Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Щёкина Вера Витальевна
Должность: Ректор
Дата подписания: 05.03.2026 08:10:45
Уникальный программный ключ:
a2232a55157e576551af9996159b82af53989420420336ffbf573a434e57789

	МИНИСТЕРСТВО ПРОСВЕЩЕНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
	федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Благовещенский государственный педагогический университет»
	ОСНОВНАЯ ОБРАЗОВАТЕЛЬНАЯ ПРОГРАММА **Рабочая программа дисциплины**

УТВЕРЖДАЮ
Декан естественно-географического факультета ФГБОУ ВО «БГПУ»

_____ И.А. Трофимцова
«28» июня 2023 г.

Рабочая программа дисциплины
КРИСТАЛЛОХИМИЯ

Направление подготовки
04.03.01 ХИМИЯ

Профиль
«АНАЛИТИЧЕСКАЯ ХИМИЯ»

Уровень высшего образования
БАКАЛАВРИАТ

Принята на заседании кафедры химии
(протокол № 9 от «28» июня 2023 г.)

Благовещенск 2023

СОДЕРЖАНИЕ

1 ПОЯСНИТЕЛЬНАЯ ЗАПИСКА ……. 3
2 УЧЕБНО-ТЕМАТИЧЕСКОЕ ПЛАНИРОВАНИЕ …….. 5
3 СОДЕРЖАНИЕ ТЕМ (РАЗДЕЛОВ) …….. 8
4 МЕТОДИЧЕСКИЕ РЕКОМЕНДАЦИИ (УКАЗАНИЯ) ДЛЯ СТУДЕНТОВ ПО ИЗУЧЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ ……... 11
5 ПРАКТИКУМ ПО ДИСЦИПЛИНЕ ……... 12
6 ДИДАКТИЧЕСКИЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ КОНТРОЛЯ(САМОКОНТРОЛЯ) УСВОЕННОГО МАТЕРИАЛА …….. 21
7 ПЕРЕЧЕНЬ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ В ПРОЦЕССЕ ОБУЧЕНИЯ …… 33
8 ОСОБЕННОСТИ ИЗУЧЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ ИНВАЛИДАМИ И ЛИЦАМИ С ОГРАНИЧЕННЫМИ ВОЗМОЖНОСТЯМИ ЗДОРОВЬЯ …… 33
9 СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ И ИНФОРМАЦИОННЫХ РЕСУРСОВ …… 34
10 МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКАЯ БАЗА ……. 34
11 ЛИСТ ИЗМЕНЕНИЙ И ДОПОЛНЕНИЙ ……... 37

1 ПОЯСНИТЕЛЬНАЯ ЗАПИСКА

1.1 Цель дисциплины: сформировать представления о строении и свойствах кристаллов, разнообразии типов кристаллических структур, основах систематики кристаллического вещества.

1.2 Место дисциплины в структуре ООП

Дисциплина «Кристаллохимия» относится к дисциплинам части, формируемой участниками образовательных отношений блока Б1 (Б1.В.17).

Содержание дисциплины тесно связано и опирается на такие ранее изученные дисциплины, как физика, информатика, математика, неорганическая химия.

1.3 Дисциплина направлена на формирование следующих компетенций: ОПК-1, ОПК-2, ПК-1:

- **ОПК-1.** Способен анализировать и интерпретировать результаты химических экспериментов, наблюдений и измерений, **индикаторами** достижения которой является:

- ОПК-1.1 Систематизирует и анализирует результаты химических экспериментов, наблюдений, измерений, а также результаты расчетов свойств веществ и материалов.
- ОПК-1.2 Предлагает интепретацию результатов собственных экспериментов и расчетно-теоретических работ с использованием теоретических основ традиционных и новых разделов химии.
- ОПК-1.3 Формулирует заключения и выводы по результатам анализа литературных данных, собственных экспериментальных и расчетно-теоретических работ хиическкрой направленности.

- **ОПК-2.** Способен проводить с соблюдением норм техники безопасности химический эксперимент, включая синтез, анализ, изучение структуры и свойств веществ и материалов, исследование процессов с их участием, **индикаторами** достижения которой является:

- ОПК-2.1 Работает с химическими веществами с соблюдением норм техники безопасности.
- ОПК-2.2 Синтезирует вещества и материалы разной природы с использованием имеющихся методик.
- ОПК-2.3 Проводит стандартные операции для определения химического и фазового состава веществ и материалов на их основе.
- ОПК-2.4 Исследует свойства веществ и материалов с использованием серийного научного оборудования.

- **ПК-1.** Владеет системой фундаментальных химических понятий и законов, **индикаторами** достижения которой является:

- ПК-1.1 Понимает основные принципы, законы, методологию изучаемых химических дисциплин, теоретические основы физических и физико-химических методов исследования;
- ПК-1.2 Использует фундаментальные химические понятия в своей профессиональной деятельности;
- ПК-1.3 Интерпретирует полученные результаты, используя базовые понятия химических дисциплин.

1.4 Перечень планируемых результатов обучения. В результате изучения дисциплины студент должен

- знать:

- пути поиска информации для использования полученных теоретических и практических знаний в области общей и неорганической химии;
- основы поиска, критического анализа и синтеза информации, системного подхода для решения поставленных задач в рамках дисциплины кристаллохимия;
- методы и способы обработки информации результатов химического эксперимента, результатов наблюдений и измерений;

- информационные источники справочного, научного, нормативного характера;
- методы выращивания кристаллов;
- - основные положения геометрической кристаллографии;
- экспериментальные методы определения кристаллических структур;
- типы химической связи в кристаллах;
- типы кристаллических структур, основные принципы классификации структур;

- уметь:

- применять и анализировать основы поиска, критического анализа и синтеза информации, системного подхода для решения поставленных задач;
- анализировать задачу, выделяя ее базовые составляющие и осуществляет декомпозицию задачи;
- грамотно, логично, аргументированно формировать собственные суждения и оценки;
- отличать факты от мнений, интерпретаций, оценок и т.д. в рассуждениях других участников деятельности;
- определять и оценивать практические последствия возможных решений;
- сопоставляет разные источники информации с целью выявления их противоречий и поиска достоверных суждений;
- - выращивать кристаллы в лабораторных условиях.
- - пользоваться базами структурных данных.
- ставить химический эксперимент, анализировать и оценивать лабораторные исследования;
- проводить самостоятельный поиск химической информации с использованием различных источников (научно-популярных изданий, компьютерных баз данных, ресурсов Internet);

- владеть:

- навыками анализа, применения основ поиска, критического анализа и синтеза информации, системного подхода для решения поставленных задач в рамках дисциплины общая и неорганическая химия;
- навыками анализа задачи, выделяя ее базовые составляющие и осуществляя декомпозицию задачи;
- навыками грамотно, логично, аргументированно формировать собственные суждения и оценки;
- навыками отличать факты от мнений, интерпретаций, оценок и т.д. в рассуждениях других участников деятельности;
- способностью определять и оценивать практические последствия возможных решений;
- навыками делать заключения и выводы по результатам анализа литературных данных, собственных экспериментальных и расчетно-теоретических работ по неорганической химии;
- навыками систематизировать и анализировать результаты химических экспериментов, наблюдений, измерений, а также результаты расчетов свойств веществ и материалов на их основе;
- способами ориентации в профессиональных источниках информации (журналы, сайты, образовательные порталы);
- навыками постановки эксперимента, анализа и оценки результатов лабораторных исследований;
- методами приготовления растворов заданной концентрации.

1.5 Общая трудоемкость дисциплины «Кристаллохимия» составляет 2 зачетных единицы (далее – ЗЕ) (72 часа).

Программа предусматривает изучение материала на лекциях и лабораторных занятиях. Предусмотрена самостоятельная работа студентов по темам и разделам. Проверка знаний осуществляется фронтально, индивидуально.

1.6 Объем дисциплины и виды учебной деятельности

Объем дисциплины и виды учебной деятельности

Вид учебной работы	Всего часов	Семестр 3
Общая трудоемкость	72	72
Аудиторные занятия	44	44
Лекции	20	20
Лабораторные работы	24	24
Самостоятельная работа	28	28
Вид итогового контроля:	-	зачет

2 УЧЕБНО-ТЕМАТИЧЕСКОЕ ПЛАНИРОВАНИЕ

Учебно-тематический план

№	Наименование тем (разделов)	Всего часов	Аудиторные занятия		Самостоятельная работа
			Лекции	Лабораторные занятия	
I	**Введение**	**4**	**2**		**2**
1	Предмет и задачи кристаллохимии	2	1		1
2	Кристаллохимия как часть химии	2	1		1
II	**Основные понятия и элементы структурной кристаллографии**	**14**	**4**	**6**	**4**
1	Симметрия молекул. Закрытые и открытые операции и элементы симметрии. Точечные группы симметрии, их классификация.	3	2		1
	Основные понятия и элементы структурной кристаллографии. Симметрия.	7		6	1
2	Группа трансляций – решетка кристалла. Типы решеток Бравэ. Классы симметрии, сингонии, категории.	4	2		2
III	**Рентгенография и структурный анализ кристаллов**	**19**	**4**	**9**	**6**
1	Физические основы рентгеноструктурного анализа. Классические методы получения дифракционных эффектов. Условие Вульфа-Брэгга, уравнение Лауэ.	3	2		1

2	Характеристика дифракционных методов структурного анализа. – РСА, ЭСА(электронный структурный анализ), НСА (нейтронный структурный анализ)	2	1		1
3	Способы расшифровки кристаллических структур, уточнение структуры, ее числовые параметры и критерии достоверности структурной модели. Методы и программы автоматического решения и уточнения кристаллических структур.	2	1		1
	Лабораторная работа Рентгенография и структурный анализ кристаллов.	4		3	1
	Лабораторная работа Рентгенография и структурный анализ кристаллов. Основные способы выращивания кристаллов	4		3	1
	Лабораторная работа Рентгенография и структурный анализ кристаллов. Основные способы получения кристаллов	4		3	1
IV	**Общие принципы кристаллохимии**	**11**	**4**	**3**	**4**
1	Типы химической связи в кристаллах. Гомо- и гетеродесмические структуры. Координационные (монолитные), островные, цепочечные, слоистые, каркасные структуры.	2	1		1
2	Описание структур в терминах плотнейших шаровых упаковок (ПШУ) и плотнейших шаровых кладок (ПШК)	2	1		1
3	Кристаллохимические радиусы атомов. Металлические, ионные, ковалентные и ван-дер-ваальсовы радиусы.	1	1		
4	Кристаллохимические явления. Изоструктурность, гомеотипия, гетеротипия, изоморфизм, полиморфизм, морфотропия.	2	1		1
5	Лабораторная работа Общие принципы кристаллохимии	4		3	1
V	**Систематическая кристаллохимия**	**15**	**4**	**3**	**8**

1	Простые вещества. Типичные и аномальные структуры металлов, неметаллов.	2	1		1
2	Общая характеристика кристаллических структур бинарных соединений. Интерметаллиды, гидриды, галогениды, оксиды, халькогениды.	2	1		1
3	Структуры солей кислородных кислот (перхлораты, хлораты, сульфаты, нитраты, фосфаты, карбонаты, силикаты)	3	1		2
4	Кристаллические структуры координационных соединений. Кристаллогидраты. Клатраты. Молекулярные комплексы.	3	1		2
5	Лабораторная работа Систематическая кристаллохимия.	5		3	2
VI	**Обобщенная кристаллохимия**	**9**	**2**	**3**	**4**
1	Конденсированные фазы с различной степенью упорядоченности. Строение жидких кристаллов. Элементы ближнего, среднего и дальнего порядка вжидкостях. Жидкокристаллические полимеры. Лиотропные мезофазы.	2	1		1
2	Кристаллы с частичной неупорядоченностью. Ротационно-кристаллическое состояние. Микродвойникование, полисинтетические сростки.	2	1		1
3	Лабораторная работа Обобщенная кристаллохимия.	5		3	2
	Итого	**72**	**20**	**24**	**28**

Интерактивное обучение по дисциплине

№	Наименование тем (разделов)	Вид занятия	Форма интерактивного занятия	Кол-во часов
1.	Основные понятия и элементы структурной кристаллографии. Симметрия	ЛР	Работа в малых группах	6
2.	Рентгенография и структурный анализ кристаллов	ЛР	Работа в малых группах	3
3.	Общие принципы кристаллохимии	ЛР	Работа в малых группах	3
4.	Систематическая кристаллохимия	ЛР	Работа в малых группах	3
ИТОГО				**15**

3 СОДЕРЖАНИЕ ТЕМ (РАЗДЕЛОВ)

I ВВЕДЕНИЕ

Предмет и задачи кристаллохимии.

Кристаллическая структура и способы ее моделирования (статические и динамические, дискретные и континуальные модели). Тепловое движение атомов.

Кристаллохимия как часть химии. Стереохимический и кристаллоструктурный аспекты кристаллохимии. Обобщенная кристаллохимия.

II ОСНОВНЫЕ ПОНЯТИЯ И ЭЛЕМЕНТЫ СТРУКТУРНОЙ КРИСТАЛЛОГРАФИИ

Симметрия молекул. Закрытые и открытые операции и элементы симметрии. Точечные группы симметрии, их классификация.

Кристалл и кристаллическое вещество. Однородность и дискретность кристаллического пространства.

Закрытые операции и элементы симметрии, их обозначение и аналитическое представление. Взаимодействие закрытых операций симметрии. Точечные группы симметрии, их классификация, обозначение (по Шенфлису и международное) и изображение на стереографической проекции.

Основные понятия и элементы структурной кристаллографии. Симметрия.

Симметрия молекул. Орбиты точечных групп. Симметрия и кратность позиции. Структурные классы и симметрийные семейства молекул. Полярность и хиральность молекул, энантиомеры.

Многогранники. Стереографическая проекция нормалей к граням многогранников. Изоэдры и их комбинации. Семейства изоэдров. Изогоны.

Основные понятия и элементы структурной кристаллографии. Симметрия.

Группа трансляций – решетка кристалла. Типы решеток Бравэ. Классы симметрии, сингонии, категории

Группа трансляций - решетка кристалла. Индексы узлов, узловыхрядов и узловых сеток решетки кристалла. Обратная решетка.Открытые операции и элементы симметрии, их обозначение ианалитическое представление. Взаимодействие закрытых и открытыхопераций симметрии кристалла между собой и с трансляциямирешетки.

Классы симметрии, сингонии, категории. Координаты системы и метрика решетки. Типы решеток Бравэ. Графическое изображение пространственных групп. Обозначение пространственных групп симметрии. Системы эквивалентных позиций (правильные системы точек).

Зависимость физических свойств кристаллов от их симметрии. Анизотропия. Свойства, описываемые тензорами второго ранга (электропроводность, диэлектрическая проницаемость, тепловое расширение и др.). Пиро- и пьезоэлектрические свойства. Оптические свойства кристаллов. Энантиоморфизм.

Многообразие групп симметрии с различной размерностью. Группы симметрии и структурные классы цепей и слоев (примеры).

III РЕНТГЕНОГРАФИЯ И СТРУКТУРНЫЙ АНАЛИЗ КРИСТАЛЛОВ

Физические основы рентгеноструктурного анализа. Классические методы получения дифракционных эффектов. Условие Вульфа-Брэгга, уравнение Лауэ.

Физические основы рентгеноструктурного анализа. Классические методы получения дифракционных эффектов: полихроматический метод (или метод Лауэ), метод порошка (или метод Дебая - Шеррера), метод вращения монокристалла.

Индицирование рентгенограмм. Межплоскостные расстояния и индексы узловых плоскостей. Дифракция рентгеновских лучей. Условие Брегга-Вульфа, уравнение Лауэ. Фазовый анализ. Базы данных о структуре кристаллических веществ.

Классы дифракционной симметрии, систематические погасания рефлексов. Определение симметрии кристалла, параметров решетки и числа формульных единиц в ячейке.

Интенсивность рентгеновского дифракционного отражения и ее составляющие. Структурный фактор. Фактор атомного рассеяния, аномальное рассеяние. Распределение электронной плотности по ячейки. Фазовая проблема. Понятие о способах расшифровки кристаллических структур. Уточнение структуры, ее числовые параметры и критерии достоверности структурной модели. Основные практические этапы рентгеноструктурного анализа.

Автоматизация структурного анализа. Методы и программы автоматического решения и уточнения кристаллических структур.

Характеристика дифракционных методов структурного анализа. – РСА, ЭСА(электронный структурный анализ), НСА (нейтронный структурный анализ)

Краткая сравнительная характеристика дифракционных методов структурного анализа - рентгеноструктурный (РСА), электронный структурный (ЭСА), нейтронный структурный анализ (НСА).

Способы расшифровки кристаллических структур, уточнение структуры, ее числовые параметры и критерии достоверности структурной модели. Методы и программы автоматического решения и уточнения кристаллических структур.

Основные задачи рентгеноструктурного анализа в химии.

IV ОБЩИЕ ПРИНЦИПЫ КРИСТАЛЛОХИМИИ

Типы химической связи в кристаллах. Гомо- и гетеродесмические структуры. Характер кристаллической структуры. Координационные (монолитные), островные, цепочечные, слоистые, каркасные структуры. Динады. Гомо- и гетеродинадные структуры.

Число формульных единиц в ячейке и рентгеновская плотность. Координационные числа и координационные полиэдры. Собственная симметрия координационных полиэдров, молекул и сложных ионов. Количественное сравнение молекул и других фрагментов структуры. Структурные типы. Описание и сопоставление важнейших структурных типов; структурная гомология.

Описание структур в терминах плотнейших шаровых упаковок (ПШУ) и плотнейших шаровых кладок (ПШК). Координационные числа, координационные полиэдры и пустоты в ПШУ и ПШК. Слойность ПШУ.

Термодинамика кристаллов. Фононные спектры. Расчет термодинамических функций. Равновесные структуры. Стабильные, метастабильные и нестабильные фазы.

Кристаллохимические радиусы атомов. Металлические и ионные радиусы. Коэффициент плотности упаковки металлических и ионных кристаллов. Ковалентные и ван-дер-ваальсовы радиусы; их использование для построения моделей молекул и изучения конформации молекул. Пространственные напряжения в молекулах. Коэффициент плотности упаковки молекулярных кристаллов.

Кристаллохимические явления. Изоструктурность (изотипность), антиизоструктурность, гомеотипия, гетеротипия. Изоморфизм. Типы изоморфизма. Твердые растворы замещения, внедрения и вычитания. Сверхструктуры. Соразмерно модулированные структуры. Полиморфизм, политипия. Монотропные и энантиотропные полиморфные переходы. Механизм полиморфных превращений. Морфотропия.

Структурная интерпретация понятий химического соединения и химического вещества.

V СИСТЕМАТИЧЕСКАЯ КРИСТАЛЛОХИМИЯ

Простые вещества. Типичные и аномальные структуры металлов. Кристаллические структуры простых веществ - неметаллов. Изменение характера структуры в группах периодической таблицы элементов; сравнение структур, относящихся к разным группам (правило октета).

Общая характеристика кристаллических структур бинарных соединений. Структуры AX, описываемые в терминах ПШУ - ПШК (анионные упаковки и кладки). Примеры различных по характеру кристаллических структур AX и XY, не описываемых в терминах

ПШУ - ПШК. Особенности координации переходных и непереходных металлов. Кластеры.

Общая характеристика тернарных кристаллических структур.

Структуры интерметаллидов, гидридов, галогенидов, оксидов, халькогенидов и других бинарных и тернарных соединений.

Структурный тип перовскита. Сегнето- и антисегнетоэлектрические свойства веществ с искаженной структурой перовскита. Структуры смешанных оксидов с высокотемпературной сверхпроводимостью.

Структурный тип шпинели. Нормальные и обращенные шпинели. Объяснение строения шпинелей на основе теории кристаллического поля. Ферриты и их техническое значение. Связь строения и магнитных свойств соединений, кристаллизующихся по типу шпинели.

Структуры солей кислородных кислот (перхлораты, хлораты, сульфаты, нитраты, фосфаты, карбонаты и другие).

Основные особенности строения силикатов. Классификация структур силикатов. Изовалентный и гетеровалентный изоморфизм в силикатах. Зависимость физических свойств силикатов от их строения. Природные и синтетические цеолиты, их структура и применение.

Кристаллические структуры координационных соединений. Структуры соединений с полидентатными лигандами (комплексонаты, комплексы краун-эфиров).

Общая характеристика молекулярных кристаллов. Особенности органических кристаллов. Теория плотной упаковки молекул. Опорныемежмолекулярныеконтакты.Молекулярноекоординационное число.

Специфические межмолекулярные контакты. Водородная связь. Н-ассоциаты в органических кристаллах и их описание с помощью графов. Сопряженные Н-связи. Специфические контакты галоген-галоген, металл-кислород, металл-металл и другие. Контакты бензольных циклов. Агрегация специфических межмолекулярных контактов.

Структурные классы гомомолекулярных кристаллов. Моно- и полисистемные структуры. Типы моносистемных кристаллов. Распределение органических кристаллов по структурным классам. Собственная симметрия молекулы и симметрия ее позиции в кристалле. Правило центросимметричности. Псевдосимметричные подсистемы в молекулярных кристаллах.

Полисистемные молекулярные кристаллы. Контактная конформерия. Гиперсимметрия (сверхсимметрия).

Метод симметрии потенциальных функций. Интерпретация распределения молекулярных кристаллов по структурным классам. Возмущение потенциальных функций. Семейства структурных классов молекулярных кристаллов.

Гетеромолекулярные кристаллы. Кристаллогидраты. Клатраты. Молекулярные комплексы.

Расчет энергии межмолекулярного взаимодействия в атом-атомном приближении (для органических кристаллов). Энергия молекулярного кристалла как функция структурных параметров. Структурные подклассы и анизотропия свойств.

Строение кристаллических биополимеров.

Тепловые колебания атомов и молекул в кристаллах. Тензоры, описывающие колебания жестких молекул. Динамическая задача для органического кристалла; расчет частот внешних молекулярных колебаний и термодинамических функций.

VI ОБОБЩЕННАЯ КРИСТАЛЛОХИМИЯ

Конденсированные фазы с различной степенью упорядоченности. Корреляционная длина. Дальний и ближний порядок. Кристаллы и квазикристаллы. Несоразмерные структуры. Многообразие мезофаз.

Строение жидких кристаллов. Каламитические мезофазы (нематики, холестерики, смектики). Дискотические мезофазы. Мезоморфные переходы. Возвратный мезоморфизм.

Жидкокристаллические полимеры. Лиотропные мезофазы.

Кристаллы с частичной неупорядоченностью. Ротационно-кристаллическое состояние. Микродвойникование, полисинтетические сростки. Доменные структуры.

Элементы ближнего, среднего и дальнего порядка в жидкостях.

4 МЕТОДИЧЕСКИЕ РЕКОМЕНДАЦИИ (УКАЗАНИЯ) ДЛЯ СТУДЕНТОВ ПО ИЗУЧЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ

Рабочая программа дисциплины призвана помочь студентам в организации самостоятельной работы по освоению курса кристаллохимии. Кристаллохимия - это наука о внутреннем атомном строении вещества. Изучает законы расположения атомов и типы симметрии в кристаллических телах, а так же дефекты в их структуре. Будучи разделом химии, кристаллохимия тесно связана с кристаллографией. Источником экспериментальных данных о кристаллических структурах являются, главным образом, рентгеноструктурный анализ, структурная электронография и нейтронография, с помощью которых получают достоверную количественную информацию о строении химических соединений (от простейших структур металлов и ионных бинарных соединений до сложнейших структур биополимеров и комплексов с полидентатными лигандами). Обработка этой информации, систематизация структурного материала, выявление и интерпретация закономерностей, присущих строению кристаллических веществ, установление зависимости физических и химических свойств от структуры, разработки методов синтеза твердых веществ - таковы основные задачи кристаллохимии.

Математическая база кристаллохимии - теория групп симметрии, физическая - термодинамика и квантовая механика, экспериментальная - дифракционные методы.

При изучении кристаллохимии проводятся лабораторные занятия. В разделе «Лабораторный практикум» подробно описаны теоретические вопросы для подготовки к лабораторным занятиям. По отдельным темам предложены варианты расчетных задач. Систематическое выполнение заданий формирует навыки решения расчетных задач, умение работать с учебной и справочной литературой.

Для успешного выполнения задания студентам необходимо предварительно ознакомиться с содержанием соответствующего раздела. При подготовке к занятиям необходимо изучить рекомендуемую литературу. Общий список основной и дополнительной литературы представлен в отдельном разделе.

Повышению эффективности изучения данного курса способствуют представленные в программе темы рефератов по актуальным вопросам кристаллохимии, а также варианты контрольных работ с материалами к их подготовке (по указанию преподавателя).

Изучение курса завершается зачетом, вопросы к которому предложены в рабочей программе дисциплины.

Рабочая программа дисциплины «Кристаллохимия» ориентирована на оптимизацию методов изучения, совершенствование методик проведения практической и научно-исследовательской работы, поскольку именно эти виды учебной работы студентов в первую очередь готовят их к самостоятельному выполнению профессиональных задач.

Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов по дисциплине

№	Наименование раздела (темы)	Формы/виды самостоятельной работы	Количество часов, в соответствии с учебно-тематическим планом
1.	Предмет и задачи кристал-	Изучение литературы	2

	лохимии	Конспектирование изученных источников	
2.	Основные понятия и элементы структурной кристаллографии	Изучение литературы Оформление лабораторной работы Подготовка отчета по лабораторной работе Решение расчетных задач	4
3.	Рентгенография и структурный анализ кристаллов	Изучение литературы Оформление лабораторной работы Подготовка отчета по лабораторной работе Решение расчетных задач	6
4.	Общие принципы кристаллохимии	Изучение литературы Оформление лабораторной работы Подготовка отчета по лабораторной работе Решение расчетных задач	4
5.	Систематическая кристаллохимия	Изучение литературы Конспектирование изученных источников Решение задач	8
6.	Обобщенная кристаллохимия	Изучение литературы Конспектирование изученных источников	4
	ИТОГО		**28**

5 ПРАКТИКУМ ПО ДИСЦИПЛИНЕ
ПЛАН лабораторных работ

№ п/п	Тема	Кол-во часов	Вид занятий
1.	Основные понятия и элементы структурной кристаллографии. Симметрия	6	ЛР
2.	Рентгенография и структурный анализ кристаллов	3	ЛР
3.	Рентгенография и структурный анализ кристаллов. Основные способы выращивания кристаллов	3	ЛР
4.	Рентгенография и структурный анализ кристаллов. Основные способы получения кристаллов	3	ЛР
5.	Общие принципы кристаллохимии	3	ЛР
6.	Систематическая кристаллохимия	3	ЛР
7.	Обобщенная кристаллохимия	3	ЛР

ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА № 1 (3 часа)
ОСНОВНЫЕ ПОНЯТИЯ И ЭЛЕМЕНТЫ СТРУКТУРНОЙ КРИСТАЛЛОГРАФИИ СИММЕТРИЯ

Вопросы к занятию

1. Понятие точечной группы. Симметрические операции и элементы симметрии. Поворотные и инверсионные оси. Примеры молекул.

2. Семейства точечных групп низшей и средней категории. Предельные группы средней категории. Примеры молекул.

3. Стереографическая проекция элементов симметрии и нормалей к граням многогранников. Точечные группы высшей категории. Примеры молекул и многогранников.

4. Символика точечных групп. Символы Германа-Могена. Зеркально-поворотные оси и символы Шенфлиса.

5. Изогоны и орбиты точечных групп. Структурные классы молекул.

6. Изоэдры и их комбинации. Семейства изоэдров.

7. Группы трансляций. Примитивные и непримитивные параллелепипеды повторяемости. Кристаллическая решетка и кристаллическая структура.

8. Симметрия решетки. Голоэдрические точечные группы. Кристаллографические координатные

системы. Элементарная ячейка.

9. Кристаллографические точечные группы (кристаллографические классы). Симметрия кристаллического многогранника и симметрия позиции в кристаллической структуре. Примеры.

10. Открытые элементы симметрии кристаллических структур и их обозначения.

11. Типы решеток (типы Бравэ). Структуры Бравэ. Истинная и случайная симметрия решетки. Примеры структур с решетками разного типа.

12. Сочетания открытых и закрытых элементов симметрии между собой и с перпендикулярными трансляциями.

13. Пространственные группы симметрии. Принцип их вывода. Общие и частные системы эквивалентных позиций (орбиты). Структурные классы.

14. Описание кристаллических структур на основе пространственных групп и структурных классов. Примеры структур низшей категории.

15. Описание кристаллических структур на основе пространственных групп и структурных классов. Примеры структур средней категории.

16. Описание кристаллических структур на основе пространственных групп и структурных классов. Примеры структур высшей категории.

17. Многообразие групп симметрии с различной размерностью. Структурные классы цепей и слоев.

18. Кристаллохимические радиусы и их использование. Коэффициент плотности упаковки.

ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА № 2 (3 ч)
РЕНТГЕНОГРАФИЯ И СТРУКТУРНЫЙ АНАЛИЗ КРИСТАЛЛОВ

Вопросы к занятию

1. Какое физическое явление лежит в основе рентгеноструктурного анализа? Что представляет собой материальная субстанция, рассеивающая рентгеновские лучи?

2. Назовите основные способы получения дифракционной картины в рентгенографии.

3. Какие характеристики кристаллического вещества можно получить с помощью уравнений Лауэ?

4. Какие характеристики кристаллического вещества можно получить с помощью уравнения Брэгга-Вульфа?

5. Какие формулы выражают зависимость интенсивности дифракционного луча от кристаллической структуры?

6. Какая функция является конечным результатом стандартного рентгеноструктурного анализа? Какие характеристики кристаллического вещества извлекают из этой функ-

ции?

7. Почему стандартный рентгеноструктурный анализ не может дать адекватную информацию о функции распределения электронной плотности?

8. Какую дополнительную информацию дает прецизионный рентгеноструктурный анализ по сравнению со стандартным вариантом этого метода?

9. Каково назначение и общие принципы устройства автоматического дифрактометра?

10. Для какой цели используется рентгенофазовый анализ? Какой метод получения дифракционной картины лежит в основе этого метода?

11. Какие дифракционные методы (кроме рентгенографии) используются для определения структуры кристаллов?

12. Какое физическое явление лежит в основе нейтронографии и электронографии? На каких материальных объектах рассеиваются нейтроны и электроны?

Лабораторная работа 3 (3 час).

Основные понятия и элементы структурной кристаллографии. Симметрия.

Под симметрией какого-либо предмета понимается вся совокупность имеющихся у него элементов симметрии. Элементам симметрии соответствуют операции симметрии, переводящие предмет сам в себя. Возможные комбинации операций симметрии, оставляющих без изменения хотя бы одну точку (в частности, центр масс), называются точечными группами симметрии. Существуют следующие элементы и операции симметрии:

1) C_n– поворотная ось симметрии порядка n; соответствующие ей операции симметрии – повороты на угол p (2π/n), где p может принимать значения от 1 до n-1. Специфической оси C_∞ соответствует операция поворота на сколь угодно малый угол;

2) σ – плоскость симметрии; соответствующая ей операция симметрии – отражение в плоскости;

3) i– центр симметрии; операция симметрии – инверсия в центре (отражение в точке);

4) S_n– зеркально-поворотная ось симметрии порядка п; операции симметрии – повороты на угол p (2π/п) с одновременным отражением в плоскости, перпендикулярной оси (p от 1 до п-1);

5) I (или C_1) – вводимый для общности тождественный элемент симметрии; соответствующая операция симметрии – операция идентичности или тождественного преобразования – оставляет предмет в покое.

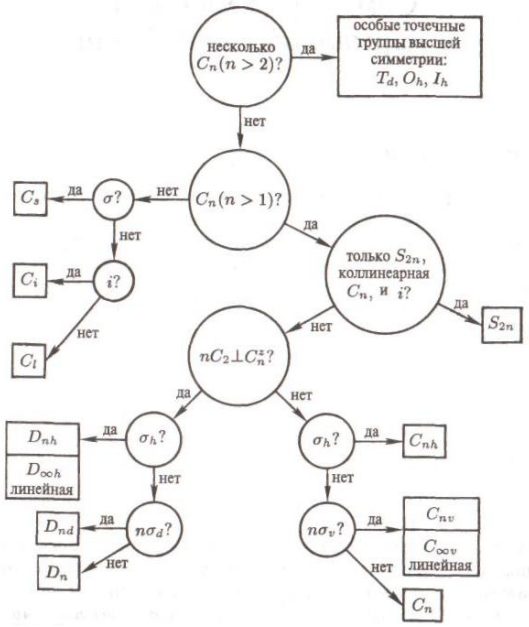

Схема определения точечной групп симметрии.

Любая молекула относится к какой-либо точечной группе симметрии, если не исключать и тривиальную группу C_1, не имеющую элементов симметрии и операций, кроме тождественного преобразования. Во всех остальных случаях точечные группы включают несколько операций симметрии. Для определения точечной группы симметрии молекулы можно воспользоваться схемой, которая предусматривает следующую последовательность действий.

1. Определяют, имеет ли молекула форму, близкую к сфероидальной, т. е. с несколькими пересекающимися осями C_n (n> 2). Если нет, то переходят ко второму действию. Если да, то она относится к одной из точечных групп высшей симметрии: T_d, O_h, I_h(точечные группы T, T_h, O, Iсреди молекул не встречаются).

2. Находят поворотную ось симметрии C_n. Если есть, то переходят к третьему действию. Если осей нет, уточняют, есть ли плоскость σ или центр i, определяющие группы C_sи C_i; если их тоже нет, то имеем тривиальную группу C_1.

3. При наличии оси или осей симметрии выбирается ось высшего порядка (n> 2), а если ее нет, то выбирается одна из осей – C_2или единственная ось C_n^z, ориентируемая вертикально и совпадающая с главной осью молекулы Z.

4. Определяют, есть ли зеркально-поворотная ось симметрии. Если есть только ось S_{2n}, колинеарная оси C_n^z, а кроме нее и, возможно, центра iдругих элементов симметрии нет, то это группы S_{2n}. Если кроме S_n (n>2) есть другие элементы симметрии или вообще нет оси S_n, то переходят к пятому действию.

5. Находят набор п осей C_2, перпендикулярных оси C_n^z. Если таковые есть, то переходят к шестому действию, т. е. к точечным группам ряда D_n; если нет, то переходят к седьмому действию, т. е. к точечным группам ряда $C_п$.

6. Смотрят, есть ли горизонтальная плоскость σ_h (перпендикулярная C_n^z). Если есть, то это будет точечная группа D_{nh}; если ее нет, но имеется n диагональных (вертикальных) плоскостей $n\sigma_d$, то это будет группа D_{nd}; если их нет, то – группа D_n.

7. В другом ряду групп при наличии σ_hгруппы символизируются как C_{nh}, а при отсутствии плоскостей – как C_n.

Таблица 1 – Таблицы типов симметрии и характеров неприводимых представлений групп C_{2v}, C_{2h},D_{2h}, C_{3v}, D_{3h}.

Полные совокупности операций симметрии точечных групп даны в таблицах типов симметрии и характеров представлений.

Лабораторная работа 4. Рентгенография и структурный анализ кристаллов. Основные способы получения кристаллов.

Цель работы: изучить основные способы выращивания кристаллов, отработать методики выращивания кристаллов (студент по указанию преподавателя получает задание по выращиванию кристаллов).

Под кристаллизацией из растворов понимают рост кристалла соединения, химический состав которого заметно отличается от химического состава исходной жидкой фазы. Широко распространенным растворителем является вода. Растворителями также могут служить многокомпонентные водные и неводные растворы, и, наконец, расплавы каких-либо других химических соединений. В зависимости от температуры процесса и химической природы растворителя различают процессы выращивания из низкотемпературных водных растворов (как правило, при температурах не выше 80-90°С), перегретых водных растворов (гидротермальный метод, температуры до 800°С), солевых расплавов (методы кристаллизации из раствора в расплаве, температуры кристаллизации обычно не превышают 1200-1300°С) .

Методы выращивания из растворов

Все методы выращивания кристаллов из растворов основаны на использовании зависимости растворимости вещества от термодинамических параметров процесса - температуры, давления, концентрации растворителя. В большинстве случаев используется зави-

симость растворимости от температуры. Рассмотрим более подробно влияние указанных параметров на растворимость различных соединений в воде.

По характеру растворимости в воде при повышенных температурах большинство соединений можно разделить на две группы. К первой относятся многие легкоплавкие соли с высокой растворимостью - нитраты, галогениды щелочных металлов (кроме NaF, LiF) и др., большинство щелочей, кислот. Растворимость вещества I-го типа, т. е. его равновесная концентрация в растворе, непрерывно возрастает с увеличением температуры вплоть до температуры плавления труднолетучего вещества. Среди систем второго типа с участием H2O наиболее характерны системы, содержащие Na_2CO_3, NaF, K_2SO_4, SiO_2, $CaMoO_4$. Растворимость этих соединений в воде с повышением температуры убывает и низка вблизи критической температуры воды. К соединениям этого типа относятся многие вещества, хорошо растворимые в воде при комнатной температуре, но имеющие отрицательный температурный коэффициент растворимости, и вещества, слабо растворимые в воде как при комнатной, так и при более высоких температурах (окислы и соли тугоплавких металлов, сульфиды, силикаты и др.). Монокристаллы соединений, дающих при взаимодействии с водой системы первого типа, могут быть выращены путем кристаллизации из низкотемпературных водных растворов. Соединения, образующие с водой системы второго типа, обычно кристаллизуют гидротермальными методами. Образование метастабильной области связано с необходимостью затраты энергии на образование кристаллического зародыша критического размера.

Лабильные растворы - это неустойчивые, сильно пересыщенные растворы, в силу чего в них легко образуются кристаллические зародыши за счет самопроизвольных флуктуации концентрации вещества. Граница, разделяющая метастабильную и лабильную зоны, характеризует максимальное пересыщение, при котором избыток (относительно равновесной растворимости) растворенного вещества еще не кристаллизуется.

В метастабильном состоянии растворы являются относительно устойчивыми. Это связано с высокими значениями работы образования зародышей критического размера, в силу чего энергетический барьер не может быть преодолен за счет естественных флуктуации концентрации вещества. Наиболее простой способ инициировать кристаллизацию из пересыщенных растворов - ввести в них «затравки» - кристаллики растворенного вещества или какую-либо механическую примесь, которые явятся центрами зарождения.

По принципу создания пересыщений способы кристаллизации из растворов разделяются на несколько групп:

1. Кристаллизация за счет изменения температуры раствора. Сюда относятся методы кристаллизации, связанные с перепадом температур в растворе, а также кристаллизация в изотермическом объеме при общем снижении или подъеме температуры.

2. Кристаллизация за счет изменения состава раствора (испарение растворителя).

3. Кристаллизация при химической реакции.

Выбор того или иного варианта зависит от величины растворимости вещества и величины температурного коэффициента растворимости дСо/дТ. Можно сформулировать ряд правил, которыми следует руководствоваться при выборе того или иного метода кристаллизации.

Кристаллизация путем изменения температуры раствора. В этом способе пересыщение создается за счет снижения температуры в зоне растущего кристалла и достигается двумя путями:

а) постепенным понижением температуры во всем объеме кристаллизатора, как правило, снижение осуществляется на протяжении всего цикла выращивания; б) созданием в кристаллизаторе двух зон с различными температурами. В одной из зон происходит растворение вещества, в другой - рост кристалла. Массообмен между зонами поддерживается естественной или вынужденной конвекцией. Такие методы объединяются общим термином «методы температурного перепада».

Кристаллизация путем снижения температуры происходит в результате охлаждения

раствора по заданной программе. Для поддержания постоянного пересыщения на протяжении всего цикла выращивания важно, чтобы точка состав - температура на диаграмме состояния перемещалась в метастабильной области вдоль линии насыщения раствора. Важно избежать ее перехода в лабильную область, чтобы не вызвать массового зарождения паразитических кристалликов. Скорость снижения температуры в каждом случае индивидуальна и определяется наклоном кривой растворимости вещества и скоростью роста при данных пересыщениях, т. е. условием баланса вещества в растворе. Преимуществом метода является возможность априорного расчета процесса: пользуясь данными по растворимости вещества, можно рассчитать, с какой скоростью следует изменять температуру раствора, чтобы выделить за данное время требуемое количество вещества. Может быть решена и обратная задача, т. е. определено количество вещества, выделяемое в единицу времени при заданном температурном режиме. Кристаллизация при концентрационной конвекции. В отличие от описанного выше способа при кристаллизации в условиях концентрационной конвекции обмен раствором между зонами растворения и роста обеспечивается за счет разности плотностей насыщенного и ненасыщенного раствора. Питающее вещество помещается в верхнюю часть кристаллизатора, а затравки подвешиваются внизу. Температура в верхней зоне поддерживается более высокой, чем в нижней, таким образом тепловая конвекция полностью подавляется.

Кристаллизация из водных растворов при постоянной температуре и постоянном пересыщении. В описанных выше методах кристаллизация протекает либо в условиях изменяющейся температуры, либо при переменном пересыщении. Эти два параметра - температура и пересыщение - определяют скорость кристаллизации и характер захвата примесей. В свою очередь скорость кристаллизации и коэффициент захвата примеси влияют на чистоту и совершенство кристалла, поэтому для получения качественных кристаллов желательно проводить процесс кристаллизации в условиях постоянства температуры и пересыщения. Это постоянство достигается путем выращивания кристаллов в изотермических условиях с применением корректировки концентрации раствора в ходе эксперимента. Коррекция может проводиться путем диффузии насыщенного раствора в кристаллизатор, введения его отдельными порциями или смывания кристалла раствором питательного вещества в процессе принудительной циркуляции.

Подробный перечень общих условий, используемых в практике кристаллизации вещества:

1) приготовление расплава, раствора и т. п. (имеется в виду подбор легирующей примеси, придающей кристаллу определенные физико-химические свойства), фиксирование pH раствора;

2) подбор состава среды, в которой происходит кристаллизация (инертной, водородной и т. п.);

3) выращивание или приготовление затравочных кристаллов необходимой формы и достаточной степени совершенства;

4) выбор материала сосуда (в частности тигля), в котором происходит кристаллизация;

5) монтаж затравочных кристаллов;

6) перемешивание раствора или расплава;

7) выбор нагревательного устройства (печи);

8) обеспечение правильного отвода тепла;

9) выбор устройства для равномерного относительного перемещения кристалла и печи;

10) стабилизация и управление температурой кристаллизации;

11) учет и использование закона геометрического отбора;

12) борьба с посторонними кристаллами («паразитами»);

13) поддержание стерильности на всех этапах подготовки и проведения процесса кристаллизации;

14) извлечение выращенных монокристаллов.

Вышеперечисленные условия должны быть умело учтены для успешного решения задачи получения кристаллов, отвечающих определенным требованиям. В общем случае требования сводятся к тому, чтобы продукт был монокристаллом, содержал минимальное количество дефектов, при равномерном заданном составе во всем объеме, имел наименьшие напряжения и был использованным в науке и технике.

В связи с ростом потребности науки и техники в разнообразных по своим физико-химическим свойствам кристаллах наряду с общими проблемами приходится решать ряд частных проблем: 1) проблему очистки исходного сырья; 2) объемной обработки;3) обработки поверхности; 4) контроля дефектов затравок и макрокристаллов (оптического, рентгеновского, химического и т.п.);5) отжига кристаллов; 6) проблему автоматики и т. д.

К настоящему времени разработан ряд принципиально различных методов выращивания кристаллов из растворов: динамический, гидротермальный, кристаллизация путем электролиза. Четвертый метод выращивания кристаллов из растворов в расплавах можно рассматривать как комбинированный метод выращивания, включающий в себя одновременно некоторые элементы методов выращивания из растворов и расплавов.Особенно разнообразны приемы выращивания кристаллов из расплавов: метод И. В. Обреимова и Л. В. Шубников а, методы Бриджмена и Стокбаргера, методы Штебера и Стронга, метод зонной кристаллизации. Все они составляют группу методов кристаллизации вещества путем одностороннего охлаждения расплава. Вторую группу составляют методы получения кристаллов путем вытягивания затравки из расплава: метод Киропулоса, метод Чохральского и др.Впервые для получения кристаллов корунда Вернейлем был разработан метод спекания порошка Al_2O_3 в пламени гремучего газа. В последнее время он стал приобретать более универсальный характер. Кристаллизацией вещества из твердого состояния пользуются значительно реже, чем кристаллизацией из жидкого состояния; отчасти поэтому методы перекристаллизации вещества отличаются меньшей разработанностью. Выгодное исключение представляет метод собирательной рекристаллизации и метод рекристаллизации обработки, т. е. рекристаллизации предварительно деформированного поликристаллического образца. Кристаллизацией из парообразного состояния получают сравнительно совершенные кристаллы. В последние годы разработано несколько методов кристаллизации из парообразного состояния: зонный метод, метод молекулярного пучка, метод транспортных реакций. Следует отметить способ получения кристаллов путем химических реакций. Обыкновенна кристаллический осадок выпадает в виде порошка, состоящего из очень мелких кристаллов. Однако если замедлить реакцию, то вновь выделяющееся вещество осаждается на уже готовые кристаллики, и последние будут расти.

Форма отчета: описание методики получения кристалла, описание морфологии.

ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА № 5 (3 часа)
ОБЩИЕ ПРИНЦИПЫ КРИСТАЛЛОХИМИИ
Вопросы к занятию

1. Типы химической связи в кристаллах. Гомо- и гетеродесмические структуры. Характер кристаллической структуры. Координационные (монолитные), островные, цепочечные, слоистые, каркасные структуры. Динады. Гомо- и гетеродинадные структуры.

2. Число формульных единиц в ячейке и рентгеновская плотность. Координационные числа и координационные полиэдры. Собственная симметрия координационных полиэдров, молекул и сложных ионов. Количественное сравнение молекул и других фрагментов структуры. Структурные типы. Описание и сопоставление важнейших структурных типов; структурная гомология.

3. Описание структур в терминах плотнейших шаровых упаковок (ПШУ) и плотнейших шаровых кладок (ПШК). Координационные числа, координационные полиэдры и пустоты в ПШУ и ПШК. Слойность ПШУ.

4. Термодинамика кристаллов. Фононные спектры. Расчет термодинамических функций. Равновесные структуры. Стабильные, метастабильные и нестабильные фазы.

5. Кристаллохимические радиусы атомов. Металлические и ионные радиусы. Коэффициент плотности упаковки металлических и ионных кристаллов. Ковалентные и ван-дер-ваальсовы радиусы; их использование для построения моделей молекул и изучения конформации молекул. Пространственные напряжения в молекулах. Коэффициент плотности упаковки молекулярных кристаллов.

6. Кристаллохимические явления. Изоструктурность (изотипность), антиизоструктурность, гомеотипия, гетеротипия. Изоморфизм. Типы изоморфизма. Твердые растворы замещения, внедрения и вычитания. Сверхструктуры. Соразмерно модулированные структуры. Полиморфизм, политипия. Монотропные и энантиотропные полиморфные переходы. Механизм полиморфных превращений. Морфотропия.

7. Структурная интерпретация понятий химического соединения и химического вещества.

ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА № 6 (3 часа)
СИСТЕМАТИЧЕСКАЯ КРИСТАЛЛОХИМИЯ

СТРУКТУРЫ ПРОСТЫХ ВЕЩЕСТВ И ИНТЕРМЕТАЛЛИДОВ

1. Приведите примеры металлов, структура которых представляет собой двухслойную плотнейшую шаровую упаковку.

2. Приведите примеры металлов, структура которых представляет собой трехслойную плотнейшую шаровую упаковку.

3. Приведите примеры металлов, изоструктурных - железу.

4. Приведите примеры аномальных кристаллических структур металлов.

5. Какую структуру имеют отвердевшие инертные газы?

6. Опишите особенности высокотемпературных кристаллических модификаций фтора и кислорода.

7. Какое видоизменение кристаллической структуры наблюдается в ряду Cl_2, Br_2, I_2?

8. Какое координационное число имеют атомы в кристаллах теллура, мышьяка и германия?

9. Каков характер кристаллических структур серого и красного селена?

10. Опишите структурные особенности двух кристаллических модификаций азота.

11. Каков характер структуры белого, черного и красного фосфора?

12. Перечислите важнейшие кристаллические формы углерода.

13. Какова координация атома углерода в фуллерене?

14. Какова координация атома бора в кристаллическом боре?

15. Приведите примеры интерметаллидов со структурами, подобными основным структурным типам металлов.

16. Что такое фазы Лавеса? Приведите примеры.

17. Чем структура интерметаллида CuAu отличается от структуры сплава того же состава?

СТРОЕНИЕ КРИСТАЛЛОВ AX И XY

1. Назовите основные структурные типы ионных кристаллов. Каковы координационные числа ионов в этих веществах?

2. Чем различаются структуры вюрцита и сфалерита?

3. аков характер кристаллической структуры Cu_2O?

4. Назовите известные Вам модификации SiO_2; укажите их сингонию и соотношение с модификациями углерода.

5. Укажите важнейшие различия структур CO_2 и SiO_2.

6. Сколько водородных связей образует молекула воды в кристаллах льда? Как эти связи расположены?

7. Чем похожи и в чем различаются структуры BN и графита?

8. Приведите примеры островных кристаллических структур из числа простых и бинарных веществ.

9. Приведите примеры цепочечных кристаллических структур бинарных соединений AX и XY.

10. Приведите примеры слоистых кристаллических структур AX и XY.

11. Приведите примеры гомодесмических (монолитных) структур AX и XY с ковалентными связями.

12. Опишите мотив заполнения пустот в корунде Al_2O_3.

13. Приведите примеры кристаллических структур AX, где металл имеет координационный многогранник в виде: а) октаэдра, б) тетрагональной дипирамиды, в) тригональной призмы.

ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА № 7 (3 часа)
ОБОБЩЕННАЯ КРИСТАЛЛОХИМИЯ

Вопросы к занятию

1. Конденсированные фазы с различной степенью упорядоченности. Дальний и ближний порядок.

2. Кристаллы и квазикристаллы. Несоразмерные структуры. Многообразие мезофаз.

3. Строение жидких кристаллов. Жидкокристаллические полимеры.

4. Кристаллы с частичной неупорядоченностью. Ротационно-кристаллическое состояние.

5. Микродвойникование, полисинтетические сростки. Доменные структуры.

6. Элементы ближнего, среднего и дальнего порядка в жидкостях.

7. Кластеры и их строение

8. Биополимеры и их структура.

СТРОЕНИЕ КРИСТАЛЛОВ ТЕРНАРНЫХ СОЕДИНЕНИЙ И СИЛИКАТОВ

1. Опишите кристаллическую структуру K_2PtCl_6.

2. В чем сходство и в чем различие структур кальцита и арагонита?

3. Какие изменения в структуре $BaTiO_3$ (тип перовскита) происходят при переходе в сегнетоэлектрическое состояние?

4. Какой вариант структурного типа шпинели (нормальная, обращенная или промежуточная шпинель) следует ожидать для двойных оксидов $NiFe_2O_4$, $ZnCr_2O_4$, $NiCr_2O_4$?

5. В чем заключается основное различие кристаллических структур алюмосиликатов и силикатов алюминия?

6. Изобразите характерные кремнекислородные мотивы островных силикатов и укажите их составы.

7. Изобразите характерные кремнекислородные мотивы цепочечных силикатов и укажите их составы.

8. Приведите пример характерного расположения кремнекислородных тетраэдров в слоистых силикатах (требуется изобразить расположение кремнекислородных тетраэдров и указать состав слоя).

9. Приведите примеры зависимости свойств силикатов от их структуры.

10. Какие структурные особенности характерны для цеолитов?

11. В чем состоит основное различие кристаллических структур силикатов и карбонатов?

12. Каковы основные особенности кристаллических структур пентасилов?

Список литературы

1. Егоров-Тисменко, Ю.К. Кристаллография и кристаллохимия: учебник для студ. вузов / Ю.К. Егоров-Тисменко.– М. : Изд-во Книжный Дом Университет, 2010. – 592 с.

2. Кнотько, А.В. Химия твердого тела: учеб. пособие для студ., обучающихся по спец. «Химия» / А.В. Кнотько, И.А. Пресняков, Ю.Д. Третьяков. – М. : Академия, 2006. – 301 с. (19 экз.)

3. Булах, А.Г. Общая минералогия: учебник для студ. высш. учеб. заведений / А.Г. Булах,

В.Г. Кривовичев, А.А. Золотарев. – 4-е изд., перераб. и доп. .– М. : Издательский центр «Академия, 2008. – 416 с. (23 экз.)

6 ДИДАКТИЧЕСКИЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ КОНТРОЛЯ (САМОКОНТРОЛЯ) УСВОЕННОГО МАТЕРИАЛА

6.1 Оценочные средства, показатели и критерии оценивания компетенций

Индекс компетенции	Оценочное средство	Показатели оценивания	Критерии оценивания сформированности компетенций
ОПК-1 ОПК-2 ПК-1	Отчет по лабораторной работе	Низкий – неудовлетворительно	ставится, если допущены существенные ошибки (в ходе эксперимента, в объяснении, в оформлении работы, по технике безопасности, в работе с веществами и приборами), которые не исправляются даже по указанию преподавателя.
		Пороговый – удовлетворительно	ставится, если допущены одна-две существенные ошибки (в ходе эксперимента, в объяснении, в оформлении работы, по технике безопасности, в работе с веществами и приборами), которые исправляются с помощью преподавателя.
		Базовый – хорошо	а)работа выполнена правильно, без существенных ошибок, сделаны выводы; б) допустимы: неполнота проведения или оформления эксперимента, одна-две несущественные ошибки в проведении или оформлении эксперимента, в правилах работы с веществами и приборами
		Высокий – отлично	а) работа выполнена полно, правильно, без существенных ошибок, сделаны выводы; б) эксперимент осуществлен по плану с учетом техники безопасности и правил работы с веществами и приборами; в) имеются организационные навыки (поддерживается чистота рабочего места и порядок на столе, экономно используются реактивы).
	Реферат	Низкий – неудовлетворительно	тема реферата не раскрыта, обнаруживается существенное непонимание проблемы.
		Пороговый – удовлетворительно	имеются существенные отступления от требований к реферированию. В частности: тема освещена лишь частично; допущены фактические ошибки в содержании реферата или при ответе на дополнительные вопросы; во время защиты отсутствует вывод.
		Базовый – хорошо	основные требования к реферату и его

			защите выполнены, но при этом допущены недочёты. В частности, имеются неточности в изложении материала; отсутствует логическая последовательность в суждениях; не выдержан объём реферата; имеются упущения в оформлении; на дополнительные вопросы при защите даны неполные ответы.
		Высокий – отлично	выполнены все требования к написанию и защите реферата: обозначена проблема и обоснована её актуальность, сделан краткий анализ различных точек зрения на рассматриваемую проблему и логично изложена собственная позиция, сформулированы выводы, тема раскрыта полностью, выдержан объём, соблюдены требования к внешнему оформлению, даны правильные ответы на дополнительные вопросы.
	Учебные задачи	Низкий – неудовлетворительно	допустил число ошибок и недочетов превосходящее норму, при которой может быть выставлена оценка «3»
		Пороговый – удовлетворительно	студент правильно выполнил не менее половины работы или допустил: не более двух грубых ошибок; или не более одной грубой и одной негрубой ошибки и одного недочета; или не более двух-трех негрубых ошибок; или одной негрубой ошибки и трех недочетов; или при отсутствии ошибок, но при наличии четырех-пяти недочетов.
		Базовый – хорошо	студент выполнил работу полностью, но допустил в ней: не более одной негрубой ошибки и одного недочета или не более двух недочетов

		Высокий – отлично	работа выполнена без ошибок, указаны все расчетные формулы, единицы измерения, без ошибок выполнены математические расчеты
	Тест	Низкий – неудовлетворительно	Количество правильных ответов на вопросы теста менее 60 %
		Пороговый – удовлетворительно	Количество правильных ответов на вопросы теста от 61-75 %
		Базовый – хорошо	Количество правильных ответов на вопросы теста от 76-84 %
		Высокий – отлично	Количество правильных ответов на вопросы теста от 85-100 %
	Контрольная работа	Низкий – неудовлетворительно	допустил число ошибок и недочетов превосходящее норму, при которой может быть выставлена оценка «3»
		Пороговый – удовлетворительно	если студент правильно выполнил не менее половины работы или допустил: не более двух грубых ошибок; или не более одной грубой и одной негрубой ошибки и одного недочета; или не более двух-трех негрубых ошибок; или одной негрубой ошибки и трех недочетов; или при отсутствии ошибок, но при наличии четырех-пяти недочетов.
		Базовый – хорошо	студент выполнил работу полностью, но допустил в ней: не более одной негрубой ошибки и одного недочета или не более двух недочетов
		Высокий – отлично	работа выполнена без ошибок, указаны все расчетные формулы, единицы измерения, без ошибок выполнены математические расчеты

6.2 Промежуточная аттестация студентов по дисциплине

Промежуточная аттестация является проверкой всех знаний, навыков и умений студентов, приобретённых в процессе изучения дисциплины. Формой промежуточной аттестации по дисциплине является зачёт.

Для оценивания результатов освоения дисциплины применяется следующие критерии оценивания.

Критерии оценивания устного ответа на зачете

Оценка «зачтено» выставляется студенту, если:

1. вопросы раскрыты, изложены логично, без существенных ошибок;
2. показано умение иллюстрировать теоретические положения конкретными примерами;
3. продемонстрировано усвоение ранее изученных вопросов, сформированность компетенций, устойчивость используемых умений и навыков.

Допускаются незначительные ошибки.

Оценка «не зачтено» выставляется, если:

1. не раскрыто основное содержание учебного материала;
2. обнаружено незнание или непонимание большей или наиболее важной части учебного материала;
3. допущены ошибки в определении понятий, которые не исправлены после нескольких наводящих вопросов;
4. не сформированы компетенции, умения и навыки.

ВОПРОСЫ К ЗАЧЕТУ

1. Определение химических понятий:

- кристалл; кристаллическое вещество, симметрия, операции симметрии (закрытые и открытые), классы симметрии, сингонии, категории.

2. Физические основы рентгеноструктурного анализа.
3. Описание структур в терминах простейших шаровых упаковок (ПШУ) и плотнейших шаровых кладок (ПШК).
4. Структуры простых веществ и интерметалидов.
5. Бинарные кристаллические структуры.
6. Тернарные кристаллические структуры.
7. Координация атомов, характер структуры, структурные типы.

6.3 ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА ДЛЯ ПРОВЕРКИ УРОВНЯ СФОРМИРОВАННОСТИ КОМПЕТЕНЦИЙ, ОПК-1, ПК-1

Тесты содержат следующие типы заданий

Тип задания	№ задания	Вес задания (балл)	Результат оценивания (баллы, полученные за выполнение задания / характеристика правильности ответа)
задания закрытого типа с выбором одного правильного (1 из 4)	1, 2, 3	1 балл	1 б - полное правильное соответствие; 0 б - остальные случаи
задания закрытого типа с выбором нескольких правильных ответов (3 из 6)	4, 5, 6, 7	2 балла	2 б – полное правильное соответствие (последовательность вариантов ответа может быть любой); 1 б – если допущена одна ошибка / ответ правильный, но не полный; 0 б – остальные случаи
задания закрытого типа на установление	8, 9	2 балла	2 б – полное правильное соответствие; 1 б – если допущена одна ошибка / ответ пра-

соответствия (4 на 4)			вильный, но не полный; 0 б – остальные случаи
задание закрытого типа на установление последовательности	10, 11	2 балла	2 б – полное правильное соответствие; 1 б – если допущена одна ошибка / ответ правильный, но не полный; 0 б – остальные случаи
задания открытого типа с кратким ответом	12, 13	3 балла	3 б – полное правильное соответствие; 0 б – остальные случаи.
задания открытого типа с развернутым ответом	14, 15	5 баллов	5 б – полное правильное соответствие; если допущена одна ошибка/неточность / ответ правильный, но не полный - 3 балла; если допущено более одной ошибки / ответ неправильный / ответ отсутствует – 0 баллов

Формируемая компетенция	Индикаторы сформированности компетенции
ОПК-1. Способен анализировать и интерпретировать результаты химических экспериментов, наблюдений и измерений, **индикаторами** достижения которой являются	• ОПК-1.1 Систематизирует и анализирует результаты химических экспериментов, наблюдений, измерений, а также результаты расчетов свойств веществ и материалов. • ОПК-1.2 Предлагает интерпретацию результатов собственных экспериментов и расчетно-теоретических работ с использованием теоретических основ традиционных и новых разделов химии. • ОПК-1.3 Формулирует заключения и выводы по результатам анализа литературных данных, собственных экспериментальных и расчетно-теоретических работ химической направленности.

Задание 1. Какой из перечисленных методов является классическим методом рентгеноструктурного анализа для поликристаллических образцов?

1. Метод Лауэ
2. Метод вращения монокристалла
3. Метод порошка (Дебая-Шеррера)
4. Электронный структурный анализ (ЭСА)

Ответ: 3

Задание 2. Какой тип химической связи преобладает в кристаллах, описываемых моделью плотнейших шаровых упаковок (ПШУ)?

1. Ковалентная
2. Ионная
3. Металлическая
4. Водородная

Ответ: 3

Задание 3. Что такое «структурный тип» в кристаллохимии?

1. Способ выращивания кристаллов
2. Характер химической связи в кристалле
3. Определенный, повторяющийся способ расположения атомов в структуре, характерный для ряда соединений
4. Тип дефекта в кристаллической решетке
   Ответ: 3

Задание 4. Какие из перечисленных методов относятся к дифракционным методам структурного анализа? (Выберите три правильных ответа)

1. Рентгеноструктурный анализ (РСА)
2. ИК-спектроскопия
3. Нейтронография (НСА)
4. Масс-спектрометрия
5. Электронография (ЭСА)
6. ЯМР-спектроскопия
   Ответ: 1, 3, 5

Задание 5. Какие из перечисленных элементов симметрии являются закрытыми? (Выберите три правильных ответа)

1. Плоскость симметрии (m)
2. Центр инверсии ($\bar{1}$)
3. Трансляция
4. Винтовая ось
5. Поворотная ось (n)
6. Скользящая плоскость
   Ответ: 1, 2, 5

Задание 6. Какие из перечисленных структур относятся к гетеродесмическим? (Выберите три правильных ответа)

1. Алмаз
2. Графит
3. Поваренная соль (NaCl)
4. Лед
5. Медь
6. Кварц (SiO_2)
   Ответ: 2, 4, 6

Задание 7. Какие из перечисленных факторов могут влиять на процесс выращивания кристаллов из раствора? (Выберите три правильных ответа)

1. Скорость изменения температуры
2. Величина пересыщения
3. Магнитное поле Земли
4. Наличие затравки
5. Атмосферное давление
6. pH раствора
   Ответ: 1, 2, 4

Задание 8. Установите соответствие между типом кристаллической структуры и его описанием:

Координационная : Структура, в которой все атомы соединены прочными связями в трехмерный каркас
Цепочечная : Структура, в которой атомы соединены в бесконечные одномерные цепи.
Слоистая : Структура, в которой атомы соединены в бесконечные двумерные слои
Островная : Структура, состоящая из изолированных групп атомов (молекул, ионов).

Задание 9. Установите соответствие между дифракционным методом и видом излучения, на котором он основан:

РСА : А. Пучок электронов
ЭСА : Б. Пучок нейтронов
НСА : В. Пучок рентгеновских лучей
Не относится к дифракционным : Г. Ультрафиолетовое излучение

Задание 10. Восстановите последовательность операций при определении точечной группы симметрии молекулы по стандартной схеме:

1 : Поиск осей симметрии и выбор главной оси (C_n)
2 : Поиск перпендикулярных к главной оси осей C_2
3 : Поиск горизонтальных (σ_h) и вертикальных (σ_v) плоскостей симметрии
4 : Определение наличия зеркально-поворотных осей (S_n) и центра инверсии (i)

Задание 11. Восстановите последовательность роста кристалла из раствора методом температурного перепада:

1 : Создание пересыщенного раствора при повышенной температуре
2 : Помещение затравки в зону с более низкой температурой
3 : Осаждение вещества на затравку вследствие пересыщения
4 : Постепенный рост монокристалла

Задание 12. Явление существования вещества в нескольких различных кристаллических модификациях называется _____.
Ответ: полиморфизм

Задание 13. Элементарная ячейка, содержащая узлы только в вершинах параллелепипеда, называется _____.
Ответ: примитивной

Задание 14. Сформулируйте основные отличия металлической связи от ионной с точки зрения кристаллохимии.
Ответ: *Металлическая связь:* ненаправленная и ненасыщаемая, объясняет высокую электропроводность, пластичность и образование плотнейших упаковок (ГЦК, ГПУ). *Ионная связь:* ненаправленная, ненасыщаемая, обусловлена электростатическим притяжением разноименных ионов. Структуры стремятся к максимальному КЧ и определяются соотношением радиусов ионов.

Задание 15. Предложите стратегию поиска информации о кристаллической структуре неизвестного Вам соединения, используя профессиональные источники информа-

ции.
Ответ: 1. Поиск по химической формуле или названию в специализированных кристаллографических базах данных 2. Поиск научных статей в библиографических базах, где часто приводятся кристаллографические данные. 3. Анализ ссылок в найденных статьях для получения более ранних или смежных работ.

Формируемая компетенция	Индикаторы сформированности компетенции
ОПК-2. Способен проводить с соблюдением норм техники безопасности химический эксперимент, включая синтез, анализ, изучение структуры и свойств веществ и материалов, исследование процессов с их участием, **индикаторами** достижения которой являются	• ОПК-2.1 Работает с химическими веществами с соблюдением норм техники безопасности. • ОПК-2.2 Синтезирует вещества и материалы разной природы с использованием имеющихся методик. • ОПК-2.3 Проводит стандартные операции для определения химического и фазового состава веществ и материалов на их основе. • ОПК-2.4 Исследует свойства веществ и материалов с использованием серийного научного оборудования.

Задание 1. Какой из перечисленных методов выращивания кристаллов основан на создании пересыщения за счет испарения растворителя при постоянной температуре?

1. Гидротермальный синтез
2. Метод Чохральского
3. Кристаллизация из низкотемпературных водных растворов
4. Метод Вернейля

Ответ: 3

Задание 2. Какой параметр рентгеноструктурного анализа позволяет определить число формульных единиц (Z) в элементарной ячейке?

1. Интенсивность отражения
2. Угол дифракции (θ)
3. Рентгеновская плотность и параметры ячейки
4. Структурный фактор

Ответ: 3

Задание 3. Что такое «полиморфизм» в кристаллохимии?

1. Способность вещества существовать в нескольких кристаллических структурах
2. Способность атомов замещать друг друга в решетке
3. Наличие в структуре пустот разного размера
4. Образование твердых растворов

Ответ: 1

Задание 4. Какие из перечисленных методов относятся к классическим методам получения дифракционной картины в рентгеноструктурном анализе?

1. Метод Лауэ
2. Метод порошка (Дебая-Шеррера)
3. Метод вращения монокристалла
4. Метод электронной микроскопии
5. Метод ИК-спектроскопии
6. Метод ядерного магнитного резонанса (ЯМР)
   Ответ: 1, 2, 3

Задание 5. Какие из перечисленных факторов необходимо контролировать для успешного выращивания монокристаллов из раствора?

1. Скорость изменения температуры
2. Величину пересыщения
3. Напряженность магнитного поля
4. Чистоту исходных реагентов
5. Скорость вращения мешалки
6. Давление в системе
   Ответ: 1, 2, 4

Задание 6. Какие из перечисленных операций входят в стандартный протокол определения химического состава вещества с помощью рентгенофазового анализа?

1. Отжиг образца для снятия напряжений
2. Помол пробы в тонкий порошок
3. Заполнение кюветы образцом
4. Запись дифрактограммы
5. Проведение хроматографического разделения
6. Измерение удельной электропроводности
   Ответ: 2, 3, 4

Задание 7. Какие из перечисленных свойств материалов можно исследовать с использованием серийного научного оборудования в лаборатории кристаллохимии?

1. Твердость по Моосу
2. Диэлектрическую проницаемость
3. Термическую стабильность (ДТА)
4. Магнитную восприимчивость
5. Вкусовые качества
6. Растворимость в органических растворителях
   Ответ: 2, 3, 4

Задание 8. Установите соответствие между методом выращивания кристаллов и его сущностью:

Метод Чохральского : Вытягивание кристалла из расплава на затравку
Гидротермальный синтез : Кристаллизация из растворов в воде при высоких температуре и давлении
Метод температурного перепада : Создание в кристаллизаторе зон с разной температурой для растворения и роста
Метод Вернейля : Спекание порошка в пламени гремучего газа

Задание 9. Установите соответствие между кристаллохимическим явлением и его определением:

Изоморфизм : Способность различных атомов или ионов замещать друг друга в кристаллической решетке
Полиморфизм : Способность вещества существовать в нескольких различных кристаллических структурах
Морфотропия : Изменение структуры при замене одного из компонентов в ряду родственных соединений
Политипия : Разновидность полиморфизма, при которой различные модификации отличаются лишь способом упаковки одинаковых слоев

Задание 10. Восстановите последовательность этапов стандартного рентгеноструктурного анализа монокристалла.
1 : Подбор и установка монокристалла на дифрактометр
2 : Сбор дифракционных данных (измерение интенсивностей отражений)
3 : Определение параметров элементарной ячейки и симметрии
4 : Расшифровка и уточнение кристаллической структуры

Задание 11. Расположите в правильном порядке шаги при синтезе кристаллов медного купороса ($CuSO_4 \cdot 5H_2O$) из водного раствора методом медленного испарения.
1 : Приготовление пересыщенного горячего раствора медного купороса
2 : Фильтрация раствора для удаления нерастворимых примесей
3 : Введение затравочного кристалла или ожидание самопроизвольного зарождения
4 : Медленное испарение растворителя и рост кристаллов

Задание 12. Коэффициент, показывающий, какая часть пространства элементарной ячейки занята атомами, называется коэффициент _____ упаковки.
Ответ: Плотности.

Задание 13. Структурный мотив силикатов, в котором кремнекислородные тетраэдры $[SiO_4]^{4-}$ соединены в бесконещие двумерные слои, характерен для силикатов _____ типа.
Ответ: Слоистого.

Задание 14. Опишите, как соблюдение норм техники безопасности влияет на планирование и проведение химического эксперимента по выращиванию кристаллов.
Ответ: Соблюдение техники безопасности является обязательным условием. Оно включает: оценку опасностей используемых реактивов (токсичность, коррозионная активность), выбор соответствующей посуды и оборудования (термостойкая, в вытяжном шкафу), использование СИЗ, знание процедур на случай аварии. Это влияет на выбор методики, организацию рабочего места и обеспечивает защиту здоровья исследователя и сохранность оборудования.

Задание 15. Опишите, как тип химической связи в кристалле (ионная, ковалентная, металлическая, молекулярная) влияет на его физические свойства (температура плавления, твердость, электропроводность).

Ответ: Ионная связь (NaCl): Высокие т.пл. и твердость, хрупкость, электропроводность в расплаве или растворе. **Ковалентная связь** (Алмаз): Очень высокие т.пл. и твердость, диэлектрик. **Металлическая связь** (Медь): Высокие т.пл. и пластичность, высокая электропроводность и теплопроводность. **Молекулярная связь** (Лед): Низкие т.пл. и твердость, диэлектрик.

Формируемая компетенция	Индикаторы сформированности компетенции
ПК-1. Способен владеть системой фундаментальных химических понятий и законов, **индикаторами** достижения которой являются	• ПК-1.1 Понимает основные принципы, законы, методологию изучаемых химических дисциплин, теоретические основы физических и физико-химических методов исследования; • ПК-1.2 Использует фундаментальные химические понятия в своей профессиональной деятельности; • ПК-1.3 Интерпретирует полученные результаты, используя базовые понятия химических дисциплин.

Задание 1. Какая из перечисленных сингоний относится к высшей категории?

1. Моноклинная
2. Ромбическая
3. Триклинная

4. Кубическая
   Ответ: 4

Задание 2. Что описывает уравнение Брэгга-Вульфа?

1. Интенсивность рассеяния рентгеновских лучей
2. Условие дифракции рентгеновских лучей на кристаллической решетке
3. Распределение электронной плотности
4. Скорость роста кристаллов
   Ответ: 2

Задание 3. Какой тип химической связи преобладает в молекулярных кристаллах?

1. Ионная
2. Металлическая
3. Ковалентная
4. Ван-дер-ваальсова
   Ответ: 4

Задание 4. Какие из перечисленных характеристик являются общими для плотнейших шаровых упаковок (ПШУ)? (Выберите три правильных ответа)

1. Координационное число 12
2. Наличие тетраэдрических и октаэдрических пустот
3. Координационное число 8
4. Относятся только к металлическим кристаллам
5. Существуют в гексагональном (ГПУ) и кубическом (ГЦК) вариантах
6. Характерны только для ионных кристаллов
   Ответ: 1, 2, 5

Задание 5. Какие из перечисленных структур относятся к каркасным? (Выберите три правильных ответа)

1. Структура алмаза
2. Структура NaCl
3. Структура SiO_2 (кварц)
4. Структура графита
5. Структура цеолитов
6. Структура I_2

   Ответ: 1, 3, 5

Задание 6. Какие из перечисленных явлений изучаются в кристаллохимии? (Выберите три правильных ответа)

1. Полиморфизм
2. Закон действующих масс
3. Изоморфизм
4. Химическая кинетика
5. Морфотропия
6. Электролиз

   Ответ: 1, 3, 5

Задание 7. Какие из перечисленных параметров можно определить с помощью рентгеноструктурного анализа? (Выберите три правильных ответа)

1. Параметры элементарной ячейки
2. Тип химической связи
3. Пространственная группа симметрии
4. Температура плавления
5. Атомные координаты
6. Цвет кристалла

   Ответ: 1, 3, 5

Задание 8. Установите соответствие между точечной группой симметрии и ее примером:

C_1 : Молекула, не имеющая никаких элементов симметрии
C_{2v} : Молекула воды (H_2O)
C_{3v} : Молекула аммиака (NH_3)
Td : Молекула метана (CH_4)

Задание 9. Установите соответствие между структурным типом и формулой соединения:

Перовскит : $CaTiO_3$
Шпинель : $MgAl_2O_4$
Сфалерит : ZnS
Флюорит : CaF_2

Задание 10. Расположите в правильном порядке уровни структурной организации вещества по степени упорядоченности (от более упорядоченного к менее упорядоченному).
1 : Идеальный кристалл (дальний порядок)
2 : Реальный кристалл (дефекты)

3 : Жидкий кристалл (ближний и средний порядок)
4 : Аморфное тело (ближний порядок)

Задание 11. Расположите в порядке увеличения координационного числа в металлических структурах.
1 : Примитивная кубическая
2 : Объемно-центрированная кубическая
3 : Гексагональная плотнейшая упаковка
4 : Гранецентрированная кубическая

Задание 12. Бесконечный периодический трехмерный мотив атомов в кристалле называется _____ .
Ответ: Кристаллическая структура.

Задание 13. Структурный мотив, в котором все химические связи одинаковы по природе и прочности, называется _____ .
Ответ: Гомодесмический.

Задание 14. Объясните, в чем заключается принципиальное различие между дальним и ближним порядком.
Ответ: Дальний порядок – это строгая периодичность в расположении частиц (атомов, ионов, молекул), повторяющаяся во всем объеме кристалла. Ближний порядок – это упорядоченное расположение частиц лишь на небольших расстояниях, в пределах нескольких межатомных, характерное для аморфных тел и жидкостей.

Задание 15. Каковы основные задачи, решаемые с помощью рентгеноструктурного анализа в химии?
Ответ: Определение точного строения молекул и кристаллических структур (межъядерные расстояния, валентные углы). Установление природы химической связи. Идентификация кристаллических фаз (фазовый анализ). Изучение дефектов структуры. Определение абсолютной конфигурации хиральных молекул.

7 ПЕРЕЧЕНЬ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ В ПРОЦЕССЕ ОБУЧЕНИЯ

Информационные технологии – обучение в электронной образовательной среде с целью расширения доступа к образовательным ресурсам, увеличения контактного взаимодействия с преподавателем, построения индивидуальных траекторий подготовки, объективного контроля и мониторинга знаний студентов.

В образовательном процессе по дисциплине используются следующие информационные технологии, являющиеся компонентами Электронной информационно-образовательной среды БГПУ:

- Официальный сайт БГПУ;
- Система электронного обучения ФГБОУ ВО «БГПУ»;
- Система «Антиплагиат.ВУЗ»;
- Электронные библиотечные системы;
- Мультимедийное сопровождение лекций.

8 ОСОБЕННОСТИ ИЗУЧЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ ИНВАЛИДАМИ И ЛИЦАМИ С ОГРАНИЧЕННЫМИ ВОЗМОЖНОСТЯМИ ЗДОРОВЬЯ

При обучении лиц с ограниченными возможностями здоровья применяются адаптивные образовательные технологии в соответствии с условиями, изложенными в разделе

«Особенности реализации образовательной программы для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья» основной образовательной программы (использование специальных учебных пособий и дидактических материалов, специальных технических средств обучения коллективного и индивидуального пользования, предоставление услуг ассистента (помощника), оказывающего обучающимся необходимую техническую помощь и т. п.) с учётом индивидуальных особенностей обучающихся.

Для обучающихся с ограниченными возможностями здоровья предусмотрены следующие формы организации педагогического процесса и контроля знаний:

- для слабовидящих:

обеспечивается индивидуальное равномерное освещение не менее 300 люкс;

для выполнения контрольных заданий при необходимости предоставляется увеличивающее устройство;

задания для выполнения, а также инструкции о порядке выполнения контрольных заданий оформляются увеличенным шрифтом (размер 16-20);

- для глухих и слабослышащих:

обеспечивается наличие звукоусиливающей аппаратуры коллективного пользования, при необходимости обучающимся предоставляется звукоусиливающая аппаратура индивидуального пользования;

- для лиц с тяжелыми нарушениями речи, глухих, слабослышащих все контрольные задания по желанию могут проводиться в письменной форме.

Основной формой организации педагогического процесса является интегрированное обучение инвалидов, т.е. все обучающиеся учатся в смешанных группах, имеют возможность постоянно общаться со сверстниками, легче адаптируются в социуме.

9 СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ И ИНФОРМАЦИОННЫХ РЕСУРСОВ

9.1 Литература

1. Булах, А.Г. Общая минералогия: учебник для студ. высш. учеб. заведений / А.Г. Булах, В.Г. Кривовичев, А.А. Золотарев. – 4-е изд., перераб. и доп. .– М. : Издательский центр «Академия, 2008. – 410 с. (23 экз.)

2. Кристаллография: зарождение, рост и морфология кристаллов: учебное пособие для вузов / Н.И. Леонюк, Е.В. Копорулина, Е.А. Волкова, В.В. Мальцев. - Москва : Издательство Юрайт, 2022. - 152 с. - (Высшее образование). - ISBN 978-5-534-04738-7. - Текст: электронный // Образовательная платформа Юрайт [сайт]. - URL: https://urait.ru/bcode/492446

3. Кнотько, А.В. Химия твердого тела: учеб. пособие для студ., обучающихся по спец. «Химия» / А.В. Кнотько, И.А. Пресняков, Ю.Д. Третьяков. – М. : Академия, 2006. – 301 с. (19 экз.)

9.2 Базы данных и информационно-справочные системы

1. XuMuK.ru http://www.xumuk.ru
2. Электронная библиотека по химии http://www.chem.msu.su/rus/elibrary/
3. Портал научной электронной библиотеки http://elibrary.ru/defaultx.asp

9.3 Электронно-библиотечные ресурсы

1. Polpred.com Обзор СМИ/Справочник https://polpred.com/news
1. ЭБС «Юрайт» https://urait.ru

10 МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКАЯ БАЗА

Для проведения занятий лекционного типа, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации используются аудитории, оснащённые учебной мебелью, аудиторной доской, компьютером(рами) с установленным лицензионным специализированным программным обеспечением, коммутатором для выхода в электронно-библиотечную систему и электронную информационно-образовательную среду БГПУ, мультимедийными проекторами, экспозиционными

экранами, учебно-наглядными пособиями (таблицы, мультимедийные презентации). Для проведения лабораторных занятий также используется:

Ауд. 335 «А» Учебная лаборатория геоинформационных технологий

- Комплект учебной мебели,
- компьютерные столы,
- аудиторная доска,
- компьютеры с установленным лицензионным программным обеспечением, экспозиционный экран,
- Комплект «Тонкий клиент TC-S-C3/266/128»,
- сканер,
- МФУ,
- принтер,
- приемник «GPS EtrexLeqend»,
- навигационный приемник «GPSMAP 60Mono».
- Используемое программное обеспечение: Microsoft®WINEDUperDVC AllLng Upgrade/SoftwareAssurancePack Academic OLV 1License LevelE Platform 1Year; Microsoft®OfficeProPlusEducation AllLng License/SoftwareAssurancePack Academic OLV 1License LevelE Platform 1Year; Dr.Web Security Suite; Java Runtime Environment; Calculate Linux

Ауд. 445 «А». Лаборатория физической химии

- Стол лабораторный 2-мест. (10 шт.)
- Стул (20 шт.)
- Стол преподавателя (1 шт.)
- Стул преподавателя (1 шт.)
- Пюпитр (1 шт.)
- Аудиторная доска (1 шт.)
- Компьютер с установленным лицензионным специализированным программным обеспечением (3 шт.)
- 8 - портовый коммутатор D-Link для выхода в электронно-библиотечную систему и электронную информационно-образовательную среду БГПУ (1 шт.)
- Мультимедийный проектор SHARP -10 X(1 шт.)
- Принтер лазерный «CANON» (2 шт.)
- Экспозиционный экран (навесной) (1 шт.)
- ЯМР-спектрометр низкого разрешения «Спин Трэк» (1 шт.)
- Аквадистиллятор ДЭ-10 (1 шт.)
- Весы GF-300 (1 шт.)
- Весы торсионные ВТ-100 (1 шт.)
- Вискозиметр (4 шт.)
- Иономер (3 шт.)
- Кондуктометр анион-4120 (3 шт.)
- КФК-2 (1 шт.)
- Люксмер (1 шт.)
- Мешалка магнитная П-Э-6100 (2 шт.)
- Модуль «Термический анализ» (3 шт.)
- Модуль «Термостат» (3 шт.)
- Модуль «Универсальный контроллёр» (3 шт.)
- Модуль «Электрохимия» (3 шт.)
- Модуль универсальный (6 шт.)
- Набор сит КП-131(1 шт.)
- Поляриметр (1 шт.)

- Потенциометр (1 шт.)
- Центрифуга лабораторная ОПН-8 (с ротором) (1 шт.)
- Штатив для электродов (2 шт.)
- Эксикатор с краном (1 шт.)
- Модуль «Общелабораторный» (1 шт.)
- Спектрофотометр (1 шт.)
- Спектрофотометр КФК-3КМ (1 шт.)
- Комплект ариометров (1 шт.)
- Метроном (1 шт.)
- Мост реохордный с сосудом
- Термостат ТС-1/80 СПУ (1 шт.)

Учебно-наглядные пособия - слайды, таблицы, мультимедийные презентации по дисциплине «Кристаллохимия»

Самостоятельная работа студентов организуется в аудиториях, оснащенных компьютерной техникой с выходом в электронную информационно-образовательную среду вуза, в специализированных лабораториях по дисциплине, а также в залах доступа в локальную сеть БГПУ.

Лицензионное программное обеспечение: операционные системы семейства Windows, Linux; офисные программы Microsoft office, Libreoffice, OpenOffice; Adobe Photoshop, Matlab, DrWeb antivirus и т.д.

Разработчик: Родионова Н.А., кандидат химических наук, доцент кафедры химии,

Рождествина В.И., кандидат физико-математических наук, доцент кафедры химии, руководитель Аналитического центра минералого-геохимических исследований ФГБУН Институт геологии и природопользования Дальневосточного отделения Российской академии наук (ИГИП ДВО РАН)

11 ЛИСТ ИЗМЕНЕНИЙ И ДОПОЛНЕНИЙ

Утверждение изменений и дополнений в РПД для реализации в 2024/2025 уч. г.

РПД пересмотрена, обсуждена и одобрена для реализации в 2024/2025 учебном году на заседании кафедры химии (протокол № 8 от 30 мая 2024 г.).

Утверждение изменений и дополнений в РПД для реализации в 2025/2026 уч. г.

РПД пересмотрена, обсуждена и одобрена для реализации в 2025/2026 уч. г. на заседании кафедры химии (протокол № 6 от 26 марта 2025 г.).