17$, $c=6,45 \text{ \AA}$, $Z=4$, плотность $2,109 \text{ г/см}^3$. Определить какой это нитрат.
- 1) $NaNO_3$ 2) $CsNO_3$
3) KNO_3 4) NH_4NO_3
39. Определить характер структуры хлорида натрия.

- 1) гомодесмическая с ковалентными связями
 - 2) молекулярная структура
 - 3) гетеродесмическая структура
 - 4) гомодесмическая структура с ионными связями
40. Какому координационному числу соответствует следующее отношение:
 $r_k / r_a = 0,22 - 0,41$?
- | | |
|------|------|
| 1) 4 | 2) 2 |
| 3) 6 | 4) 3 |

Контрольные вопросы

1. Предмет кристаллохимии. Взаимосвязь кристаллохимии с другими науками о кристаллах.
2. Кристаллические тела.
3. Решетки. Основные определения.
4. Теорема об узловых плоскостях. Индексы Миллера.
5. Обратная решетка.
6. Симметрия решеток. Операции и элементы симметрии.
7. Точечные операции симметрии. Зеркальное отражение. Инверсия.
8. Поворотные оси симметрии. Теорема об осях симметрии в кристаллических телах.
9. Зеркальные и инверсионные оси симметрии.
10. Пространственные операции симметрии.
11. Понятие группы. Основные определения. Примеры.
12. Точечные группы симметрии. Категории. Сингонии.
13. Кристаллографические многогранники. Простые формы.
14. Решетки Бравэ.
15. Пространственные группы симметрии.
16. Обозначения точечных и пространственных групп симметрии.
17. Решетки и структура кристаллов.
18. Структурный тип. Изоструктурность.
19. Число атомов, приходящихся на ячейку. Число формульных единиц. Рентгеновская плотность.
20. Координационные числа. Координационные полиэдры.
21. Структуры чистых металлов.
22. Структуры типа алмаза и графита.
23. Структуры типа NaCl и CsCl.
24. Структуры типа сфалерита и вюрцита.
25. Структура типа BN.
26. Классификация структурных типов.
27. Кристаллохимические формулы.
28. Плотнейшие шаровые упаковки.
29. Плотнейшие шаровые упаковки и структуры кристаллов.
30. Полиэдрическое изображение кристаллических структур.
31. Химические связи в кристаллах. Металлическая связь. Ковалентная связь.

32. Химические связи в кристаллах. Ионная связь. Связь Ван-дер-Ваальса.
33. Гомо- и гетеродесмические структуры.
34. Кристаллохимические радиусы. Металлические и ионные радиусы.
35. Энергия кристаллических решеток. Цикл Борна-Габеры.
36. Расчет энергии ионных кристаллических решеток.
37. Морфотропия. Автоморфотропия.
38. Полиморфизм.
39. Политипия.
40. Изоморфизм.
41. Рентгеновское излучение.
42. Геометрическое условие дифракции. Подход Вульфа-Брегга.
43. Геометрическое условие дифракции. Подход Лауэ.
44. Качественный фазовый анализ.
45. Индицирование рентгенограмм. Определение типа решеток.
46. Рентгеноструктурный анализ. Основные соотношения рентгеноструктурного анализа.
47. Электронография.
48. Нейтронография.
49. Реальные кристаллы. Линейные, поверхностные, объемные дефекты.
50. Реальные кристаллы. Точечные дефекты.
51. Взаимосвязь структуры кристаллов и физических свойств. Общие принципы.
52. Описание физических свойств с помощью тензоров.
53. Описание некоторых тепловых, электрических, оптических свойств кристаллов.
54. Кристаллохимия силикатов. Силикаты с конечным Si-O мотивом.
55. Кристаллохимия силикатов. Силикаты с бесконечным Si-O мотивом.

Примерная тематика рефератов

1. Методы исследования структуры кристаллов.
2. Дифракция рентгеновских лучей и ее применение для исследования взаимного расположения атомов в кристаллических материалах.
3. Плотнейшие упаковки частиц в кристаллах.
4. Кристаллохимия силикатов.
5. Выращивание кристаллов.
6. Принцип плотнейшей упаковки с заполнением пустот в описании кристаллических структур бинарных соединений.
7. Кристаллизация карбоната кальция на затравках.
8. Дефекты в кристаллах.
9. Принципы строения корунда и рубина.
10. Очерки истории кристаллохимии.
11. Молекулярные кристаллы.

7.3. Методические материалы, определяющие процедуру оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций.

Общий результат выводится как интегральная оценка, складывающаяся из текущего контроля - 70% и промежуточного контроля - 30%.

Текущий контроль по дисциплине включает:

- посещение занятий - 10 баллов,
- участие на практических занятиях - 30 баллов,
- выполнение домашних (аудиторных) контрольных работ - 30 баллов.

Промежуточный контроль по дисциплине включает:

- устный опрос - 5 баллов,
- письменная контрольная работа - 20 баллов,
- тестирование - 5 баллов.

8. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины

а) основная литература:

1. Попов Г.М., Шафрановский И.И. Кристаллография [Текст]: учебное пособие для вузов/ Г.М. Попов. –5-е изд.- Москва, 1972. – 352 с.
2. Шаскольская М.П. Кристаллография [Текст]: учебное пособие для вузов/ М.П. Шаскольская – Москва, 1976. – 396 с.
3. Пугачев, В.М. Кристаллохимия: учебное пособие / В.М. Пугачев. - Кемерово: Кемеровский государственный университет, 2013. - 104 с. - ISBN 978-5-8353-1322-8 ; То же [Электронный ресурс]. -

URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=232461>

б) дополнительная литература:

1. Бокий Г.Б. Кристаллохимия [Текст]: учебное пособие для вузов/ Г.Б. Бокий. - Москва: Наука, 1971. – 400 с
2. Урусов В.С. Кристаллохимия. Краткий курс [Электронный ресурс]: учебник/ Урусов В.С., Ерёмин Н.Н. Электрон. текстовые данные. М.: Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, 2010. 256 с. Режим доступа: <http://www.iprbookshop.ru/13343.html>.

9. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины.

1. eLIBRARY.RU [Электронный ресурс]: электронная библиотека / Науч. электрон. б-ка. - Москва, 1999 - . Режим доступа: <http://elibrary.ru/defaultx.asp>
2. Moodle [Электронный ресурс]: система виртуального обучения: [база данных] / Даг. гос. ун-т. – Махачкала, г. – Доступ из сети ДГУ или, после регистрации из сети ун-та, из любой точки, имеющей доступ в интернет. – URL: <http://moodle.dgu.ru/>
3. Электронный каталог НБ ДГУ [Электронный ресурс]: база данных содержит сведения о всех видах лит, поступающих в фонд НБ ДГУ / Дагестанский гос.

ун-т. – Махачкала, 2010 – Режим доступа: <http://elib.dgu.ru>

4. ЭБС ibooks.ru [Электронный ресурс]: электронно-библиотечная система. – Режим доступа: <https://ibooks.ru/>
5. ЭБС [book.ru](http://www.book.ru/) [Электронный ресурс]: электронно-библиотечная система. – Режим доступа: www.book.ru/
6. ЭБС [iprbook.ru](http://www.iprbookshop.ru/31168.html) [Электронный ресурс]: электронно-библиотечная система. – Режим доступа: <http://www.iprbookshop.ru/31168.html>

10. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.

Методические указания студентам должны раскрывать рекомендуемый режим и характер учебной работы по изучению теоретического курса (или его раздела/части), практических и/или семинарских занятий, лабораторных работ (практикумов), и практическому применению изученного материала, по выполнению заданий для самостоятельной работы, по использованию информационных технологий и т.д. Методические указания должны мотивировать студента к самостоятельной работе и не подменять учебную литературу.

Указывается **перечень** учебно-методических изданий, рекомендуемых студентам для подготовки к занятиям и выполнения самостоятельной работы, а также методические материалы на бумажных и/или электронных носителях, выпущенные кафедрой своими силами и предоставляемые студентам во время занятий:

- рабочие тетради студентов;
- наглядные пособия;
- гlossарий (словарь терминов по тематике дисциплины);
- тезисы лекций,
- раздаточный материал и др.

Самостоятельная работа студентов, предусмотренная учебным планом в объеме не менее 50-70% общего количества часов, должна соответствовать более глубокому усвоению изучаемого курса, формировать навыки исследовательской работы и ориентировать студентов на умение применять теоретические знания на практике.

Задания для самостоятельной работы составляются по разделам и темам, по которым не предусмотрены аудиторские занятия, либо требуется дополнительно проработать и проанализировать рассматриваемый преподавателем материал в объеме запланированных часов.

Задания по самостоятельной работе могут быть оформлены в виде таблицы с указанием конкретного вида самостоятельной работы:

- конспектирование первоисточников и другой учебной литературы;
- проработка учебного материала (по конспектам лекций учебной и научной литературе) и подготовка докладов на семинарах и практических занятиях, к участию в тематических дискуссиях и деловых играх;
- работа с нормативными документами и законодательной базой; -поиск и обзор научных публикаций и электронных источников информации, подготовка заключения по обзору;
- выполнение контрольных работ, творческих (проектных) заданий, курсовых работ (проектов);
- решение задач, упражнений;
- написание рефератов (эссе);
- работа с тестами и вопросами для самопроверки;
- выполнение переводов на иностранные языки/с иностранных языков;

-моделирование и/или анализ конкретных проблемных ситуаций ситуации;

-обработка статистических данных, нормативных материалов;

-анализ статистических и фактических материалов, составление выводов на основе проведенного анализа и т.д.

Самостоятельная работа должна носить систематический характер, быть интересной и привлекательной для студента.

Результаты самостоятельной работы контролируются преподавателем и учитываются при аттестации студента (зачет, экзамен). При этом проводятся: тестирование, экспресс-опрос на семинарских и практических занятиях, заслушивание докладов, проверка письменных работ и т.д.

Разделы и темы для самостоятельно-го изучения	Виды и содержание самостоятельной работы
1. Решетки. Основные определения.	Проработка учебного материала (по конспектам лекций, по учебной и научной литературе).
2. Симметрия. Операции и элементы симметрии решеток.	Проработка учебного материала (по конспектам лекций, по учебной и научной литературе). Выполнение домашнего задания
3. Точечные группы симметрии. Пространственные группы симметрии	Проработка учебного материала (по конспектам лекций, по учебной и научной литературе). Изготовление кристаллографического многогранника. Выполнение домашнего задания
4. Кристаллографические многогранники. Простые формы.	Проработка учебного материала (по конспектам лекций, по учебной и научной литературе). Изготовление кристаллографического многогранника. Выполнение домашнего задания.
5. Координационные числа и координационные полиэдры.	Проработка учебного материала (по конспектам лекций, по учебной и научной литературе).
6. Структурные типы. Описание и сопоставление. Описание структур в терминах ПШУ.	Проработка учебного материала (по конспектам лекций, по учебной и научной литературе). Выполнение домашнего задания.
7. Типы химической связи в кристаллах.	Проработка учебного материала (по конспектам лекций, по учебной и научной литературе). Выполнение домашнего задания.
8. Основные категории кристаллохимии.	Проработка учебного материала (по конспектам лекций, по учебной и научной литературе).
9. Основные этапы рентгеноструктурного анализа.	Проработка учебного материала (по конспектам лекций, по учебной и научной литературе).
10. Дифракция рентгеновских лучей.	Проработка учебного материала (по конспектам лекций, по учебной и научной литературе).
11. Сравнение дифракционных методов изучения кристаллической структуры (рентгенография, нейтронография, электронография).	Проработка учебного материала (по конспектам лекций, по учебной и научной литературе).
12. Реальные кристаллы. Дефекты в кристаллах.	Проработка учебного материала (по конспектам лекций, по учебной и научной литературе).
13. Тензорное описание физических свойств кристаллов.	Проработка учебного материала (по конспектам лекций, по учебной и научной литературе).

11. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине, включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем.

При осуществлении образовательного процесса по дисциплине «Кристаллохимия» используются следующие информационные технологии:

1. Программа для ЭВМ Microsoft Imagine Premium, 3 years, Renewal. Производитель: Microsoft Corporation Товарный знак: Майкрософт Корпорейшн (Microsoft®) Страна происхождения: Ирландия. Контракт №188-ОА, «21» ноября 2018 г.

2. ABBYY Fine Reader 10 Professional Edition по ГК №26-ОА от «07» декабря 2009 г.

3. Acrobat Professional 9 Academic Edition и Acrobat Professional 9 DVD Set Russian Windows ГК №26-ОА от «07» декабря 2009 г.

4. ChemOffice Professional AcademicEdition (приложение № 2 к Государственному контракту №26-ОА от «07» декабря 2009 г.)

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

В соответствии с требованиями ФГОС ВО кафедра имеет специально оборудованную учебную аудиторию для проведения лекционных и семинарских занятий по потокам студентов. Помещение для лекционных занятий укомплектовано техническими средствами обучения (экран настенный с электроприводом и дистанционным управлением, мультимедиа проектор с ноутбуком).

Дисциплина также располагает моделями кристаллических многогранников и моделями важнейших структурных типов кристаллов.