

Документ подписан простой электронной подписью Информация о владельце: ФИО: Таскаев Сергей Валерьевич Должность: Ректор Дата подписания: 17.06.2025 14:39:52 Уникальный программный ключ: 04c19ed880b981506cb77a486b9a878808522525	МИНОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИИ Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Челябинский государственный университет» (ФГБОУ ВО «ЧелГУ»)	Рабочая программа дисциплины "Кристаллохимия" по направлению подготовки (специальности) 04.05.01 "Фундаментальная и прикладная химия" направленности (профилю) Химия материалов ФГБОУ ВО «ЧелГУ»	стр. 1
--	---	---	--------

Рабочая программа дисциплины (модуля)*

Кристаллохимия

Направление подготовки (специальность)

04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

Направленность (профиль)

Химия материалов

Присваиваемая квалификация (степень)

Химик. Преподаватель химии.

Форма обучения

очная

Год набора 2025

*Рабочая программа дисциплины (модуля) адаптирована для инклюзивного обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья

Челябинск 2025 г.



Содержание

1. Цели освоения дисциплины
2. Место дисциплины в структуре ОПОП
3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины (модуля)
4. Объем дисциплины (модуля)
5. Структура и содержание дисциплины (модуля)
6. Фонд оценочных средств
 - 6.1. Перечень видов оценочных средств
 - 6.2. Типовые контрольные задания и иные материалы для текущей аттестации
 - 6.3. Типовые контрольные вопросы и задания для промежуточной аттестации
 - 6.4. Критерии оценивания
7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины (модуля)
 - 7.1. Рекомендуемая литература
 - 7.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет"
 - 7.3. Перечень информационных технологий
8. Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля)
9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)
10. Специальные условия освоения дисциплины обучающимися с инвалидностью и ограниченными возможностями здоровья



1. ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Целью преподавания дисциплины является формирование у студентов основных представлений о симметрии и строении кристаллических тел.

Задачами изучения дисциплины являются:

- освоение теоретических представлений о структуре кристаллических твердых тел;
- освоение методов описания кристаллических структур;
- получение представления связи строения и свойств кристаллов.

Результаты обучения по дисциплине направлены на достижение индикаторов компетенций:

УК-4.2. Демонстрирует умение применять современные коммуникативные технологии для академического и профессионального взаимодействия в ситуации устной и письменной коммуникации, в том числе на иностранном (ых) языке(ах)

ОПК-3-1. Знает теоретические основы химического и математического моделирования;

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОПОП

Цикл (раздел) ОПОП: К.М.03.06

2.1 Требования к предварительной подготовке обучающегося:

Математика

Общая и неорганическая химия

2.2 Дисциплины и практики, для которых освоение данной дисциплины (модуля) необходимо как предшествующее:

Основы химии твердого тела

Квантовая химия

Физические методы исследования в химии

Строение вещества

3. КОМПЕТЕНЦИИ ОБУЧАЮЩЕГОСЯ, ФОРМИРУЕМЫЕ В РЕЗУЛЬТАТЕ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

УК-4: Способен применять современные коммуникативные технологии, в том числе на иностранном(ых) языке(ах), для академического и профессионального взаимодействия

Знать:

Основные законы и термины кристаллохимии

Уметь:

правильно использовать химическую терминологию в письменной и устной речи

Владеть:

навыками изложения в письменной и устной форме с использованием химической терминологии.

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

Знать:

основные принципы и закономерности кристаллического строения вещества.

Уметь:

правильно применять теоретические модели строения кристаллических твердых тел для описания их свойств.

Владеть:

элементарными навыками расчетов основных параметров кристаллов с использованием современной вычислительной техники.



В результате освоения дисциплины обучающийся должен

3.1 Знать:	
3.1.1	Основные законы и понятия точечной симметрии;
3.1.2	Основные законы и понятия пространственной симметрии;
3.1.3	Основные виды кристаллических структур простых веществ;
3.1.4	Теоретические основы кристаллохимии;
3.1.5	Основные виды молекулярных структур;
3.1.6	Основные понятия рентгенографии;
3.1.7	Источники и методы поиска информации о кристаллах.
3.2 Уметь:	
3.2.1	Использовать и применять законы и понятия дисциплин;
3.2.2	Описывать кристаллические структуры;
3.2.3	Выполнять стандартные действия (классификация кристаллических структур.) с учетом основных понятий и общих закономерностей, решать типовые учебные задачи по кристаллохимии;
3.2.4	Использовать уравнение Вульфа-Брэгга, Уравнения Лауэ.
3.2.5	
3.3 Владеть:	
3.3.1	Обладания методикой описания кристаллических структур;
3.3.2	Основными методами описания структур;
3.3.3	Работы с учебной литературой по основным кристаллохимии;
3.3.4	Обладания методикой индентирования кубических структур

4. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Общая трудоемкость	3 ЗЕТ
Часов по учебному плану : 108 в том числе : аудиторные занятия : 48 самостоятельная работа : 15,6 часов на контроль : 36 контактная работа: 56,4 ИКР: 8,4	Виды контроля в семестрах: экзамены 6

5. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Код занятия	Наименование разделов и тем /вид занятия/	Семестр / Курс	Часов	Литература
	Раздел 1. Точечная симметрия молекул и кристаллов.			
1.1	Введение. Кристаллохимия. Основные цели и задачи. Связь с другими науками. /Лек/	6	7	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.1 Л2.2 Л2.3 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5
1.2	Операции и элементы симметрии. Операции симметрии и их взаимодействие /Лек/	6	3	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5
1.3	Группы симметрии. Элементы теории групп. Точечные группы симметрии. Классификация Шенфлиса и Германа-Могена. /Лек/	6	4	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.2 Л2.3 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5
1.4	Точечная симметрия молекул и кристаллов /Ср/	6	2	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.2 Л2.3 Л2.4 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5



1.5	Операции и элементы симметрии. операции симметрии и их взаимодействие /ИКР/	6	0,3	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5
1.6	Группы симметрии. Элементы теории групп. Точечные группы симметрии. Классификация Шенфлиса и Германа-Могена. /ИКР/	6	0,3	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.2 Л2.3 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5
Раздел 2. Симметрия кристаллической решетки				
2.1	Кристаллическая решетка. Трансляционная симметрия и кристаллическая решетка. Элементарная ячейка. Решетки Бравэ. /Лек/	6	6	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.2 Л2.3 Л2.4 Э1 Э3 Э4 Э5
2.2	Пространственные группы симметрии. Открытые элементы симметрии и их взаимодействие. Пространственные группы. /Лек/	6	4	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.2 Л2.3 Л2.4 Э1 Э3 Э4 Э5
2.3	Симметрия кристаллической решетки /Ср/	6	1	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.2 Л2.3 Л2.4 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5
2.4	Кристаллическая решетка. Трансляционная симметрия и кристаллическая решетка. Элементарная ячейка. Решетки Бравэ. /ИКР/	6	0,3	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.2 Л2.3 Л2.4 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5
2.5	Пространственные группы симметрии. Открытые элементы симметрии и их взаимодействие. Пространственные группы. /ИКР/	6	0,3	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.2 Л2.3 Л2.4 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5
Раздел 3. Кристаллические структуры металлов				
3.1	Кристаллические структуры металлов. Структуры металлов. Плотнейшие шаровые упаковки. /Лек/	6	4	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.2 Л2.3 Л2.4 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5
3.2	Кристаллические структуры металлов /Ср/	6	1	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5
3.3	Кристаллические структуры металлов. Структуры металлов. Плотнейшие шаровые упаковки. /ИКР/	6	0,3	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.2 Л2.3 Л2.4 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5
Раздел 4. Кристаллические структуры неметаллических простых веществ				
4.1	Кристаллические структуры неметаллов. Основные виды неметаллических структур. /Лек/	6	4	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.2 Л2.3 Л2.4 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5
4.2	Кристаллические структуры неметаллических простых веществ /Ср/	6	1	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.2 Л2.3 Л2.4 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5
4.3	Кристаллические структуры неметаллов. Основные виды неметаллических структур. /ИКР/	6	0,3	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.2 Л2.3 Л2.4 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5
Раздел 5. Кристаллические структуры бинарных и тройных соединений				



5.1	Кристаллические структуры бинарных и тройных соединений. Основные виды структур с ионным типом связи. /Лек/	6	4	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.2 Л2.3 Л2.4 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5
5.2	Кристаллические структуры бинарных и тройных соединений /Ср/	6	1,6	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.2 Л2.3 Л2.4 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5
5.3	Кристаллические структуры бинарных и тройных соединений. Основные виды структур с ионным типом связи. /ИКР/	6	0,3	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.2 Л2.3 Л2.4 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5
Раздел 6. Строение кристаллов со смешанным типом связи.				
6.1	Строение кристаллов со смешанным типом связи. Основные виды структур со смешанным типом связи. /Лек/	6	4	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.2 Л2.3 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5
6.2	Строение кристаллов со смешанным типом связи. /Ср/	6	1	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.2 Л2.3 Л2.4 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5
6.3	Строение кристаллов со смешанным типом связи. Основные виды структур со смешанным типом связи. /ИКР/	6	1,9	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.2 Л2.3 Л2.4 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5
Раздел 7. Структура молекулярных кристаллов.				
7.1	Структура молекулярных кристаллов. Основные виды структур с молекулярной решеткой. /Лек/	6	4	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.2 Л2.3 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5
7.2	Структура молекулярных кристаллов. /Ср/	6	2	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.2 Л2.3 Л2.4 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5
7.3	Структура молекулярных кристаллов. Основные виды структур с молекулярной решеткой. /ИКР/	6	2,2	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.2 Л2.3 Л2.4 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5
Раздел 8. Рентгенография кристаллов.				
8.1	Рентгенография кристаллов. Дифракция рентгеновских лучей. Рентгеноструктурный и рентгенофазовый анализ. /Лек/	6	4	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.2 Л2.3 Л2.4 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5
8.2	Рентгенография кристаллов. /Ср/	6	6	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.2 Л2.3 Л2.4 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5
8.3	Рентгенография кристаллов. Дифракция рентгеновских лучей. Рентгеноструктурный и рентгенофазовый анализ. /ИКР/	6	2,2	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.2 Л2.3 Л2.4 Э1 Э2 Э3 Э4 Э5
Раздел 9. Экзамен				
9.1	Экзамен /Экзамен/	6	36	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4Л2.1 Л2.2 Л2.3 Э1 Э2 Э3

6. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ



6.1. Перечень видов оценочных средств

Тест;
Контрольная работа;
Вопросы к экзамену.

6.2. Типовые контрольные задания и иные материалы для текущей аттестации

Тест №1 Вариант 1

1. Изобразить стереографическую проекцию, дать обозначение по Шенфлису и Герману - Могену групп симметрии молекул:

- а) бензола
- б) дихлорметана

2. Семейство неподвижного конуса: особенности, элементы симметрии.

3. Какому симметрическому преобразованию соответствует матрица:

- (1 0 0)
- (0 -1 0)
- (0 0 -1)

4. Для группы симметрии $4/m\bar{3}m$ на стереографической проекции изобразите общую правильную систему точек (общую систему эквивалентных позиций), запишите координаты точек.

5. Зеркально-поворотная ось (обозначение, действие, соотношение с инверсионной осью).

6. Какое минимальное число атомов может входить в молекулу группы симметрии .

Тест №2 Вариант 1

1. Сколько атомов приходится на элементарную ячейку ГЦК:1; 2; 3; 4; 8?

2. К какой сингонии относится пространственная группа симметрии $Fddd$:

- а) моноклинная
- б) триклинная
- в) ромбическая
- г) тетрагональная
- д) кубическая

3. Какая из решеток Бравэ НЕ существует:

- а) кубическая F
- б) кубическая I
- в) кубическая C
- г) ромбическая P
- д) ромбическая C

4. Какой из элементов симметрии отсутствует в пространственной группе симметрии $P2_1$:

- а) инверсионная ось четвертого порядка
- б) поворотная ось второго порядка
- в) плоскость зеркального отражения
- г) плоскость скользящего отражения
- д) все вышеперечисленные элементы отсутствуют

5. В международной системе символом m обозначается как:

- а) плоскость зеркального отражения
- б) плоскость скользящего отражения со сдвигом вдоль оси координат
- в) плоскость скользящего отражения со сдвигом вдоль диагонали
- г) центр инверсии
- д) ось порядка m

6. Какой элемент симметрии появляется в результате взаимодействия двух перпендикулярно пересекающихся осей второго порядка:

- а) Ось 4
- б) Ось 2
- в) Ось 21
- г) Плоскость симметричности
- д) Центр инверсии

7. Тип координационного полиэдра иона Mg^{2+} в MgO (структурный тип $NaCl$):

- а) Тетраэдр
- б) Октаэдр
- в) Куб
- г) Кубооктаэдр кубический
- д) Кубооктаэдр гексагональный



8. Металл кристаллизуется в двух модификациях:

- a) альфа- структурный тип магния;
- b) бетта- структурный тип -железа.

Какая из модификаций имеет наибольшую плотность?

- c) альфа
- d) бетта
- e) плотность обеих модификаций одинаковая
- f) нельзя сказать однозначно
- g) я не знаю, что такое плотность

9. В структуре сфалерита (ZnS) атомы серы образуют ПШУ а атомы цинка занимают тетраэдрические пустоты. Какая доля тетраэдрических пустот занята?

- a) все
- b) $1/8$
- c) $1/6$
- d) $1/4$
- e) $1/2$

10. Изобразите проекцию элементарной ячейки перовскита.

Пример контрольных работ

Вариант 1

1. Молекула ClF_3 по точечной группе симметрии относится к C_{2v} . Представить структурную формулу молекулы и расписать расположение элементов симметрии.
2. В кристаллической структуре состава $AxByC_6$ атомы С образуют плотнейшую шаровую упаковку. Атомы А занимают $2/3$ тетраэдрических пустот, а атомы В – $1/3$ октаэдрических пустот. Найти x и y , а также степень заполнения решетки.
3. В гипотетической молекуле $AxBy$ симметрии D_{3d} атомы А находятся на осях C_2 , атомы В – в общей позиции. Какова формула молекулы, если атомы каждого сорта занимают только одну систему эквивалентных позиций?
4. Параметр кубической ячейки алюмокалиевых квасцов $KAl(SO_4)_2 \cdot xH_2O$ равен 12.13 \AA , $Z=4$. Плотность кристаллов $1,75 \text{ г/см}^3$. Найти количество молекул воды в формуле. Результат округлить.

Вариант 2

1. В гипотетической молекуле $AxBy$ симметрии D_4 атомы А находятся на осях C_2 , атомы В – в общей позиции. Какова формула молекулы, если атомы каждого сорта занимают только одну систему эквивалентных позиций?
2. В кристаллической структуре состава $AxByC_2$ атомы В образуют плотнейшую шаровую упаковку. Атомы А занимают $1/8$ тетраэдрических пустот, а атомы С – $1/4$ октаэдрических пустот. Найти x и y , а также степень заполнения решетки.
3. Найти результат умножения следующих симметрических операций (путем перемножения матриц): 1) $\sigma(Y)$ и i , 2) $C_2(Y)$ и $\sigma(Y)$.
4. Параметры моноклинной ячейки галогенида меди (в Å): $a=6.85$; $b=6.70$; $c=3.30$; $\beta=121.0$; $Z=2$. Плотность кристалла составляет $3,44 \text{ г/см}^3$. Определить формулу галогенида.

6.3. Типовые контрольные вопросы и задания для промежуточной аттестации

Вопросы к экзамену:

1. Точечная симметрия молекул и кристаллов.
 - 1.1 Закрытые операции и элементы симметрии. Взаимодействие операций симметрии.
 - 1.2 Группа операций симметрии, порядок группы, подгруппа.
 - 1.3 Системы Шенфлиса и Германа-Могена, взаимосвязь порядков зеркально-поворотных и инверсионных осей.
 - 1.4 Категории и семейства точечных групп по Шенфлису и Герману-Могену. Точечные группы геометрических фигур и молекул.
 - 1.5 Орбита точечной группы, кратность орбиты и локальная симметрия ее точек.
 - 1.6 Предельные группы бесконечного порядка. Принципы Кюри и Неймана.
2. Симметрия кристаллической решетки
 - 2.1 Трансляционная симметрия и кристаллическая решетка, параметры элементарной ячейки. Кристаллографические и некристаллографические закрытые элементы симметрии.
 - 2.2 Сингонии, голоэдрические группы, кристаллографические классы. Примитивные и центрированные решетки; классы (решетки) Браве. Индексы направлений и плоскостей в решетке.
 - 2.3 Открытые кристаллографические элементы симметрии, их обозначение по Герману-Могену.
 - 2.4 Взаимодействие открытых элементов с закрытыми и между собой.
 - 2.5 Пространственные группы, их символы по Герману-Могену, связь с кристаллографическим классом.



Симморфные и несимморфные группы.

2.6 Системы эквивалентных позиций (орбиты) пространственных групп, кратность общей позиции.

2.7 Графики простейших групп низших и средних сингоний: Интернациональные таблицы и содержащаяся в них информация о пространственных группах.

3. Кристаллические структуры металлов

3.1 Структуры металлов: плотные и плотнейшие шаровые упаковки на плоскости и в пространстве (ПК, ПГ, ОЦК, ГПУ, ГЦК) с примерами металлов;

3.2 Виды и размеры пустот в шаровых упаковках.

3.3 Полиморфные модификации железа многослойные шаровые упаковки (La, Sm).

3.4 Искажения плотнейших упаковок в структурах Zn, Cd, In и Hg.

3.5 Простейшие интерметаллиды: Cu₃Au (фазовый переход "порядок - беспорядок") и Nb₃Sn (атомный мотив "Γ-W").

4. Кристаллические структуры неметаллических простых веществ

4.1 Принципы строения простых веществ - неметаллов: ковалентные и ван-дер-ваальсовы взаимодействия, мотивы расположения атомов в кристалле (островной, цепочечный, трубчатый, слоистый, каркасный).

4.2 Аллотропия, полиморфизм и изоморфизм, политипы в неметаллах.

4.3 Структуры алмаза, лонсдейлита, α- и β-графита, фуллеренов, нанотрубок; Si, Ge, Γ- и ΓSn, кристаллических инертных газов.

4.4 Мотивы из атомов в кристаллах белого, черного и фиолетового фосфора, желтого и серого As, ромбической и моноклинной серы S₈, других модификаций Sn (ромбоэдрической серы), пластической и волокнистой серы, красного и серого Se.

5. Кристаллические структуры бинарных и тройных соединений

5.1 Бинарные соединения, построенные по принципу плотной упаковки анионов с катионами в пустотах. Ионные кристаллохимические радиусы.

5.2 Структурные типы AX CsCl, NaCl, ZnS (сфалерит, вюрцит), NiAs,

5.3 Структурные типы AX₂: флюорит и антифлюорит, рутил, двухслойный CdI₂, CdCl₂ и Cs₂O.

5.4 "Корундовый" мотив из катионов и упаковка анионов в Γ-A₂O₃ и FeCl₃. 5.5 Полиморфные модификации BN, H₂O, SiO₂.

5.6 Принципы построения тройных соединений: CuFeS₂ (халькопирит), (шпинели AB₂O₄), (перовскиты ABO₃).

5.7 Строение CaTiO₃, BaTiO₃, ReO₃, Na_xWO₃;

5.8 Строение нормальных и обращенных шпинелей AB₂O₄; Fe₃O₄.

5.9 Характерные координационные полиэдры (к.ч. 4, 5, 6, 8, 9, 10, 12) и структурные мотивы (островной, цепочечный, ленточный, слоистый, каркасный) в бинарных соединениях.

5.10 Бинарные фазы с полианионами: CaC₂, FeS₂, MgB₂.

6. Строение кристаллов со смешанным типом связи.

6.1 Строение клатратов и кристаллогидратов. Гидратные клетки в HPF₆•6H₂O и клатрате A₂A'•6•(H₂O)₄₆.

6.2 Типы координации анионов и их склонность к агрегации в рядах нитраты – карбонаты – бораты и перхлораты – сульфаты – фосфаты – силикаты. Описание структур KClO₄, K₂PtCl₆, CaCO₃ (кальцит), MIMIII(SO₄)₂•12H₂O (квасцы) по аналогии с простыми структурными типами.

6.3 Строение орто-силикатов и орто-алюминатов: циркон ZrSiO₄, гранаты A₃B₃II₂(SiO₄)₃, Y₃Al₅O₁₂ (YAG). Анионные циклы, цепи, ленты, слои и каркасы из тетраэдрических фрагментов ЭО₄ с общими вершинами. Принципы строения цеолитов.

6.4 Мотивы из кислородных октаэдров с общими ребрами в изополи- и гетерополианионах, структура Кеггина.

7. Структура молекулярных кристаллов.

7.1 Ковалентные и ван-дер-ваальсовы радиусы основных элементов-органогенов: C, H, O, N, F, Cl, Br. Атом-атомные потенциалы и принцип плотной упаковки молекул в органической кристаллохимии, коэффициент упаковки, молекулярное координационное число.

7.2 Влияние водородных связей на структуру и свойства кристаллов.

7.3 Распределение лигандов в координационной сфере металла в комплексных и металлоорганических соединениях.

8. Рентгенография кристаллов.

8.1 Дифракция рентгеновского излучения на кристалле. Формула Вульфа-Брегга. Межплоскостные расстояния и индексы Миллера, понятие об обратной решетке.

8.2 Связь индексов hkl с межплоскостными расстояниями для кристаллов орторомбической, тетрагональной и кубической сингоний.

8.3 Рентгенофазовый анализ.

8.4 Атомный фактор рассеяния. Интегральные интенсивности рефлексов и комплексные структурные амплитуды Fhkl.

Пример экзаменационного билета

1 Что обозначает символ S в символике Шенфлиса?



- 2 Дайте обозначение по Шенфлису и Герману Могену для группы, проекция которой приведена на рисунке.
- 3 Перечислите известные Вам предельные группы (группы Кюри). Дать название и обозначение по любой из систем.
- 4 При пересечении поворотной оси b с перпендикулярной ей плоскостью зеркального отражения появляется:
а) ось симметрии 2, б) шесть осей симметрии 2, в) центр инверсии, г) шесть плоскостей симметрии.
- 5 Винтовая ось: определение, обозначение.
- 6 К каким структурным типам НЕ применяют модель ПШУ.
а) алмаз, б) медь, в) альфа-железо, г) магний д) хлорид натрия
- 7 Какой тип координационного полиэдра у натрия в структуре NaCl.
- 8 Определите тип ячейки Бравэ (сингония, центровка) в пространственной группе $Fmm2$:

6.4. Критерии оценивания

Текущий контроль знаний студента по дисциплине осуществляется с помощью тестов и контрольных работ.

Экзамен проводится в письменном виде. Билет состоит из восьми вопросов, каждый из которых оценивается от нуля до трех баллов

3 балла ставится за полный, краткий и правильный ответ, материал изложен химически грамотным языком. Студент владеет терминологией и номенклатурой, имеет представление об особенностях твердофазных взаимодействий, умеет применять законы химии для объяснения конкретных явлений, умеет сравнивать, сопоставлять и обобщать факты.

2 балла. Ответ полный и правильный, но допущены несущественные ошибки в терминологии.

1 балл. Студент ответил на вопрос, но при этом допущена существенная ошибка или ответ не полный.

0 баллов. Студент ответил на вопрос, но не владеет химической терминологией и номенклатурой, допускает грубые ошибки в истолковании и употреблении химических понятий. Студент не ответил на вопрос, либо ответ полностью неверный.

Итоговая оценка ставится по сумме баллов:

"отлично" - 22-24 балла.

"хорошо" - 19- 21 балл

"удовлетворительно" - 15- 18 баллов

"неудовлетворительно" - менее 15 баллов.

7. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

7.1. Рекомендуемая литература

7.1.1. Основная литература

	Авторы, составители	Заглавие	Издательство, год	Ресурс
Л1.1	Косенко Н. Ф.	Кристаллография и кристаллохимия: учебное пособие (https://e.lanbook.com/book/107401)	Иваново : ИГХТУ, 2017	ЭБС
Л1.2	Пугачев В. М.	Кристаллохимия: учебное пособие (https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=232461)	Кемерово : Кемеровский государственный университет, 2013	ЭБС
Л1.3	Басалаев Ю. М.	Кристаллофизика и кристаллохимия: учебное пособие (https://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=278304)	Кемерово : Кемеровский государственный университет, 2014	ЭБС



	Авторы, составители	Заглавие	Издательство, год	Ресурс
Л1.4	Коваленко Л. Ю., Ковалёв И. Н., Тимушков П. В.	Краткий курс кристаллохимии: учебно-методическое пособие	Челябинск : Издательство Челябинского государственног о университета, 2021	

7.1.2. Дополнительная литература

	Авторы, составители	Заглавие	Издательство, год	Ресурс
Л2.1	Большаков А. Ф., Дмитриенко А. О., Варламов Н. В.	Физико-химические свойства кристаллов: учебное пособие для вузов	Саратов: Изд-во Саратов. ун-та, 1991	
Л2.2	Шаскольская М. П.	Кристаллография: учебник для вузов	Москва : Высшая школа, 1976	
Л2.3	Зоркий П. М., Порай-Кошиц М. А.	Симметрия молекул и кристаллических структур	Москва: Издательство Московского университета, 1986	
Л2.4	Переломова Н. В., Тагиева М. М., Шаскольская М. П.	Задачник по кристаллофизике: учебное пособие для студентов вузов	Москва : Наука, 1972	

7.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет"

Э1	Лань [Электронный ресурс] : электронно-библиотечная система (ЭБС) / издательство Лань. – URL: http://e.lanbook.com/ .
Э2	Юрайт [Электронный ресурс] : электронно-библиотечная система (ЭБС) / издательство Юрайт. – URL: https://biblio-online.ru
Э3	Znanium.com [Электронный ресурс] : электронно-библиотечная система (ЭБС) / Научно-издательский центр ИНФРА-М. – URL: http://znanium.com/ .
Э4	eLIBRARY.RU [Электронный ресурс] : электронная библиотека / Науч. электрон. б-ка. – URL: http://elibrary.ru/defaultx.asp
Э5	Национальная электронная библиотека (НЭБ) [Электронный ресурс] : объединенный электронный каталог фондов российских библиотек : сайт. – URL: http://нэб.рф .

7.3 Перечень информационных технологий

7.3.1 Программное обеспечение

Adobe Reader

LMS Moodle

7.3.2 Профессиональные базы данных и информационно-справочные системы

1. Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU (<https://elibrary.ru/defaultx.asp?>) eLIBRARY.RU : научная электронная библиотека : сайт. – Москва, 2000 – . – URL: <https://elibrary.ru>. – Режим доступа: для зарегистрир. пользователей. – Текст : электронный.
2. Национальная электронная библиотека (НЭБ) (<https://rusneb.ru/>) Национальная электронная библиотека (НЭБ) : объединенный электронный каталог фондов российских библиотек : сайт. – URL: <http://нэб.рф>. – Режим доступа: из читальных залов библиотеки ЧелГУ. – Текст : электронный.
3. Президентская библиотека (<https://www.prlib.ru/>) Президентская библиотека : электронная национальная библиотека : сайт / ФГБУ Президентская библиотéка имени Б. Н. Ельцина. – СанктПетербург, 2009 – . – URL: <https://www.prlib.ru/>. – Текст : электронный.
4. Web of Science (<https://apps.webofknowledge.com>) Web of Science : мультидисциплинарная реферативная база данных / компания Thomson Reuters. – Режим доступа: для зарегистрир. пользователей ЧелГУ. – Текст : электронный.
5. Scopus (<https://www.scopus.com>) Scopus : реферативная база данных / Elsevier BV. – URL: <http://www.scopus.com/>. – Яз. англ. – Режим доступа: для зарегистрир. пользователей ЧелГУ. – Текст : электронный.



6. Электронный каталог научной библиотеки ЧелГУ [Электронный ресурс] : база данных / Челяб. гос. ун-т. – Челябинск, 1992.

8. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Для реализации дисциплины используются учебные аудитории для проведения занятий лекционного типа, занятий семинарского типа, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации, а также помещения для самостоятельной работы.

Учебные аудитории укомплектованы специализированной мебелью и техническими средствами обучения.

Для проведения занятий лекционного типа предлагаются наборы демонстрационного оборудования и учебно-наглядных пособий (демонстрационный набор атомов, таблица Менделеева, таблица растворимости, электрохимический ряд напряжения металлов)

Помещения для самостоятельной работы обучающихся оснащены компьютерной техникой с подключением к сети "Интернет" и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду университета

1. Учебная аудитория для проведения занятий лекционного типа.

Основное оборудование: учебная мебель, доска ученическая обычная, настенная, учебно-наглядные пособия (Периодическая таблица Д.И. Менделеева, Набор моделей кристаллических решеток, Мультимедийная презентация), мультимедийное интерактивное оборудование: мультимедийный проектор EPSON1720, экран с электроприводом Lumen; активная акустическая система Microlab solo-6c, персональный компьютер с подключением в сеть «Интернет»

Программное обеспечение: MS Windows XP Professional SP2 для ВУЗов. Лицензии бессрочные.

Гос. Контракт № 300 от 08.10.2008г.

MS Office 2007. Лицензии бессрочные. Лицензия № 44664774 от 09.04.2008г.

2. Учебные аудитории для проведения занятий семинарского типа, для проведения групповых консультаций, индивидуальных консультаций, для текущего контроля и промежуточной аттестации.

Основное оборудование: учебная мебель, доска ученическая обычная, настенная, мультимедийное интерактивное оборудование: мультимедийный проектор EPSON1720, экран с электроприводом Lumen; активная акустическая система Microlab solo-6c, персональный компьютер с подключением в сеть «Интернет»

Программное обеспечение: MS Windows XP Professional SP2 для ВУЗов. Лицензии бессрочные.

Гос. Контракт № 300 от 08.10.2008г.

MS Office 2007. Лицензии бессрочные. Лицензия № 44664774 от 09.04.2008г.

3. Помещение для самостоятельной работы

3.1 Читальный зал № 1

Основное оборудование: Количество посадочных мест – 50. 5 персональных компьютеров с подключением в сеть «Интернет», неограниченный доступ к ЭБС и БД. Учебная мебель, кондиционер.

Программное обеспечение: Microsoft Windows 10 Pro. (Лицензии бессрочные. Договор № АЭ-223/28/18)

Microsoft Office 2016 Pro (Лицензии бессрочные. До-говор № АЭ-223/28/18)

КонсультантПлюс (Соглашение о сотрудничестве № 31 от 20.05.2003 с региональным информационным центром общероссийской сети распространения правовой информации)

ПО «Антивирус Касперского» (Лицензионный договор № 1013/К-2773 от 11.12.2018г.)

3.2. Информационно-библиографический отдел

Основное оборудование: количество посадочных мест – 24. Учебная мебель, 7 персональных компьютеров с подключением в сеть «Интернет», неограниченный доступ к ЭБС и БД.

Программное обеспечение: Microsoft Windows Professional 7 Russian Academic OPEN No Level (СВТ (ОАО ЦЕНТР) 18.02.10. Номер лицензии 46536280)

Microsoft Windows Professional 7 Russian Academic OPEN No Level (Договор № АЭ-61/10)

Microsoft Office Professional Plus 2010 Russian Academic OPEN 1 License No Level (Договор № АЭ-23/12, номер лицензии 60411804)

КонсультантПлюс (Соглашение о сотрудничестве № 31 от 20.05.2003 с региональным информационным центром общероссийской сети распространения правовой информации)



НЭБ (Договор № 101/НЭБ/2810 от 20.02.2018)

ПО «Антивирус Касперского» (Лицензионный договор № 1013/К-2773 от 11.12.2018г.)

3.3 аудитория для самостоятельной работы

Основное оборудование: специализированная эргономичная мебель для работы за компьютером. Автоматизированные рабочие места на 11 обучающихся, 1 преподавателя. 12 ПК с лицензионным программным обеспечением. Магнитно-маркерная доска. Интерактивная доска SMARTBoard 660 диагональ 64"/162/6см. Проектор INFOCUS IN 36. Акустическая система 2.0 Sven SPS-678.

Программное обеспечение: MS Windows XP Professional SP2 для ВУЗов. Лицензии бессрочные.

Партия № РС545926 от 20.12.2007г.

MS Office 2007. Лицензии бессрочные. Лицензия № 44664774 от 09.04.2008г.

MS Windows 7 Professional. Лицензии бессрочные.

Лицензия № 48382516 от 10.11.2010г.

MS Office 2010. Лицензии бессрочные. Лицензия № 48382516 от 10.11.2010г.

MS Windows 10. Лицензии бессрочные.

Гос. Контракт № АЭ-44/57/18 от 30.10.2018г.

MS Office 2016. Лицензии бессрочные. Гос. Контракт № АЭ-44/57/18 от 30.10.2018г.

9. МЕТОДИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ ДЛЯ ОБУЧАЮЩИХСЯ ПО ОСВОЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

К современному выпускнику общество предъявляет широкий перечень требований, среди которых особое значение имеет наличие у выпускников навыков и умений самостоятельно получать знания из различных источников информации, систематизировать и анализировать полученную информацию. Формирование такого умения происходит в течение всего периода обучения через подготовку к лабораторным, семинарским, практическим занятиям. При этом самостоятельная работа студента играет важную роль в ходе всего учебного процесса. При изучении дисциплины основную долю отводимого на самостоятельную работу времени занимает работа с конспектом лекций, учебниками, учебными пособиями и методическими указаниями. А потому студентам необходимо оптимально использовать время, отведенное на самостоятельную работу.

Целесообразно посвящать до получаса в день изучению конспекта лекции в тот же день после лекции и за день перед лекцией. Теоретический материал изучать в течение недели до 2 часов, а готовиться к практическому занятию по дисциплине до 1.5 часов.

Для лучшего и полного усвоения материала учебной дисциплины рекомендуется использовать методические указания и материалы по учебной дисциплине, тексты лекций, а также электронные ресурсы, имеющиеся в системе ЭБС, доступ к которым обеспечен в читальных залах университета. Теоретический материал курса становится более понятным, если дополнительно студентом изучаются книги, учебники по данной учебной дисциплине. Полезно использовать несколько учебников, рекомендованных преподавателем.

При изучении химических дисциплин настоятельно рекомендуется «не заучивать» материал, а добиться максимального понимания изучаемой темы дисциплины. При изучении теоретического материала необходимо многократно писать на черновике формулы, реакции и графики до полного их запоминания.

В случае применения при обучении дисциплины электронного обучения, дистанционных образовательных технологий общение обучающихся и преподавателя осуществляется в режиме реального времени (онлайн-лекции (вебинары), чаты, видео-конференции и др.) или отложенного времени (система дистанционного обучения Moodle, MS Office365, форумы, электронная почта и др.).

Большую часть времени обучающиеся самостоятельно работают с учебно-методическими материалами. Студенты имеют возможность консультироваться с преподавателем по всем вопросам, возникающим в ходе самостоятельной работы посредством электронной почты, социальных сетей и т.п.

Доступ обучающегося к учебным ресурсам в режиме отложенного времени, самостоятельной работы осуществляется через сеть Интернет в удобном для него месте, времени и темпе.

При обучении лиц с ограниченными возможностями здоровья электронное обучение, дистанционные образовательные технологии предусматривают возможность приема-передачи информации в доступных для них формах.

Реализация дисциплины с применением электронного обучения, дистанционных образовательных технологий (далее – ЭО, ДОТ) осуществляется на основании «Положения о реализации основных и дополнительных образовательных программ с применением электронного обучения и дистанционных образовательных технологий в федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Челябинский государственный университет», «Положения о порядке зачета обучающимися по основным профессиональным образовательным программам высшего образования в ФГБОУ ВО «ЧелГУ» результатов освоения в организациях, осуществляющих



образовательную деятельность, учебных предметов, курсов, дисциплин (модулей), практик, дополнительных образовательных программ» посредством электронной информационно-образовательной среды ФГБОУ ВО «ЧелГУ». В исключительных случаях (форс-мажор и т.п.) при реализации образовательной деятельности с применением ЭО, ДОТ могут применять компоненты, не входящие в перечень электронной информационно-образовательной среды.

10. СПЕЦИАЛЬНЫЕ УСЛОВИЯ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ ОБУЧАЮЩИМИСЯ С ИНВАЛИДНОСТЬЮ И ОГРАНИЧЕННЫМИ ВОЗМОЖНОСТЯМИ ЗДОРОВЬЯ

Освоение дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья осуществляется с использованием специальных технических средств и информационных технологий, предоставляемых Ресурсным учебно-методическим центром по обучению инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья ЧелГУ по запросу обучающегося (мобильные специальные технические средства для лиц с нарушениями зрения и с нарушением слуха, ассистивные информационные технологии).

При необходимости для обучающихся с нарушениями зрения на рабочих местах для проведения практических или лабораторных занятий устанавливается специальное программное обеспечение (программа речевой навигации, речевые синтезаторы, экранные лупы).

В учебные аудитории обеспечивается беспрепятственный доступ для обучающихся с инвалидностью и с ограниченными возможностями здоровья. В каждой аудитории, где обучаются инвалиды и лица с ограниченными возможностями здоровья, предусматривается соответствующее количество мест для обучающихся с учетом нарушений их здоровья.

Для освоения дисциплины инвалидам и лицам с ограниченными возможностями здоровья предоставляется доступ к печатным источникам, имеющимся в научной библиотеке ЧелГУ, с помощью специальных технических средств; доступ с помощью специальных технических и программных средств к электронным источникам, представленным в форме электронного документа в фонде научной библиотеки ЧелГУ или электронно-библиотечных системах.

Учебно-методические материалы для обучающихся из числа инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья предоставляются в формах, адаптированных к ограничениям их здоровья и особенностям восприятия информации.

Для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья освоение дисциплины может быть частично или полностью осуществлено с использованием дистанционных образовательных технологий.

При проведении промежуточной аттестации по дисциплине обучающимся с инвалидностью и с ограниченными возможностями здоровья обеспечивается по их заявлению предоставление в доступной форме в зависимости от их индивидуальных особенностей инструкции о порядке проведения промежуточной аттестации, оценочных средств и возможности ответов на задания (письменно на бумаге, набор ответов на компьютере, письменно шрифтом Брайля, с использованием услуг ассистента, устно).

При проведении процедуры оценивания результатов обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья предусматривается использование предоставленных ЧелГУ или собственных технических средств, необходимых им в связи с их индивидуальными особенностями. При необходимости инвалидам и лицам с ограниченными возможностями здоровья предоставляется дополнительное время для подготовки ответа на задания, процедура оценивания результатов обучения по дисциплине может проводиться в несколько этапов.