

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РФ
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

Специалист

Форма обучения

Очная

Статус дисциплины: базовая

Махачкала, 2017 г.

Аннотация рабочей программы дисциплины

Дисциплина “Кристаллохимия” входит в базовую часть образовательной программы 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: профессиональных – ОПК-1, 2, 5.

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

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

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

Се- местр	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	Лабораторные занятия	Практи- ческие занятия	КСР		кон- сульта- ции	
7 сем.	180	36	-	54	-	-	54+36	Экзамен

1. 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 ООП специалитета

Дисциплина “Кристаллохимия” входит в базовую часть образовательной программы 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)

Компетенции	Формулировка компетенции из ФГОС ВО	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций)
ОПК-1	Способность воспринимать, развивать и использовать теоретические основы традиционных и новых разделов химии при решении профессиональных задач	Знать: теоретические основы традиционных и новых разделов кристаллохимии Уметь: воспринимать, развивать и использовать теоретические основы традиционных и новых разделов кристаллохимии Владеть: теоретическими основами кристаллохимии при решении профессиональных задач
ОПК-2	Владение навыками химического эксперимента, синтетическими и аналитическими методами получения и исследования химических веществ и реакций	Знать: методы исследования структуры кристаллических тел. Уметь: осуществлять химический эксперимент по предлагаемой методике, анализировать полученные экспериментальные данные, интерпретировать полученные экспериментальные результаты. Владеть: навыками эксперимента, методами исследования структуры кристаллических веществ
ОПК-5	Способность к поиску, обработке, анализу научной информации и формулировке на их основе выводов и предложений	Знать: источники поиска научной информации по традиционным и новым разделам кристаллохимии Уметь: искать, обрабатывать и анализировать научную информацию по кристаллохимии с дальнейшим формированием на их основе определенных выводов и предложений Владеть: основами современных методов анализа научной информации

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-мест р	Не-деля семестра	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу студентов и трудоемкость (в часах)				Само-стоя-тель-ная ра-бота	Формы текущего кон-троля успеваемости (по неделям семестра) Форма промежуточ-ной аттестации (по се-местрам)
				Ле-кц-ии	П-ра-кт-ич-ес-ки-е за-ня-ти-я	Л-аб-ор-ат-ор-ные ра-боты	К-он-тр-оль-ная ра-бота		
Модуль 1. Основы геометрической кристаллографии									
1	Решетки. Основные определения.	7		2	4			2	Устный опрос, контрольная работа, коллоквиум
2	Симметрия. Опера-ции и элементы симметрии решеток.	7		4	4			2	Устный опрос, контрольная работа, коллоквиум
3	Точечные группы симметрии. Про-странственные группы симметрии	7		4	4			2	Устный опрос, контрольная работа, коллоквиум
4	Кристаллографиче-ские 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 координа-ционные полиэдры.	7		2	4			2	Устный опрос, контрольная работа, коллоквиум
6	Структурные типы. Описание и сопос-тавление. Описание структур в терминах ПШУ.	7		6	4			2	Устный опрос, контрольная работа, коллоквиум
7	Типы химической связи в кристаллах.	7		2	4			2	Устный опрос, контрольная работа, коллоквиум
8	Основные категории	7		2	4			2	Устный опрос,

	кристаллохимии.							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	

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

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 символика Шенфлиса для точечных групп. Принципы символика Германа-Могена. Элементарная ячейка. Группы трансляций. Решетки Бравэ. Пространственные группы симметрии. Симморфные и несимморфные груп-

пы 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. Слоистость 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.

Темы практических и/или семинарских занятий

Модуль 1. Основы геометрической кристаллографии

Тема 1. Решетки. Основные определения.

Практическое занятие 1. Введение.

Вопросы к теме:

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.

Практическое занятие 2. Решетка. Основные определения.

Вопросы к теме:

1. Решетка: одномерная, двумерная, трехмерная.
2. Узлы решетки, узловые прямые и узловые плоскости и их символы.
3. Теорема об узловых плоскостях.
4. Правила определения индексов Миллера.

Литература: осн. [1,3,4], доп. [6]

Тема 2. Симметрия. Операции и элементы симметрии решеток

Практическое занятие 1. Симметрия кристаллов. Элементы симметрии

Вопросы к теме:

1. Симметрия геометрических фигур.
2. Элементы симметрии: центр симметрии, оси симметрии, плоскость симметрии.

Практическое занятие 2. Симметрия кристаллов. Операции симметрии

1. Операции симметрии: точечные и пространственные.

Литература: осн. [1,2,3,4], доп. [1]

Тема 3. Точечные группы симметрии. Пространственные группы симметрии.

Практическое занятие 1. Точечные группы симметрии.

Вопросы к теме:

1. Вывод 32 точечных групп симметрии.

Практическое занятие 2. Категории и сингонии.

Вопросы к теме:

1. Категории и сингонии.

2. Виды симметрии

Практическое занятие 3. Обозначения точечных групп симметрии

Вопросы к теме:

1. Принципы символики Бравэ.

2. Принципы символики Шенфлиса.

3. Принципы символики Германа-Могена.

Практическое занятие 4. Пространственные группы симметрии

1. Пространственные группы симметрии.

2. Симморфные и несимморфные группы симметрии.

3. Обозначения пространственных групп симметрии.

4. Решетки Бравэ.

Литература: осн. [1,2,3,4], доп. [1]

Тема 4. Кристаллографические многогранники. Простые формы

Практическое занятие 1. Понятие простой формы. Определение групп симметрии кристаллографических многогранников.

Вопросы к теме:

1. Простые формы кристаллов и их комбинации.

2. Простые формы низших сингоний.

3. Простые формы средних сингоний.

4. Простые формы кубической сингонии.

Литература: осн. [1,2,3,4], доп. [1]

Модуль 2. Систематическая кристаллохимия

Тема 5. Координационные числа и координационные полиэдры

Практическое занятие 1. Координационные числа и координационные полиэдры.

Вопросы к теме:

1. Число формульных единиц в ячейке и рентгеновская плотность.

Практическое занятие 2.

Вопросы к теме:

1. Координационные числа.

2. Координационные многогранники.

Литература: осн. [1,2,3,4], доп. [3,6]

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

Практическое занятие 1. Описание важнейших структурных типов.

Вопросы к теме:

1. Кристаллические структуры чистых металлов.

2. Структуры типа алмаза и графита.

Практическое занятие 2. Описание важнейших структурных типов.

Вопросы к теме:

1. Структуры типа NaCl и CsCl.
2. Структуры типа сфалерита и вюрцита.
3. Структуры типа флюорита и нитрида бора.

Практическое занятие 3. Плотнейшие шаровые упаковки.

Вопросы к теме:

1. Описание структур в терминах плотнейших шаровых упаковок (ПШУ).
2. Кубическая и гексагональная ПШУ.
3. Слоистость ПШУ. Обозначения ПШУ.

Практическое занятие 4. Плотнейшие шаровые упаковки.

Вопросы к теме:

1. Координационные числа, координационные полиэдры в ПШУ.
2. Тетраэдрические и октаэдрические пустоты в ПШУ.

Литература: осн. [1,2,3,4], доп. [3,6]

Тема 7. Типы химической связи в кристаллах.

Практическое занятие 1. Типы химической связи.

Вопросы к теме:

1. Основные типы химической связи в кристаллах.

Практическое занятие 2. Типы химической связи.

Вопросы к теме:

1. Промежуточные типы химической связи.
2. Гомо и гетеродесмические структуры.
3. Классификация структурных типов.

Практическое занятие 3. Кристаллохимические радиусы

Вопросы к теме:

1. Кристаллохимические радиусы атомов.
2. Металлические и ионные радиусы.
3. Коэффициент плотности упаковки металлических и ионных кристаллов.

Практическое занятие 4. Кристаллохимические радиусы

Вопросы к теме:

1. Ковалентные и ван-дер-ваальсовы радиусы.
2. Энергия кристаллических структур.

Литература: осн. [1,2,3,4], доп. [3,6]

Тема 8. Основные категории кристаллохимии.

Практическое занятие 1. Основные категории кристаллохимии.

Вопросы к теме:

1. Изоморфизм. Совершенный и несовершенный изоморфизм.
2. Твердые растворы.
3. Морфотропия. Автоморфотропия.

Практическое занятие 2. Основные категории кристаллохимии.

Вопросы к теме:

1. Полиморфизм. Полиморфные превращения.
2. Классификация типов полиморфизма.
3. Политипия.

Литература: осн. [1,3,4], доп. [3,6]

Модуль 3. Основы дифракционных методов исследования кристаллов.

Тема 9. Основные этапы рентгеноструктурного анализа.

Практическое занятие 1. Рентгеноструктурный анализ.

Вопросы к теме:

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

Литература: осн. [1,3], доп. [5,6]

Тема 10. Дифракция рентгеновских лучей.

Практическое занятие 1. Дифракция рентгеновских лучей.

Вопросы к теме:

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

Литература: осн. [1,3], доп. [5,6]

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

Практическое занятие 1. Дифракционные методы изучения кристаллической структуры веществ.

Вопросы к теме:

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

Литература: осн. [1,3], доп. [5,6]

Модуль 4. Реальные кристаллы

Тема 12. Реальные кристаллы.

Практическое занятие 1. Дефекты в структурах кристаллов.

Вопросы к теме:

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.

Литература: осн. [1,3,4].

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.

6.1. 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.

6.2 Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине

Тематика рефератов ежегодно подвергается пересмотру и обновлению соответственно появлению новых средств и методов работы информацией. Предлагается следующий список рефератов, который может быть расширен и уточнен при обсуждении и конкретизации со студентами.

6.3. Примеры тем 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. 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.

Компетенция ОПК-1	Знания, умения, навыки Знать: теоретические основы традиционных и новых разделов кристаллохимии	Процедура освоения Устный опрос, письменный опрос, тестирование
	Уметь: воспринимать, развивать и использовать теоретические основы традиционных и новых разделов кристаллохимии	Письменный опрос, коллоквиум
	Владеть: теоретическими основами кристаллохимии при решении профессиональных задач	Круглый стол, деловая игра
ОПК-2	Знать: методы исследования структуры кристаллических тел. Уметь: осуществлять химический эксперимент по предлагаемой методике, анализировать полученные экспериментальные данные, интерпретировать полученные экспериментальные результаты.	Устный опрос, письменный опрос, тестирование Письменный опрос, коллоквиум
	Владеть: навыками эксперимента, методами исследования структуры кристаллических веществ	Круглый стол, деловая игра
ОПК-5	Знать: источники поиска научной информации по традиционным и новым разделам кристаллохимии	Устный опрос, письменный опрос, тестирование
	Уметь: искать, обрабатывать и анализировать научную информацию по кристаллохимии с дальнейшим формированием на их основе определенных выводов и предложений	Письменный опрос, коллоквиум
	Владеть: основами современных методов анализа научной информации	Круглый стол, деловая игра

7.2. Описание показателей и критериев оценивания компетенций, описание шкал оценивания.

ОПК-1 – “Способность воспринимать, развивать и использовать теоретические основы традиционных и новых разделов химии при решении профессиональных задач”

Уровень	Показатели (что обучающийся должен продемонстрировать)	Оценочная шкала		
		Удовлетворительно	Хорошо	Отлично

ОПК-1	Знать: теоретические основы традиционных и новых разделов кристаллохимии	Знает теоретические основы традиционных разделов кристаллохимии	Знает теоретические основы традиционных и новых разделов кристаллохимии	Владеет в полном объеме
	Уметь: воспринимать, развивать и использовать теоретические основы традиционных и новых разделов кристаллохимии	Умеет использовать теоретические основы традиционных разделов кристаллохимии	Умеет использовать теоретические основы кристаллохимии и развивать их	Владеет в полном объеме
	Владеть: теоретическими основами кристаллохимии при решении профессиональных задач	Недостаточно владеет теоретическими основами кристаллохимии	Хорошо владеет теоретическими основами кристаллохимии	Владеет в полном объеме

ОПК-2 «Владение навыками химического эксперимента, синтетическими и аналитическими методами получения и исследования химических веществ и реакций».

Уровень	Показатели (что обучающийся должен продемонстрировать)	Оценочная шкала		
		Удовлетворительно	Хорошо	Отлично
ОПК-2	Знать: методы исследования структуры кристаллических тел	Знает основы дифракционных методов исследования структуры кристаллов	Знает основы дифракционных методов исследования структуры более глубоко	Владеет в полном объеме
	Уметь: осуществлять химический эксперимент по предлагаемой методике, анализировать полученные экспериментальные данные, интерпретировать полученные экспериментальные результаты	Умеет осуществлять химический эксперимент по предлагаемой методике	Умеет осуществлять химический эксперимент, анализировать полученные данные	Владеет в полном объеме
	Владеть: навыками эксперимента, методами исследования структуры кристаллических веществ	Слабо владеет навыками выполнения эксперимента	Хорошо владеет навыками и приемами выполнения эксперимента	Владеет в полном объеме

ОПК-5 «Способность к поиску, обработке, анализу научной информации и формулировке на их основе выводов и предложений»

Уровень	Показатели (что обучаю-	Оценочная шкала
---------	-------------------------	-----------------

	щийся должен продемонстрировать)	Удовлетворительно	Хорошо	Отлично
ОПК-5	Знать: источники поиска научной информации по традиционным и новым разделам кристаллохимии	Ограниченно знаком с источниками научной информации	Хорошо знаком с источниками научной информации	Владеет в полном объеме
	Уметь: искать, обрабатывать и анализировать научную информацию по кристаллохимии с дальнейшим формированием на их основе определенных выводов и предложений	Умеет искать и обрабатывать информацию	Умеет искать, обрабатывать и анализировать информацию по кристаллохимии	Владеет в полном объеме
	Владеть: основами современных методов анализа научной информации	Владеет навыками отдельных методов анализа научной информации	Владеет навыками большого круга методов анализа научной информации	Владеет в полном объеме

Если хотя бы одна из компетенций не сформирована, то положительная оценки по дисциплине быть не может.

7.3. Типовые контрольные задания.

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.

Формы контроля и критерии оценок

Формы контроля: текущий контроль (систематический учет знаний и активность студентов на занятиях), промежуточный контроль по модулю (рубежная контрольная работа по пройденному блоку тем) и итоговой

контроль(экзамен). Текущий контроль осуществляется в виде устного опроса, тестирования, проведения коллоквиума, обсуждения реферата, проверки домашнего задания.

Оценка текущего контроля включает 70 баллов:

- активность на семинарском занятии (10 баллов);
- допуск к выполнению лабораторных работ (10 баллов);
- выполнение и сдача лабораторных работ (20 баллов);
- тестирование (10 баллов);
- выполнение контрольной работы (с включением задач) – 20 баллов.

Промежуточный контроль (в виде контрольной работы или коллоквиума) оценивается в 30 баллов.

Итоговый контроль (100 баллов) проводится в виде устного собеседования или в виде письменного теста, содержащего вопросы по всем разделам курса “Кристаллохимия”, изучавшимся в процессе семестра. Среднее число баллов по всем модулям, которое дает право получения положительной оценки без итогового контроля знаний – 51 и выше.

Вопросы по текущему контролю

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.

34. Определить слоистость (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

7.4. 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:

- выполнение практических заданий – 25 баллов,
- выполнение домашних (аудиторных) контрольных работ - 25 баллов.
- тестирование - 10 баллов.

- устный опрос - 10 баллов,
- Промежуточный контроль по дисциплине включает:
- письменная контрольная работа - 30 баллов.

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

а) основная литература:

1. Бокий Г.Б. Кристаллохимия. М.: Наука, 1971.
2. Зоркий П.М. Задачник по кристаллохимии и кристаллографии. М.: Изд-во Моск. ун-та, 1981. <http://www.chem.msu.su/rus/teaching/zorkii1/all.pdf>
3. Попов Г.М., Шафрановский И.И. Кристаллография. М.: 1972.
4. Шаскольская М.П. Кристаллография. М.:1976.
5. Урусов В.С. Теоретическая кристаллохимия. М.: Изд-во МГУ, 1982.
http://cryst.geol.msu.ru/courses/crchem/urusov87_01.pdf

б) дополнительная литература:

1. Вайнштейн Б.К. Современная кристаллография. В 4 т. М.: Наука. 1979.
2. Харгиттай И., Харгиттай М. Симметрия глазами химика. М.: Мир, 1989.
3. Пенкаль. Очерки кристаллохимии. Л.: "Химия". 1974.
4. Зоркий П.М. Симметрия молекул и кристаллических структур. М.: Изд-во Моск. ун-та, 1986.
5. Порай-Кошиц М.А. Основы структурного анализа химических соединений. М.: Высш. шк., 1989.

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

1. Электронные образовательные ресурсы сервера ДГУ elib.dgu.ru
2. Гаюи Р.Ж. Структура кристаллов:
http://www.biblioclub.ru/104729_Struktura_kristallov.html (открыт 01.03.13)
3. <http://www.reciprocalnet.org/edumodules/symmetry/index.html>
4. <http://www.chem.msu.su/rus/cryst/crychem/pdf/lect15.pdf>
5. <http://www.chemNet.ru> - Российская сеть химической информации.
6. <http://www.alhimik.ru> – Сайт химических новостей.

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 конкретновида 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 самостоятельного 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:

- Занятия компьютерного тестирования.
- Демонстрационный материал применением проектора и интерактивной доски.
- Компьютерные программы для статистической обработки результатов.
- Программы пакета MicrosoftOffice

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

В соответствии с требованиями ГОС 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.