

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Курганский государственный университет»
(КГУ)

Кафедра «Физическая и прикладная химия»

УТВЕРЖДАЮ:
Первый проректор
_____ / Т.Р. Змызгова /
« ____ » _____ 2024 г.

Рабочая программа учебной дисциплины КРИСТАЛЛОХИМИЯ

образовательной программы высшего образования –
программы специалитета
04.05.01 – Фундаментальная и прикладная химия

Направленность:
«Аналитическая химия»

Форма обучения: очная

Курган 2024

Рабочая программа дисциплины «Кристаллохимия» составлена в соответствии с учебным планом по программе специалитета Фундаментальная и прикладная химия (Аналитическая химия), утвержденными 28 июня 2024 г.

Рабочая программа дисциплины одобрена на заседании кафедры «Физическая и прикладная химия» 05 июля 2024 года, протокол № 10.

Рабочую программу составил
доцент кафедры ФиПХ, к.х.н.

А.В. Шаров

Согласовано:

Заведующий кафедрой ФиПХ

Л.В. Мосталыгина

Специалист по учебно-
методической работе
учебно-методического отдела

Г.В. Казанкова

Начальник управления
образовательной деятельности

И.В. Григоренко

1. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ

Всего: 3 зачетных единицы трудоемкости (108 академических часов)

Очная форма обучения

Вид учебной работы	На всю дисциплину	Семестр
		7
Аудиторные занятия (контактная работа с преподавателем), всего часов	48	48
в том числе:		
Лекции	12	12
Лабораторные работы	36	36
Самостоятельная работа, всего часов	60	60
в том числе:		
Подготовка к экзамену	27	27
Другие виды самостоятельной работы (самостоятельное изучение тем (разделов) дисциплины)	33	33
Вид промежуточной аттестации	Экзамен	Экзамен
Общая трудоемкость дисциплины и трудоемкость по семестрам, часов	108	108

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ

Дисциплина «Кристаллохимия» относится к обязательной части блока дисциплин Б1. Дисциплина проводится в 7 семестре.

Изучение дисциплины базируется на результатах обучения, сформированных при изучении следующих дисциплин:

- Математика;
- Физика;
- Информатика;
- Неорганическая химия;
- Физическая химия;
- Аналитическая химия;
- Органическая химия;
- Физические методы исследования.

Требования к входным знаниям, умениям, навыкам и компетенциям:

- владение навыками разговорно-бытовой речи;
- понимание устной (монологической и диалогической) речи на бытовые и общекультурные темы;
- владение наиболее употребительной грамматикой и основными грамматическими явлениями, характерными для устной и письменной речи повседневного общения;
- знание базовой лексики, представляющей стиль повседневного и общекультурного общения;
- освоение следующих компетенций на уровне не ниже порогового: УК-1 (Способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, вырабатывать стратегию действий), ОПК-1 (Способен анализировать, интерпретировать и обобщать результаты экспериментальных и расчетно-теоретических работ химической направленности), ОПК-3 (Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием, используя современное программное обеспечение и базы данных профессионального назначения), ОПК-4 (Способен планировать работы химической направленности, обрабатывать и интерпретировать полученные результаты с использованием теоретических знаний и практических навыков решения математических и физических задач), ОПК-5 (Способен использовать информационные базы данных и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности с учетом основных требований информационной безопасности).

3. ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ

Целью изучения дисциплины «Кристаллохимия» является изучение фундаментальных понятий, представлений и физико-химических моделей, используемых при описании структуры химических соединений в кристаллическом состоянии

Задачами изучения дисциплины являются:

- уяснение сути фундаментальных понятий и представлений кристаллохимии;
- раскрытие роль симметрии и трехмерной периодичности при описании структуры кристаллических веществ;
- рассмотрение основных методов определения и количественного описания структуры кристаллов;
- рассмотрение основные типы кристаллических структур.

Компетенции, формируемые в результате освоения дисциплины:

- Способен анализировать, интерпретировать и обобщать результаты экспериментальных и расчетно-теоретических работ химической направленности (ОПК-1);
- Способен проводить химический эксперимент с использованием современного оборудования, соблюдая нормы техники безопасности (ОПК-2);
- Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием, используя современное программное обеспечение и базы данных профессионального назначения (ОПК-3);
- Способен планировать работы химической направленности, обрабатывать и интерпретировать полученные результаты с использованием теоретических знаний и практических навыков решения математических и физических задач (ОПК-4);
- Способен использовать информационные базы данных и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности с учетом основных требований информационной безопасности (ОПК-5);
- Способен представлять результаты профессиональной деятельности в устной и письменной форме в соответствии с нормами и правилами, принятыми в профессиональном сообществе (ОПК-6).

В результате изучения дисциплины «Кристаллохимия» обучающийся должен:

- Знать фундаментальные понятия, терминологию и символику кристаллохимии (для ОПК-4);
- Знать систематику кристаллических структур важнейших классов простых и сложных неорганических и органических соединений (для ОПК-4);
- Знать теорию строения кристаллов и частично упорядоченных конденсированных фаз и схему классификации кристаллических структур в основных классах химических соединений (для ОПК-4);
- Знать суть основных методов кристаллохимического анализа (для ОПК-1, ОПК-2, ОПК-3);
- Уметь использовать данные по атомному строению кристаллов для изучения физических и химических свойств кристаллических веществ и пояснить физические основы таковой связи (для ОПК-1, ОПК-5);
- Уметь осознанно использовать структурные данные в химическом исследовании (для ОПК-1);
- Владеть методами описания кристаллических структур (для ОПК-2, ОПК-3, ОПК-5, ОПК-6);
- Владеть навыками работы в прикладных программах для визуального моделирования кристаллических структур (для ОПК-3).

Индикаторы и дескрипторы части соответствующей компетенции, формируемой в процессе изучения дисциплины «Кристаллохимия», оцениваются при помощи оценочных средств.

Планируемые результаты обучения по дисциплине «Кристаллохимия», индикаторы
достижения компетенций ОПК-1, ОПК-2, ОПК-3, ОПК-4, ОПК-5, ОПК-6,
перечень оценочных средств

№ п/п	Код индикатора достижения компетенции	Наименование индикатора достижения компетенции	Код планируемого результата обучения	Планируемые результаты обучения	Наименование оценочных средств
1.	ИД-1 _{ОПК-1}	Знать: суть основных методов кристаллохимического анализа	З (ИД-1 _{ОПК-1})	Знает: методы описания кристаллических структур	Вопросы для подготовки и защиты результатов лабораторных работ
2.	ИД-2 _{ОПК-1}	Уметь: формулировать заключения и выводы по результатам анализа литературных данных, анализирует результаты расчетов свойств веществ и материалов	У (ИД-2 _{ОПК-1})	Умеет: систематизировать и анализировать результаты химических экспериментов, наблюдений, измерений, а также результаты расчетов свойств веществ	Вопросы для защиты результатов лабораторных работ, вопросы для рубежных контролей
3.	ИД-3 _{ОПК-1}	Владеть: приемами интерпретации результатов собственных экспериментов и расчетно-графических работ	В (ИД-3 _{ОПК-1})	Владеет: приемами анализа и обобщения результатов собственных экспериментов и расчетно-графических работ	Вопросы для защиты результатов лабораторных работ, вопросы для рубежных контролей
4.	ИД-1 _{ОПК-2}	Знать: нормы техники безопасности при работе с веществами и материалами	З (ИД-1 _{ОПК-2})	Знает: правила работы с химическими объектами с соблюдением норм техники безопасности	Вопросы для допуска к лабораторным работам
5.	ИД-2 _{ОПК-2}	Уметь: использовать существующие и разрабатывать новые методики получения и характеристики веществ и материалов для решения задач профессиональной деятельности	У (ИД-2 _{ОПК-2})	Умеет: синтезировать вещества и материалы разной природы с использованием имеющихся методик	Вопросы для защиты результатов лабораторных работ
6.	ИД-3 _{ОПК-2}	Владеть: навыками исследования свойств веществ и материалов с использованием современного научного оборудования	В (ИД-3 _{ОПК-2})	Владеет: приемами работы на серийном и специальном научном оборудовании	Вопросы для защиты результатов лабораторных работ
7.	ИД-1 _{ОПК-3}	Знать: методы описания кристаллических структур	З (ИД-1 _{ОПК-3})	Знает: прикладные программы для визуального моделирования кристаллических структур	Вопросы для допуска к лабораторным работам
8.	ИД-2 _{ОПК-3}	Уметь: применять теоретические и полумпирические модели при решении задач	У (ИД-2 _{ОПК-3})	Умеет: использовать данные по атомному строению кристаллов	Вопросы для защиты результатов лабораторных работ

		химической направленности		для изучения физических и химических свойств кристаллических веществ и пояснить физические основы таковой связи	
9.	ИД-3 _{ОПК-3}	Владеть: стандартным программным обеспечением и специализированными базами данных при решении задач профессиональной деятельности	В (ИД-3 _{ОПК-3})	Владеет: навыками работы в прикладных программах для визуального моделирования кристаллических структур	Вопросы для защиты результатов лабораторных работ, вопросы для рубежных контролей
10.	ИД-1 _{ОПК-4}	Знать: схему классификации кристаллических структур в основных классах химических соединений	З (ИД-1 _{ОПК-4})	Знает: систематику кристаллических структур важнейших классов простых и сложных неорганических и органических соединений	Задачи рубежного контроля, экзаменационные задачи
11.	ИД-2 _{ОПК-4}	Уметь: проводить вычисления с измеряемыми величинами на основе теоретических представлений и законов кристаллохимии	У (ИД-2 _{ОПК-4})	Умеет: интерпретировать результаты химических наблюдений и расчётов с использованием законов и представлений кристаллохимии	Задачи рубежного контроля, экзаменационные задачи
12.	ИД-3 _{ОПК-4}	Владеть: рациональными приёмами решения математических и физических задач	В (ИД-3 _{ОПК-4})	Владеет: базовыми знаниями в области математики и физики при планировании работ и проведении расчётов химической направленности	Задачи рубежного контроля, экзаменационные задачи
13.	ИД-1 _{ОПК-5}	Знать: современные ИТ-технологии для сбора, анализа и представления информации химического профиля с соблюдением норм и требований информационной безопасности	З (ИД-1 _{ОПК-5})	Знает: современные ИТ-технологии для сбора, анализа и представления информации о строении кристаллов основных классов химических соединений	Вопросы для защиты результатов лабораторных работ, вопросы для рубежных контролей
14.	ИД-2 _{ОПК-5}	Уметь: применять стандартные и оригинальные программные продукты, при необходимости адаптируя их для решения задач профессиональной деятельности	У (ИД-2 _{ОПК-5})	Умеет: использовать программные продукты для описания и объяснения строения кристаллов при изучении физических и химических свойств веществ	Вопросы для защиты результатов лабораторных работ, вопросы для рубежных контролей
15.	ИД-3 _{ОПК-5}	Владеть: современными вычислительными методами для обработки данных химического эксперимента, моделирования	В (ИД-3 _{ОПК-5})	Владеет: современными методами описания и моделирования кристаллических структур на основе	Вопросы для защиты результатов лабораторных работ, вопросы для рубежных контро-

		свойств веществ (материалов) и процессов с их участием		обработки экспериментальных данных	лей
16.	ИД-1 _{ОПК-6}	Знать: требования к оформлению отчёта о выполнении лабораторной или расчётно-графической работы	З (ИД-1 _{ОПК-6})	Знает: стандартную форму составления отчёта на русском языке	Отчёты по лабораторным работам, задачи рубежного контроля, экзаменационные вопросы и задачи
17.	ИД-2 _{ОПК-6}	Уметь: представлять результаты работы в виде тезисов доклада на русском и английском языке в соответствии с нормами и правилами, принятыми в химическом сообществе	У (ИД-2 _{ОПК-6})	Умеет: составлять текст доклада, реферата, тезисов с использованием химической информации из различных источников	Вопросы для сдачи экзамена
18.	ИД-3 _{ОПК-6}	Владеть: приложениями для построения графиков, диаграмм, выполнения расчётов, создания презентации по теме работы	В (ИД-3 _{ОПК-6})	Владеет: приёмами работы с компьютерными программами для представления результатов экспериментальной и теоретической деятельности	Вопросы для защиты лабораторных работ

4. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

4.1. Учебно-тематический план

Очная форма обучения

Рубеж	Номер раздела, темы	Наименование раздела, темы	Количество часов контактной работы с преподавателем	
			Лекции	Лабораторные работы
Рубеж 1	1	Симметрия и структурные классы кристаллических систем	6	6
		Рубежный контроль № 1		2
Рубеж 2	2	Общая и систематическая кристаллохимия	4	20
	3	Методы исследования кристаллических структур	2	6
		Рубежный контроль № 2	–	2
Всего:			12	36

4.2. Содержание лекционных занятий

Тема 1. Симметрия и структурные классы кристаллических систем

Кристаллическая структура вещества. Ряды сетки и решетки. Элементарная ячейка. Принципы выбора элементарной ячейки. Виды кристаллографических проекций. Символы рядов, сеток и решеток.

Операции и элементы симметрии. Теоремы о сочетании элементов симметрии. Взаимодействие операций. Тожественное преобразование. Группа операций симметрии,

порядок группы, подгруппа. Категории симметрии и семейства точечных групп по Шенфлису и Герману-Могену. Точечные группы геометрических фигур и молекул. Симметрия правильных многогранников (платоновых тел).

Трансляционная симметрия и кристаллическая решетка, параметры элементарной ячейки. Сингонии, голоэдрические группы, кристаллографические точечные группы (кристаллографические классы), Примитивные и центрированные решетки; классы Браве и решетки Браве.

Открытые кристаллографические элементы симметрии (плоскости скользящего отражения a, b, c, n, d и e , винтовые оси 21, 31, 32, 41, 42, 43, 61, 62, 63, 64, 65), их обозначения по Герману-Могену и действие. Теоремы о сочетании открытых элементов симметрии. Пространственные группы, их символы по Герману-Могену, связь с кристаллографическим классом. Системы эквивалентных позиций (орбиты) пространственных групп, кратность общей позиции. Графики простейших групп низших и средних сингоний: (P1, P1, P2, P21, C2, Pm, Pc, Cm, Cc, P2/m, P2/c, P21/m, P21/c, C2/m, P222, Pmm2, Pmmm, P4, I4, P4₁, P4₂, P 4, P3, P3₁, P 3, P 6, P6, P6₁, P6₂, P6₃).

Тема 2. Общая и систематическая кристаллохимия

Межатомные взаимодействия в кристаллических металлах, зависимость физических свойств металлов от их строения и межатомного связывания. Структуры металлов: плотные и плотнейшие шаровые упаковки (ПК, ПГ, ОЦК, ГПУ, ГЦК) с примерами металлов; виды и размеры пустот в этих упаковках. Металлические радиусы.

Ковалентные и ван-дер-ваальсовы радиусы. Аллотропия, полиморфизм и изоморфизм, политипы в неметаллах. Особенности строения простых веществ для элементов, примыкающих к неметаллам в Периодической системе (B, Ga, Al, Pb, Bi, Po). Структуры алмаза и графита, Si и Sn, I₂, кристаллических инертных газов. Кристаллы фуллерена C₆₀, N₂, белого и черного фосфора, ромбической и моноклинной серы S₈.

Простейшие структурные типы AX и AX₂: CsCl, NaCl, ZnS (сфалерит, вюрцит), NiAs, флюорит и антифлюорит, рутил, двухслойный и четырехслойный политипы CdI₂, CdCl₂ и Cs₂O.

Характерные координационные полиэдры (к.ч. от 2 до 12) в координационных соединениях. Мостиковая функция лигандов, координационные полиэдры с общими вершинами.

Общие принципы строения солей с многоатомными анионами. Структуры анионов, прочность связывания и свойства солей кислородных кислот в рядах нитраты – карбонаты – бораты и перхлораты – сульфаты – фосфаты – силикаты. Склонность к образованию олигомерных и полимерных анионов в этих семействах. Описание структур KClO₄, K₂PtCl₆, CaCO₃ (кальцит, арагонит) по аналогии с простыми структурными типами.

Общие принципы органической кристаллохимии. Стандартные длины одинарных и кратных связей C–C. Ковалентные и ван-дер-ваальсовы радиусы основных элементов–органиогенов: C, H, O, N, F, Cl, Br. Принцип плотной упаковки молекул, коэффициент упаковки, молекулярное координационное число. Мотивы расположения молекул в кристаллических структурах метана, n-алканов, бензола, нафталина. Типы H-связей (слабая, средняя, сильная): интервалы энергии, расстояний X···Y, углов X–H···Y (X, Y = O, N, S, F). Влияние водородных связей на структуру и свойства кристаллов, мотивы H-связанных молекул.

Тема 3. Методы исследования кристаллических структур

Принцип работы и спектр рентгеновской трубки. Тормозное излучение и характеристические линии. Синхротронное излучение, выработка рентгеновского СИ в ускорителе электронов.

Дифракция рентгеновского излучения на кристалле. Формула Брегга, кристаллы-монокроматоры. Блок-схема рентгеновского дифрактометра. Мозаичное строение реаль-

ного кристалла, зависимость полуширины рефлекса от размера области когерентного рассеяния, формула Шерера.

Межплоскостные расстояния и индексы рефлексов, понятие об обратной решетке. Связь индексов hkl с межплоскостными расстояниями для кристаллов орторомбической, тетрагональной и кубической сингоний, индцирование дифрактограмм.

Порошковые дифрактограммы в рентгенофазовом анализе, относительные интенсивности рефлексов, корундовое число. Банк порошковых данных ICDD и содержащаяся в нем информация. Понятие о проблеме фаз и методах расшифровки кристаллических структур. Основные этапы рентгеноструктурного анализа монокристаллов (РСА). Параметры тепловых колебаний, R-фактор и интервал его значений для надежно установленных структур. Современная форма представления кристаллической структуры: Crystal information file (name.cif) и содержащаяся в нем информация. Банки структурных данных (ICSD, CSD, PDB): поиск и обработка содержащейся в них структурной информации. Программа визуализации кристаллических структур Diamond, ее возможности.

4.3. Лабораторные работы

Номер раздела, темы	Наименование раздела, темы	Наименование лабораторной работы	Норматив времени, час.
1	Симметрия и структурные классы кристаллических систем	Стандартный план описания кристаллических структур	6
		Рубежный контроль 1	2
2	Общая и систематическая кристаллохимия	Структурные типы хлорида цезия и хлорида натрия	4
		Структурные типы железа и серебра	4
		Структуры графита и красного фосфора	4
		Структура Кеггина	4
		Структура белка	4
3	Методы исследования кристаллических структур	Моделирование и исследование структуры золота	6
		Рубежный контроль 2	2
Всего:			36

5. МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ОБУЧАЮЩИМСЯ ПО ОСВОЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ

При прослушивании лекций рекомендуется в конспекте отмечать все важные моменты, на которых заостряет внимание преподаватель, в частности те, которые направлены на качественное выполнение соответствующей лабораторной работы.

Залогом качественного выполнения лабораторных работ является самостоятельная подготовка к ним накануне путем повторения материалов лекций. Рекомендуется подготовить вопросы по неясным моментам и обсудить их с преподавателем в начале лабораторной работы. Обязательным является оформление лабораторной работы заранее перед занятием с использованием выданных преподавателем методических рекомендаций. В оформлении лабораторной работы должна быть сформулирована цель работы, должны

присутствовать разделы «Краткая теория», «Последовательность выполнения работы», «Основные результаты», «Вывод». По окончании работы отчет по ней предоставляется на подпись преподавателю, после чего она должна быть защищена. Для защиты лабораторной работы преподавателем заранее выдается список вопросов для подготовки.

На практических занятиях предусмотрено решение расчётных и качественных задач. Приветствуется работа в команде, совместная деятельность, направленная на решение общей поставленной задачи, междисциплинарное обучение, подразумевающее использование знаний из разных областей (математика, физика, неорганическая, органическая и физическая химия), группируемых и концентрируемых в контексте конкретно решаемой задачи.

При чтении лекций преподавателем запланировано применение мультимедийных презентаций и специального программного обеспечения для демонстрации особенностей кристаллического строения твердых веществ. Преподавателем запланировано применение на лабораторных занятиях технологий развивающейся кооперации, коллективного взаимодействия, разбора конкретных ситуаций. Поэтому на некоторых занятиях практикуется групповой метод выполнения лабораторных работ и защиты отчетов, а также самооценка и обсуждение результатов выполнения лабораторных работ.

Для текущего контроля успеваемости преподавателем используется балльно-рейтинговая система контроля и оценки академической активности. Поэтому настоятельно рекомендуется тщательно прорабатывать материал дисциплины при самостоятельной работе, участвовать во всех формах обсуждения и взаимодействия, как на лекциях, так и на лабораторных занятиях в целях лучшего освоения материала и получения высокой оценки по результатам освоения дисциплины.

Выполнение самостоятельной работы подразумевает самостоятельное изучение разделов дисциплины, подготовку к лабораторным занятиям, к рубежным, подготовку к экзамену.

Рекомендуемая трудоемкость самостоятельной работы представлена в таблице:

Рекомендуемый режим самостоятельной работы

Наименование вида самостоятельной работы	Рекомендуемая трудоемкость, акад. час.
Самостоятельное изучение тем дисциплины:	11
Симметрия и структурные классы кристаллических систем	4
Общая и систематическая кристаллохимия	4
Методы исследования кристаллических структур	3
Подготовка к лабораторным занятиям (по 1 часу на каждое занятие)	18
Подготовка к рубежным контролям (по 2 часа на каждый рубеж)	4
Подготовка к экзамену	27
Всего:	60

Приветствуется выполнение разделов самостоятельной работы в лабораториях в компьютерном классе кафедры «Физическая и прикладная химия».

6. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ АТТЕСТАЦИИ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

6.1. Перечень оценочных средств

1. Балльно-рейтинговая система контроля и оценки академической активности обучающихся в КГУ.
2. Перечень вопросов для подготовки и защиты лабораторных работ.
3. Отчеты обучающихся по лабораторным работам.
4. Перечень заданий к рубежным контролям № 1, № 2.
5. Перечень вопросов к экзамену

6.2. Система балльно-рейтинговой оценки работы обучающихся по дисциплине

№	Наименование	Содержание					
Очная форма обучения							
1	Распределение баллов за семестры по видам учебной работы, сроки сдачи учебной работы (доводятся до сведения обучающихся на первом учебном занятии)	Распределение баллов					
		Вид учебной работы:	Посещение лекций	Выполнение и защита отчетов по лабораторным работам	Рубежный контроль №1	Рубежный контроль №2	Экзамен
		Балльная оценка:	До 6	До 42	До 12	До 10	До 30
	Примечания:	6 лекций по 1 баллу	До 6-ти баллов за 4-х часовую и 6-ти часовую работу	На 2-й лабораторной работе	На 9-й лабораторной работе		
2	Критерий пересчета баллов в традиционную оценку по итогам работы в семестре и экзамена	60 и менее баллов – неудовлетворительно; 61...73 – удовлетворительно; 74... 90 – хорошо; 91...100 – отлично					

3	Критерии допуска к промежуточной аттестации, возможности получения экзаменационной оценки по дисциплине автоматически, возможность получения бонусных баллов	<p>Для допуска к промежуточной аттестации по дисциплине за семестр обучающийся должен набрать по итогам текущего и рубежного контролей не менее 51 балла. В случае если обучающийся набрал менее 51 балла, то к аттестационным испытаниям он не допускается.</p> <p>Для получения экзамена без проведения процедуры промежуточной аттестации обучающемуся необходимо набрать в ходе текущего и рубежных контролей не менее 61 балла. В этом случае итог балльной оценки, получаемой обучающимся, определяется по количеству баллов, набранных им в ходе текущего и рубежных контролей. При этом, на усмотрение преподавателя, балльная оценка обучающегося может быть повышена за счет получения дополнительных баллов за академическую активность.</p> <p>Обучающийся, имеющий право на получение оценки без проведения процедуры промежуточной аттестации, может повысить ее путем сдачи аттестационного испытания. В случае получения обучающимся на аттестационном испытании 0 баллов итог балльной оценки по дисциплине не снижается.</p> <p>За академическую активность в ходе освоения дисциплины, участие в учебной, научно-исследовательской, спортивной, культурно-творческой и общественной деятельности обучающегося могут быть начислены дополнительные баллы. Максимальное количество дополнительных баллов за академическую активность составляет 30.</p> <p>Основанием для получения дополнительных баллов являются:</p> <ul style="list-style-type: none"> - выполнение дополнительных заданий по дисциплине; дополнительные баллы начисляются преподавателем; - участие в течение семестра в учебной, научно-исследовательской, спортивной, культурно-творческой и общественной деятельности КГУ.
4	Формы и виды учебной работы для неуспевающих (восстановившихся на курсе обучения) обучающихся для получения недостающих баллов в конце семестра	<p>В случае если к промежуточной аттестации (экзамену) набрана сумма менее 51 балла, обучающемуся необходимо набрать недостающее количество баллов за счет выполнения дополнительных заданий, до конца последней (зачетной) недели семестра. При этом необходимо проработать материал всех пропущенных практических занятий.</p> <p>Формы дополнительных заданий (назначаются преподавателем):</p> <ul style="list-style-type: none"> - выполнение и защита пропущенной лабораторной работы (при невозможности дополнительного проведения лабораторной работы преподаватель устанавливает форму дополнительного задания по тематике пропущенной лабораторной работы самостоятельно) – до 10 баллов. <p>Ликвидация академических задолженностей, возникших из-за разности в учебных планах при переводе или восстановлении, проводится путем выполнения дополнительных заданий, форма и объем которых определяется преподавателем.</p>

6.3. Процедура оценивания результатов освоения дисциплины

Рубежные контроли проводятся в форме коллоквиума, включающего устное собеседование и решение расчетных задач. Экзамен проводится в форме устного собеседования и решения расчетных задач. Вопросы и задача содержатся в экзаменационном билете.

Перед проведением каждого рубежного контроля преподаватель прорабатывает с обучающимися основной материал соответствующих разделов дисциплины в форме краткой лекции-дискуссии.

На решение задачи на рубежном контроле обучающемуся дается 20 минут. Коллоквиумы для рубежных контролей 1 и 2 состоят из 10 вопросов. Критерии оценивания задач и вопросов содержатся в УМК дисциплины.

Экзаменационный билет включает 2 теоретических вопроса и задачу, каждый вопрос и задача оцениваются в 10 баллов. На подготовку к ответу обучающемуся дается минимум 45 минут. Оценка определяется по результатам устного собеседования.

Результаты текущего контроля успеваемости и экзамена заносятся преподавателем в экзаменационную ведомость, которая сдается в организационный отдел института в день экзамена, а также выставляются в зачетную книжку обучающегося.

6.4. Примеры оценочных средств для рубежных контролей и экзамена

Перечень вопросов к рубежному контролю № 1

1. Ряды, плоскости и решетки, их символы. Кристаллическая ячейка.
2. Виды кристаллографических проекций.
3. Элементарная ячейка и ее параметры.
4. Элементы симметрии кристаллических многогранников: виды, обозначения, проекции, примеры. Теоремы о сочетании элементов симметрии.
5. Точечные группы симметрии.
6. Категории, системы осей координат, сингонии. Каждую сингонию разобрать с применением конкретного примера.
7. 14 типов решеток Бравэ: отличительные особенности, разобрать на примерах.
8. Трансляционная симметрия кристаллических структур. Плоскости скользящего отражения, винтовые оси: обозначение, проекции, примеры.
9. Правильная система точек. Пространственные группы симметрии: принципы обозначения примеры.
10. Группа симметрии $m\bar{3}m$. Характерные признаки, принцип наименования, примеры структур групп $Fm\bar{3}m$, $Im\bar{3}m$.

Перечень вопросов к рубежному контролю № 2

1. Типы связей в кристаллах.
2. Межатомные расстояния, атомные и ионные радиусы.
3. Координационные числа и координационные многогранники.
4. Плотнейшие упаковки частиц.
5. Стандартный план описания кристаллических структур.
6. Структурный тип α -железа.
7. Структурный тип магния.
8. Структуры алмаза и графита.
9. Структурный тип хлорида натрия.
10. Структура сфалерита.

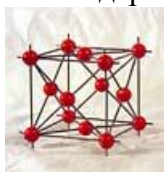
Пример заданий к рубежному контролю №1

1. Как располагаются в пространстве грани, характеризующиеся следующими символами: 1) 001, 2) 110, 3) 111, 4) 010?

2. Сколько инверсионных осей четвертого или шестого порядка бывает в многогранниках, в сочетании с какими другими осями?
3. Нарисуйте примитивную ячейку в гексагональной сингонии, базоцентрированную ячейку в моноклинной сингонии, объемноцентрированную ячейку в тетрагональной сингонии, гранецентрированную ячейку в ромбической сингонии. Каковы параметры этих ячеек?
4. Покажите на рисунке ячейки меди плоскости скользящего отражения. Каков их тип?
5. Нарисуйте ячейку алмаза. Где в ней проходят винтовые оси 4_1 ?

Пример заданий к рубежному контролю №2

1. Кратчайшее межатомное расстояние в одной из модификаций стронция равно 4,18 Å (структурный тип железа). Определить плотность кристаллов.
2. Кристаллы хлорида ртути имеют плотность 5,44 г/м³. Установить является ли хлорид ртути каломелью Hg₂Cl₂ или сулемой HgCl₂, если параметры тетрагональной ячейки каломели: $a = 4,47, b = 10,89$ Å, $Z = 2$; параметры ортогональной ячейки сулемы: $a = 5,96, b = 12,74, c = 4,32$ Å, $Z = 4$.
3. Чему равно координационное число калия в структуре KJ, если ионные радиусы калия и йода соответственно равны 1,33 и 2,2 Å?
4. Атомы А располагаются в вершинах кубической ячейки и в ее центре; атомы В - в центрах всех граней. Найдите координационные числа атомов.
5. Описать элементарную ячейку меди по стандартному плану.



Список вопросов к экзамену

1. Ряды, сетки, решетки. Трансляция, элементарная ячейка. Принципы выбора элементарной ячейки.
2. Кристаллографические проекции. Виды проекций. Разобрать на примере ОЦК-ячейки.
3. Элементы симметрии кристаллических многогранников: плоскость симметрии, центр инверсии. Действие элементов, отображение на проекции. Привести примеры.
4. Элементы симметрии кристаллических многогранников: ось симметрии, инверсионная ось. Действие элементов, отображение на проекции. Привести примеры.
5. Теоремы о сочетании элементов симметрии.
6. Кристаллографические категории, сингонии и системы осей координат. Привести примеры.
7. Типы ячеек Бравэ. Привести примеры.
8. Принцип обозначения класса симметрии.
9. Классы симметрии кристаллических многогранников.
10. Элементы симметрии кристаллических структур: плоскости скользящего отражения: типы, обозначение, примеры.
11. Элементы симметрии кристаллических структур: зеркально-поворотная ось. Типы осей, обозначение, примеры.
12. Правильная система точек. Пространственные группы симметрии. Привести примеры.
13. Плотнейшие упаковки частиц. Виды плотнейших упаковок.
14. Межатомные расстояния, атомные и ионные радиусы. Примеры. Связь межатомных расстояний с параметрами элементарных ячеек.

15. Координационные числа и координационные многогранники. Привести примеры.
16. Стандартный план описания кристаллических структур.
17. Дифракция рентгеновских лучей. Уравнения Лауэ. Уравнение Брэгга – Вульфа.
18. Аппаратурное оформление рентгеноструктурного анализа.
19. Применение рентгеноструктурного анализа в кристаллографии.
20. Структурный тип альфа-железа.
21. Структурный тип меди.
22. Структурный тип магния.
23. Структурный тип серебра.
24. Структура хлорида цезия
25. Структура графита.
26. Структурный тип хлорида натрия.
27. Структурный тип флюорита.
28. Структурный тип сфалерита.
29. Кристаллические структуры силикатов.

6.5. Фонд оценочных средств

Полный банк заданий для текущего, рубежных контролей и промежуточной аттестации по дисциплине, показатели, критерии, шкалы оценивания компетенций, методические материалы, определяющие процедуры оценивания образовательных результатов, приведены в учебно-методическом комплексе дисциплины.

7. ОСНОВНАЯ И ДОПОЛНИТЕЛЬНАЯ УЧЕБНАЯ ЛИТЕРАТУРА

7.1. Основная учебная литература

1. Кристаллохимия. Краткий курс [Электронный ресурс]: учебник / Урусов В.С., Ерёмин Н.Н. - М.: Издательство Московского государственного университета, 2010. – 256 с. (Доступ из ЭБС «Консультант студента»)

7.2. Дополнительная учебная литература

1. Кристаллохимия природных полиморфов углерода: от графита до графена [Электронный ресурс] / Новгородова М.И. - Ростов н/Д: Изд-во ЮФУ, 2009. – 120 с. (Доступ из ЭБС «Консультант студента»)
2. Кристаллография, минералогия и обогащение полезных ископаемых [Электронный ресурс] / Брагина В.И. - Красноярск: СФУ, 2012. – 152 с. (Доступ из ЭБС «Консультант студента»)

8. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ ОБУЧАЮЩИХСЯ

В ходе самостоятельной работы обучающийся изучает теоретический материал, используя источники из перечня основной и дополнительной учебной литературы, а также учебно-методические материалы: Филистеев, О. В. Модельные представления в кристаллохимии: в 2-х частях / О.В. Филистеев, А.В. Криштоп // Курган: Изд-во Курганского государственного университета, 2005. – 46 с.

9. ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ, ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ И ИНФОРМАЦИОННЫЕ СПРАВОЧНЫЕ СИСТЕМЫ

1. ЭБС «Лань»
2. ЭБС «Консультант студента»
3. ЭБС «Znanium.com»

10. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Материально-техническое обеспечение по реализации дисциплины осуществляется в соответствии с требованиями ФГОС ВО по данной образовательной программе.

11. ДЛЯ ОБУЧАЮЩИХСЯ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ДИСТАНЦИОННЫХ ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ

При использовании электронного обучения и дистанционных образовательных технологий (далее ЭО и ДОТ) занятия полностью или частично проводятся в режиме онлайн. Объем дисциплины и распределение нагрузки по видам работ соответствует п. 4.1. Распределение баллов соответствует п. 6.2 либо может быть изменено в соответствии с решением кафедры, в случае перехода на ЭО и ДОТ в процессе обучения. Решение кафедры об используемых технологиях и системе оценивания достижений обучающихся принимается с учетом мнения ведущего преподавателя и доводится до обучающихся.

Аннотация к рабочей программе дисциплины
«Кристаллохимия»

образовательной программы высшего образования –
программы специалитета

04.05.01 – Фундаментальная и прикладная химия

Направленность:

«Аналитическая химия»

Трудоемкость дисциплины: 3 ЗЕ (108 академических часов)

Семестр: 7 (очная форма обучения)

Форма промежуточной аттестации: экзамен (7 семестр)

Содержание дисциплины

Симметрия и структурные классы кристаллических систем, кристаллическая структура вещества, операции и элементы симметрии, классы и группы симметрии, элементарная ячейка, сингония, Общая и систематическая кристаллохимия, взаимодействия между структурными единицами в кристалле, координационные числа и многогранники, основные типы кристаллических структур, Методы исследования кристаллических структур, рентгеновское излучение, рентгеновская спектроскопия, рентгеновская дифракция.