

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Пекаревский Борис Владимирович
Должность: Проректор по учебной и методической работе
Дата подписания: 01.11.2023 16:48:03
Уникальный программный ключ:
3b89716a1076b80b2c167df0f27c09d01782ba84



МИНОБРНАУКИ РОССИИ
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Санкт-Петербургский государственный технологический институт
(технический университет)»

УТВЕРЖДАЮ
Проректор по учебной
и методической работе
_____ Б.В.Пекаревский
«_26_» __марта__ 2019 г.

Рабочая программа дисциплины

Направление подготовки

04.03.01 Химия

Направленность программы бакалавриата

Кристаллохимия и кристаллография

Квалификация

Бакалавр

Форма обучения

Очная

Факультет **химия веществ и материалов**

Кафедра **физической химии**

Санкт-Петербург

2019

ЛИСТ СОГЛАСОВАНИЯ

Должность	Подпись	Ученое звание, фамилия, инициалы
Доцент		Е.А.Павлова

Рабочая программа дисциплины «**Кристаллохимия и кристаллография**»
» обсуждена на заседании кафедры физической химии,
протокол от «05» февраля 2019 № 6

Заведующий кафедрой

С.Г.Изотова

Одобрено учебно-методической комиссией факультета химии веществ и материалов,
протокол от «21» марта 2019 № 6

Председатель

С.Г.Изотова

СОГЛАСОВАНО

Руководитель направления подготовки «Химия»		доцент С.Г.Изотова
Директор библиотеки		Т.Н.Старостенко
Начальник методического отдела учебно-методического управления		Т.И.Богданова
Начальник УМУ		С.Н.Денисенко

СОДЕРЖАНИЕ

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы.....	4
2. Место дисциплины в структуре образовательной программы.....	7
3. Объем дисциплины.....	7
4. Содержание дисциплины.....	8
4.1. Разделы дисциплины и виды занятий.....	8
4.2. Занятия лекционного типа.....	8
4.3. Занятия семинарского типа.....	11
4.3.1. Семинары, практические занятия.....	11
4.3.2. Занятия лабораторного типа.....	13
4.4. Самостоятельная работа обучающихся.....	14
4.5. Темы индивидуальных заданий.....	15
5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине.....	16
6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации.....	16
7. Перечень учебных изданий, необходимых для освоения дисциплины.....	17
8. Перечень электронных образовательных ресурсов, необходимых для освоения дисциплины.....	18
9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.....	18
10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине.....	19
10.1. Информационные технологии.....	19
10.2. Программное обеспечение.....	19
10.3. Базы данных и информационные справочные системы.....	19
11. Материально-техническое обеспечение освоения дисциплины в ходе реализации образовательной программы.....	19
12. Особенности освоения дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья.....	20

Приложения: 1. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы.

В результате для освоения образовательной программы бакалавриата обучающийся должен обладать следующими результатами:

Код и наименование компетенции	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Планируемые результаты обучения (дескрипторы)
<p>ПК-1 Способен выполнять стандартные операции по предлагаемым методикам</p>	<p>ПК-1.В.11.1 Использование стандартных методик для определения структуры различных классов химических соединений</p>	<p>Знать: основы методов исследования химических веществ и реакций (ЗН-1); особенности структуры различных классов химических соединений (ЗН-2); основные принципы идентификации кристаллических фаз методом дифрактометрии(ЗН-3). Уметь: использовать стандартные методики для определения структурных особенностей различных классов химических соединений (У-1); работать с программным обеспечением для расчетных и экспериментальных методов определения кристаллохимических характеристик (У-2). Владеть: навыками использования экспериментальных методов структурного и физико-химического исследования для определения особенностей строения и свойств веществ (Н-1).</p>
<p>ПК-2 Владеет базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований</p>	<p>ПК-2.В.11.1 Использование современного аналитического оборудования при проведении научных исследований</p>	<p>Знать: возможности и ограничения современной научной аппаратуры (ЗН-4); принципы идентификации кристаллических фаз методом дифрактометрии (ЗН-5). Уметь: анализировать влияние особенностей строения и выбирать параметры исследования (У-3); самостоятельно проводить исследования структуры соединений методом дифрактометрии (У-4). Владеть: навыками проведения съемки и расшифровки дифрактограмм и определения влияния кристаллохимических характеристик на свойства веществ (Н-2), навыками применения кристаллохимических баз данных для определения структуры (Н-3).</p>

Код и наименование компетенции	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Планируемые результаты обучения (дескрипторы)
<p>ПК-3 Владеет системой фундаментальных химических, физических и математических понятий</p>	<p>ПК-3.В.11.1 Применение фундаментальных понятий кристаллографии, основных принципов и закономерностей строения кристаллических веществ</p>	<p>Знать: основные законы кристаллографии; атомную и морфологическую симметрию, типы кристаллических структур, терминологию и символику кристаллографии и кристаллохимии (ЗН-6). Уметь: определять кристаллографические символы и типы кристаллических структур, описывать распределения атомов элементарной ячейки и элементы симметрии в кристалле (У-5). Владеть: навыками определения структуры кристаллических веществ и аналитическими методами расчета параметров структуры (Н-4).</p>
<p>ПК-4 Способен применять основные естественнонаучные законы и закономерности развития химической науки при анализе полученных результатов</p>	<p>ПК-4.В.11.1 Представляет возможности использования основных принципов и закономерности строения кристаллических веществ для разработки новых материалов и технологий</p>	<p>Знать: взаимосвязь состав-структура-свойства в т.ч. связь между внешней формой и внутренним строением кристалла, кристаллографические символы кристаллических структур, распределения атомов элементарной ячейки и элементы симметрии в кристалле (ЗН-7). Уметь: проводить исследование кристаллического вещества и определять качественный и количественный состав материала и его структурные характеристики (У-6); анализировать и представлять полученные данные (У-7). Владеть: навыками определения симметрии кристалла, построения гномостереографических проекций; определения типа кристаллической решетки, пространственных групп кристаллических веществ (Н-5); методикой расшифровки дифрактограмм и определения структуры вещества (Н-6).</p>

Код и наименование компетенции	Код и наименование индикатора достижения компетенции	Планируемые результаты обучения (дескрипторы)
<p>ПК-5 Способен получать и обрабатывать результаты научных экспериментов с помощью современных компьютерных технологий</p>	<p>ПК-5.В.11.1 Выбор методов обработки и интерпретирования результатов эксперимента; компьютерных банков и баз данных и других источников информации о кристаллическом веществе и методах его исследования</p>	<p>Знать: современные компьютерные средства получения и обработки результатов эксперимента (ЗН-8) источники информации об атомных структурах и дифракционных спектрах ЗН-9).</p> <p>Умеет: выбирать экспериментальные методы исследования строения и свойств (У-8); применять методы обработки и интерпретирования результатов эксперимента (У-9).</p> <p>Владеть: данными компьютерных банков и баз данных и других источников информации о кристаллическом веществе и методах его исследования (Н-8).</p>

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы.

Дисциплина относится к дисциплинам обязательной части (Б1.В.11) и изучается на 3 курсе в 6 семестре.

В методическом плане дисциплина опирается на элементы компетенций, сформированные при изучении дисциплин «Кристаллохимия и кристаллография».. Полученные в процессе изучения дисциплины «Кристаллохимия и кристаллография».. знания, умения и навыки могут быть использованы в научно-исследовательской работе, при выполнении выпускной квалификационной работы и будущей профессиональной деятельности.

3. Объем дисциплины.

Вид учебной работы	Всего, ЗЕ/академ. часов
Общая трудоемкость дисциплины (зачетных единиц/ академических часов)	4/ 144
Контактная работа с преподавателем:	99
занятия лекционного типа	36
занятия семинарского типа, в т.ч.	54
семинары, практические занятия	18
лабораторные работы	36
курсовое проектирование (КР или КП)	-
КСР	9
другие виды контактной работы	-
Самостоятельная работа	18
Форма текущего контроля (Кр, реферат, РГР, эссе)	Тесты, Кр, индивидуальные задания
Форма промежуточной аттестации (КР, КП , зачет, экзамен)	Экзамен/27

4. Содержание дисциплины.

4.1. Разделы дисциплины и виды занятий.

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Занятия лекционного типа, акад. часы	Занятия семинарского типа, акад. часы		Самостоятельная работа,	Формируемые компетенции	Формируемые индикаторы
			Семинары и/или практические занятия	Лабораторные работы			
1.	Кристаллическое вещество.	1				ПК-1	ПК-1.В.11.1
2.	Основы геометрической кристаллографии	21	8	6	6	ПК1, ПК-3	ПК-1.В.11.1 ПК-3.В.11.1
3.	Основы кристаллохимии. Химическая связь и кристаллическая структура.	6	4	8	4	ПК-3, ПК-4, ПК-5	ПК-3.В.11.1 ПК-4.В.11.1
4.	Рентгеновские методы исследования	4	4	18	6	ПК-1, ПК-2, ПК-5	ПК-1.В.11.1 ПК-2.В.11.1 ПК-5.В.11.1
5.	Основные свойства кристаллов	4	2	4	2	ПК-4, ПК-5	ПК-4.В.11.1 ПК-5.В.11.1

4.2. Занятия лекционного типа.

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
1	Основы кристаллографии. Кристаллохимическое вещество.	1	-
2	Кристаллическое вещество Кристаллическое и аморфное вещество. Кристаллическая решетка. Интуитивные представления о связи внутреннего строения кристаллов и внешней формой; Работа Кеплера о снежинках. Гониометрия. Закон Стенона.	1	ЛВ

2	Симметрия конечных фигур . Понятие симметрии. Элементы симметрии простые и сложные. Теоремы сложения элементов симметрии. Общая теорема Эйлера	2	ЛВ
2	Методы отображения симметрии. Стереографическая и гномостереографическая проекции элементов симметрии. Понятие о сингонии, виде симметрии, категории и единичных направлениях. Установка кристаллов в разных сингониях и соответствующие им системы координат.	2	АТД
2	Номенклатура видов симметрии. Символы Германа-Могена (интернациональные символы) и номенклатура Шенфлиса. 32 вида симметрии и их обозначение. Символы граней и символы ребер. Симметричные преобразования.	2	ЗК
2	32 вида симметрии и их обозначение. Вывод 32 точечных групп (классов симметрии). Стереографические проекции точечных групп. Символы граней и символы ребер. Выбор единичной грани. Общие и частные простые формы и их связь с символами граней и направлений.	4	ЛВ
2	Морфология и гонеометрия кристаллов Простые формы и их вывод. Простые формы и виды симметрии. Классификация вида симметрии по простым формам.	4	-
2	Решетка Бравэ и атомная симметрия. Трансляция. Вид трансляции. Плоская сетка. Пространственная решетка. Элементарная ячейка и элементарный параллелепипед. Решетка Бравэ. Основные типы ячеек и элементарных параллелепипедов. Элементы симметрии пространственной решетки. Пространственная группа симметрии. Принцип обозначения пространственной группы	2	АТД
3	Основные типы кристаллических структур. Структурные параметры. Обозначение кристаллических структур. Описание структур: магния, графита, алмаза, меди, α -железа, галита, сфалерита, флюорита и хлорида цезия.	4	Л

4	Рентгеновские методы определения фазового состава и атомной структуры. Рентгеновские методы анализа. Рентгеновское излучение и его свойства. Задачи рентгеновского анализа. Основные понятия: межплоскостное расстояние, дифракция рентгеновских лучей, параметры элементарной ячейки, порядок отражения. Уравнение Вульфа-Брега. Рентгенофазовый анализ, аппаратура и методика съемки дифрактограмм, определение структуры вещества, индцирование дифрактограмм,	4	КОП
5	Основы кристаллохимии и кристаллохимическая классификация веществ. Ионные и атомные радиусы. Координационное число и координационный полиэдр. Плотнейшая упаковка. Элементарные ячейки упаковок различного типа. Типы химической связи в кристаллической структуре. Влияние характера химической связи на тип кристаллической структуры. Описание основных структурных типов кристаллов.	6	Л
5	Зависимость физических свойств кристаллов от симметрии и структурного типа. Морфотропия, полиморфизм, изоморфизм, изоструктурность типы изоморфизма. Основной закон кристаллохимии Гольдшидта. Дефекты в кристаллических структурах (кратко). Размеры атомов и ионов. Основные свойства кристаллов: векторные, скалярные, тензорные в том числе магнитные, прочностные и оптические свойства.	4	Л
	Всего	36	

4.3. Занятия семинарского типа.

4.3.1. Семинары, практические занятия.

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Инновационная форма
2	<p><u>Основы геометрической кристаллографии</u></p> <p>1. Построение стереографических проекций и нахождение углов между гранями. В рамках этого занятия студенты учатся изображать гномостереографические проекции различных кристаллов.</p> <p>2 Нахождение элементов симметрии и их наборов в кристаллических моделях. Определение сингонии, точечной группы и построение стереографической проекции, используя установку кристалла для кристаллов низшей и средней категорий.</p> <p>3. Определение сингонии, точечной группы и построение стереографической проекции, используя установку кристалла для кристаллов низшей и высшей категории. Студенты определяют кристаллографические символы различных граней кристаллов.</p> <p>4. Определение простых форм и их символов в кристаллах средней и высшей категорий. Студенты определяют направление кристаллографических осей и кристаллографические символы граней кристаллов.</p> <p>5.Обозначения элементов симметрии простых форм в различных системах.</p> <p>7.Подготовка к контрольной работе</p> <p>Контрольная работа</p>	<p>2</p> <p>1</p> <p>1</p> <p>1</p> <p>1</p> <p>2</p>	<p>МШ</p> <p>Т</p> <p>МГ</p> <p>МШ</p> <p>МГ</p> <p>-</p>
	итого	8	

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Иновационная форма
3	<u>Основы кристаллохимии. Химическая связь и кристаллическая структура. Свойства кристаллов</u>		
	1. Вычисление ионных радиусов.	1	МШ
	2. Химические связи в кристаллах. Координационное число (КЧ) и координационный многогранник (КМ). Структуры простых веществ неметаллической природы.	1	-
	3. Основные типы кристаллических структур. Студенты описывают структуры меди, магния, α -железа, графита, алмаза, сфалерита, флюорита, галита и хлорида цезия. Тестирование	2	МГ
	итого	4	
4	<u>Рентгеновские методы исследования кристаллов</u>		АР
	1. Рентгенофазовый анализ.	2	
	2. Индицирование рентгенодифрактограмм. Студенты обучаются расчету параметров элементарной ячейки кристаллов	2	
	итого	4	
5	<u>Основные свойства кристаллов</u>	2	МШ
	Определение взаимосвязи строение-свойство		
	итого	2	
ИТОГО		18	

4.3.2. Занятия лабораторного типа.

№ раздела дисциплины	Наименование темы и краткое содержание занятия	Объем, акад. часы	Иновационная форма
2	<u>Кристаллографическая геометрия</u> 1.Определение категории сингонии по моделям 2.Определение символов граней 3.Построение гномостереографических проекций простых форм	2 2 2	МШ
3	<u>Основы кристаллохимии</u> 1.Определение ионных радиусов в кристалле 2.Описание типа кристаллической структуры и свойств кристалла α -железа, графита, алмаза, сфалерита,	2 6	-
4	<u>Рентгеновские методы исследования</u> 1.Знакомство с принципом работы дифрактометра; 2.Приготовление образца и съемка дифрактограмм 3.Определение фазового состава образца. Индицирование кристалла.	4 10 4	Тр
5	<u>Основные свойства кристаллов</u> 1. Определение оптических и электрических свойств кристаллов	4	
ИТОГО		36	

4.4. Самостоятельная работа обучающихся.

№ раздела	Перечень вопросов для самостоятельного изучения	Объем академических часов	Форма контроля
1,2	Кристаллическое состояние вещества. Изучение закона Стенона, учения Кеплера, Закон Гаюи. Подготовка к опросу.	1	Устный опрос
	Графическое изображение элементов симметрии. Изучение изображения элементов симметрии простых и сложных на гномостереографических проекциях. Подготовка к контрольной работе.	1	Тестирование I
	Графическое изображение символов простых граней кристаллов. Изучение закона Стенона, учения Кеплера, Закон Гаюи. Подготовка к опросу. Изучение изображения символов простых граней кристаллов. Символы Германа-Могена и номенклатура Шенфлиса. Обозначение кристаллических многогранников, симметрии кристаллов с помощью различных систем.	1	
	Графическое изображение символов простых граней кристаллов. Изучение изображения символов простых граней кристаллов. Подготовка к контрольной работе.	1	
	Категории. Правила кристаллографической установки кристаллов. Разбиение кристаллов по категориям. Изучение правила установки кристаллов различных кристаллов.	1	Контрольная работа Устные опросы, домашние задания.
	32 вида симметрии. Элементарные ячейки Бравэ. Типы симметрии. Изучение 14 типов ячеек Бравэ. Изображение элементарных ячеек кубической сингонии. Кристаллографические точечные группы. Графическое изображение форм средней категории, форм низшей, форм высшей категорий. Графическое изображение гномостереографических проекций кристаллов низшей и средней и высшей категории. Подготовка к контрольной работе.	1	
3	Описание структур: магния, графита, алмаза, меди, α -железа, галита, сфалерита, флюорита и хлорида цезия. Изучение структурных типов различных кристаллов. Международная классификация по группам структур. Структуры типа АВ. АВ ₂ , АВО ₃ , АВ ₂ О ₄ . Правила Полинга. Подготовка к тестированию.	4	Тестирование II

4	Рентгенофазовый анализ. Индицирование.. Выполнение индивидуального задания. Определение фазового состава образца. Расчет параметров элементарной ячейки, определение категории, пространственной группы, типа элементарной ячейки, кратности кристалла. Оформление и подготовка к защите индивидуального задания	6	ИДЗ
5	Дефекты в кристаллических структурах (кратко). Изучение дефектов в кристаллических структурах. Вакансии по Шоттки, по Френкелю. Виды точечных дефектов. Одномерные, двумерные, трехмерные дефекты. Краевые, винтовые дислокации. Двойникование кристаллов. Подготовка к опросу. Плотнейшая упаковка: ПГУ, ПКУ. Изображение плотнейших упаковок. Тетраэдрические и октаэдрические пустоты. Обозначение симметрии упаковок по Франку, по Жданову.	1	Тестирование Ш
5	Свойства кристаллов (Оптические свойства кристаллов)Изучение векторных, скалярных, тензорных свойств кристаллов. Магнитные, прочностные и др. свойства кристаллов. Морфотропия, полиморфизм, изоморфизм, изоструктурность типы изоморфизма. Изучение оптических свойств кристаллов, индикатрисса, показатель преломления для кристаллов высшей, низшей и средней сингоний. Подготовка к опросу.	1	
	Всего	18	

4.5. Варианты индивидуальных заданий

С помощью рентгенофазового анализа определить качественный и количественный состав образца и кристаллохимические характеристики.

В качестве образцов предлагаются смеси двух веществ кубической сингонии: (KBr+NaCl; LiF+Cu₂O; KCl+Cu; Al+NaCl);

Задание:

- провести съемку дифрактограммы;
- провести рентгенофазовый анализ: присутствующие вещества;
- определить количество фаз;
- установить сингонию фаз;
- категорию, пространственную группу, тип элементарной ячейки, систему правильных точек;
- провести индицирование и рассчитать параметры элементарной ячейки и число формульных единиц

5. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине.

Методические указания для обучающихся по организации самостоятельной работы по дисциплине, включая перечень тем самостоятельной работы, формы текущего контроля по дисциплине и требования к их выполнению размещены в электронной информационно-образовательной среде СПбГТИ(ТУ) на сайте: <http://media.technolog.edu.ru>

6. Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации

Промежуточная аттестация по дисциплине проводится в форме экзамена. К сдаче экзамена допускаются студенты, выполнившие все формы текущего контроля.

Экзамен предусматривают выборочную проверку освоения предусмотренных элементов компетенций и комплектуются вопросами (заданиями) двух видов: теоретический вопрос (для проверки знаний) и комплексная задача (для проверки умений и навыков).

При сдаче экзамена, студент получает три вопроса из перечня вопросов, время подготовки студента к устному ответу - до 45 мин.

Пример варианта вопросов на экзамене:

Вариант № 1

1. Теоремы сложения элементов симметрии.

2. Оптические свойства кристаллов

Задача: Построить гностереографическую проекцию: $3L_44L_3$, обозначить по международной системе и по Шенфлису. Назвать простую форму.

Фонд оценочных средств по дисциплине представлен в Приложении № 1.

Результаты освоения дисциплины считаются достигнутыми, если для всех элементов компетенций достигнут пороговый уровень освоения компетенции на данном этапе – оценка «удовлетворительно».

7. Перечень учебных изданий, необходимых для освоения дисциплины.

а) печатные издания:

1. Арсирий, А.И. Кристаллография и кристаллохимия/ А.И.Арсирий, О.В. Карпинская. – СПбГТИ(ТУ), 2010 – 70 с.
2. Павлова, Е.А. Рентгенофазовый анализ: учебное пособие / Е. А. Павлова, О. В. Карпинская, Л. И. Михайлова ; СПбГТИ(ТУ). Каф. технологии стекла и общ. технологии силикатов. - СПб. : [б. и.], 2011. - 62 с.
3. Фахльман, Б. Д. Химия новых материалов и нанотехнологии / Б. Д. Фахльман; пер. с англ. Д. О. Чаркина, В. В. Уточниковой, под ред. Ю. Д. Третьякова, Е. А. Гудилина. - Долгопрудный : Издат. дом "Интеллект", 2011. - 463 с.
4. Попов, Г. М. Кристаллография / Г. М. Попов, И. И. Шафрановский. - М. : Высшая школа, 1972. - 352 с.
5. Аншелес, О. М. Начала кристаллографии: учебник для вузов / О. М. Аншелес. - Л. : ЛГУ, 1952. - 276 с.
6. Современная кристаллография : в 4 т. / под ред. Б. К. Вайнштейна. - М. : Наука, 1979-1981.
Т. 1 : Симметрия кристаллов. Методы структурной кристаллографии. - 1979. - 384 с.
Т. 2 : Структура кристаллов. - 1979. - 360 с.
Т. 4 : Физические свойства кристаллов. - 1981. - 496 с.
7. Шаскольская, М. П. Кристаллография / М. П. Шаскольская. - 2-е изд. - М. : Высшая школа, 1986. - 391 с.
8. Егоров-Тисменко, Ю. К. Кристаллография и кристаллохимия / Ю. К. Егоров-Тисменко. - М. : Изд-во: Книжный дом «Университет», 2005. - 589 с.
9. Чупрунов, Е. В. Основы кристаллографии / Е. В. Чупрунов, А. Ф. Хохлов, М. А. Фаддеев. - М. : Изд-во Физико-математической литературы, 2004. - 336 с.
10. Задачник по кристаллографии / под ред. Е.В. Чупрунова, А.Ф. Хохлова. - М. Изд-во физико-математической литературы, 2003. - 208 с.

б) электронные учебные издания:

1. Павлова, Е.А. Определение фазового состава кристаллического вещества с помощью рентгенофазового анализа : методические указания к лабораторной работе / Е.А.Павлова, О.В.Проскурина; СПбГТИ(ТУ). Каф. физ. химии. - СПб. : [б. и.], 2014. - 24 с. (ЭБ)

8. Перечень электронных образовательных ресурсов, необходимых для освоения дисциплины.

Учебный план, РПД и учебно-методические материалы: <http://media.technolog.edu.ru>

Электронно-библиотечные системы:

«Электронный читальный зал – БиблиоТех» <https://technolog.bibliotech.ru/>;

«Лань» <https://e.lanbook.com/books/>

Интерактивная база данных книг и журналов SpringerLink.

Журнал Кристаллография. <https://elibrary.ru/>

9. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.

Все виды занятий по дисциплине проводятся в соответствии с требованиями следующих СТП:

СТП СПбГТИ 040-02. КС УКДВ. Виды учебных занятий. Лекция. Общие требования;

СТО СПбГТИ 018-2014. КС УКДВ. Виды учебных занятий. Семинары и практические занятия. Общие требования к организации и проведению.

СТП СПбГТИ 048-2009. КС УКВД. Виды учебных занятий. Самостоятельная планируемая работа студентов. Общие требования к организации и проведению.

СТО СПбГТИ 020-2011. КС УКДВ. Виды учебных занятий. Лабораторные занятия. Общие требования к организации и проведению.

Планирование времени, необходимого на изучение данной дисциплины, лучше всего осуществлять на весь семестр, предусматривая при этом регулярное повторение пройденного материала.

Основными условиями правильной организации учебного процесса для студентов является:

- плановость в организации учебной работы;
- серьезное отношение к изучению материала;
- постоянный самоконтроль.

На занятия студент должен приходиться, имея знания по уже изученному материалу.

10. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине.

10.1. Информационные технологии.

В учебном процессе по данной дисциплине предусмотрено использование информационных технологий:

- чтение лекций с использованием слайд-презентаций;
- взаимодействие с обучающимися посредством ЭИОС.

10.2. Программное обеспечение.

Windows XP Starter Edition. (Государственный контракт № 24 от 14.09.2007, срок действия – бессрочно),

Microsoft Office (Microsoft Excel): Office 2007 Russian OLP NL AE (Государственный контракт № 24 от 14.09.2007, срок действия – бессрочно), Office Std 2013 Rus OLP NL (Контракт № 02(03)15 от 15.01.2015, срок действия -20 лет),

LibreOffice (открытая лицензия).

10.3. Базы данных и информационные справочные системы.

Справочно-поисковая система «Консультант-Плюс»

11. Материально-техническое обеспечение освоения дисциплины в ходе реализации образовательной программы.

Для ведения лекционных и практических занятий используется аудитория, оборудованная средствами оргтехники, на 33 посадочных места, интерактивные доски, модели кристаллов, решеток, модели важнейших структурных типов кристаллов, модели кристаллических многогранников, рентгеновский дифрактометр XRD 7000s, с программным обеспечением.

12. Особенности освоения дисциплины инвалидами и лицами с ограниченными возможностями здоровья.

Для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями учебные процесс осуществляется в соответствии с Положением об организации учебного процесса для обучения инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья СПбГТИ(ТУ), утвержденным ректором 28.08.2014.

**Фонд оценочных средств
для проведения промежуточной аттестации по дисциплине «Кристаллохимия и
кристаллография»**

1. Перечень компетенций и этапов их формирования.

Индекс компетенции	Содержание	Этап формирования
ПК-1	Способен выполнять стандартные операции по предлагаемым методикам.	промежуточный
ПК-2	Владеет базовыми навыками использования современной аппаратуры при проведении научных исследований	промежуточный
ПК-3	Владеет системой фундаментальных химических, физических и математических понятий	промежуточный
ПК-4	Способен применять основные естественнонаучные законы и закономерности развития химической науки при анализе полученных результатов	промежуточный
ПК-5	Способен получать и обрабатывать результаты научных экспериментов с помощью современных компьютерных технологий	промежуточный

2. Показатели и критерии оценивания компетенций на различных этапах их формирования, шкала оценивания

Код и наименование индикатора достижения компетенции	Показатели сформированности (дескрипторы)	Критерий оценивания	Уровни сформированности (описание выраженности дескрипторов)		
			«удовлетворительно» (пороговый)	«хорошо» (средний)	«отлично» (высокий)
ПК-1.В.11.1 использование стандартные методики для определения структуры различных классов химических соединений	Знает основы методов исследования химических веществ и реакций (ЗН-1)	Ответы на вопросы №5-7 к экзамену	Перечисляет основные методы исследования химических веществ и материалов с ошибками	Называет основные методы исследования химических веществ и материалов с помощью наводящих вопросов преподавателя	Правильно характеризует методы исследования химических веществ и материалов и их структуры.
	Знает особенности структуры различных классов химических соединений (ЗН-2)	Ответы на вопросы №1-4,8 к экзамену	Дает определения кристаллического и аморфного вещества, кристаллической решетки и строения кристаллов с ошибкам	Дает определения кристаллического и аморфного вещества, кристаллической решетки, с помощью наводящих вопросов способен установить взаимосвязь структуры и внешней формы кристалла.	Хорошо разбирается в терминологии, основных понятиях кристаллических веществ, может объяснить различие атомной и морфологической структуры.
	Знает основные принципы идентификации кристаллических фаз методом дифрактометрии (ЗН-3)	Ответы на вопросы №6,7, 10 к экзамену	Слабо ориентируется в методах определения структуры. Ошибается в принципах идентификации фаз с помощью дифрактометрического	Поясняет принципы дифрактометрии. Способен идентифицировать кристаллические фазы с ошибками.	Демонстрирует навыки идентификации кристаллических фаз методом дифрактометрии. Хорошо ориентируется в принципах рентгеновских методах

			метода анализа.		исследования структуры веществ.
	Умеет использовать стандартные методики для определения структурных особенностей различных классов химических соединений (У-1);	Ответы на вопросы №6-10 к экзамену	Имеет представление о различных классах соединений, об основных закономерностях в кристаллах. Допускает ошибки в определении типах кристаллической структур.	Владеет методикой подготовки проб для исследования различных классов химических соединений, не до конца понимает возможность использования РФА для определения особенностей строения кристаллов	Самостоятельно проводит подготовку проб и съемку рентгеновских спектров, определяет особенности строения кристаллов. Выявляет особенности кристаллического строения и устанавливает взаимосвязь структура-свойства.
	Умеет работать с программным обеспечением для расчетных и экспериментальных методов определения кристаллохимических характеристик (У-2).	Ответы на вопросы № 5, 10,11,12 к экзамену	Определяет кристаллохимические характеристики соединений с помощью расчетных методов с ошибками	Применяет программное обеспечение для определения структурных особенностей кристаллических веществ. Проводит съемку и расшировку дифрактограмм с ошибками.	Способен самостоятельно получить данные о структуре соединения с помощью РСА; проанализировать строение кристалла на основе его кристаллографических характеристик и определить особенности строения и свойства соединений. Владеет программным обеспечением и знает возможности рентгеновских методов исследования.

	<p>Демонстрирует навыки использования экспериментальных методов структурного и физико-химического исследования для определения особенностей строения и свойств веществ (Н-1);</p>	<p>Ответы на вопросы № 4, 6,9 к экзамену</p>	<p>Плохо ориентируется в определении структурных особенностей строения веществ с помощью физико-химических методов анализа.</p>	<p>Использует методы анализа структуры вещества. Определяет связь между внешней формой и внутренним строением кристалла. Имеет представление об атомных структурах.</p>	<p>Демонстрирует навыки исследования структуры и свойств веществ с помощью физико-химических методов анализа, использует навыки графического представления атомных структур веществ структурные особенности различных классов химических соединений и вытекающие из них физико-химических свойства.</p>
<p>ПК-2.В.11.1 Использование современного аналитического оборудования при проведении научных исследований</p>	<p>Знает возможности и ограничения современной научной аппаратуры (ЗН-4)</p>	<p>Ответы на вопросы № 12,17,18 к экзамену</p>	<p>Имеет представление о принципе работы рентгеновских дифрактометров. Знаком с техникой безопасности при выполнении работ на современной аппаратуре (в т.ч. с ИИИ). Слабо ориентируется в параметрах съемки и использования рентгеновских баз данных.</p>	<p>Изучил правила ТБ при работе с ИИИ, принцип работы рентгеновских дифрактометров, методику проведения съемки и задачи метода.</p>	<p>Освоил и выполняет правила ТБ при работе с ИИИ. Без ошибок демонстрирует навыки выбора параметров исследования для определенного круга задач исследования.</p>
	<p>Знает принципы идентификации кристаллических фаз методом дифрактометрии</p>	<p>Ответы на вопросы № 12,13-16, 19 к экзамену;</p>	<p>Понимает принципы идентификации фаз, но не может самостоятельно</p>	<p>Перечисляет принципы метода рентгеновской дифракции, виды рентгеновских баз</p>	<p>Правильно планирует и использует приборы и аппараты для получения различных структурных</p>

	(ЗН-5)	ИДЗ	определить структурные характеристики вещества.	данных, поясняет использование порошковых и структурных баз данных с ошибками	характеристик веществ. Демонстрирует навыки использования кристаллографических и рентгеновских баз данных для рентгенофазового анализа.
	Умеет анализировать влияние особенностей строения и выбирать параметры исследования (У-3)	Ответы на вопросы № 9-12 к экзамену	Имеет затруднения с выбором параметров исследования и его планирования.	Зная особенности строения выбирает параметры исследования, с помощью наводящих вопросов способен анализировать строение вещества.	Демонстрирует способность анализировать особенности строения вещества и правильно выбирать методы и параметры исследования.
	Умеет самостоятельно проводить исследования структуры соединений методом дифрактометрии (У-4).	Ответы на вопросы № 18-20, 42-46, 49 к экзамену, ИДЗ	Проводит исследования структуры вещества при помощи преподавателя.	По стандартному алгоритму выполняет исследования на приборах и аппаратах и определяет кристаллографические характеристики (с ошибками).	Самостоятельно проводит эксперименты по определению состава пробы методами физико-химического анализа в т.ч. рентгенодифракционным методом.

	<p>Умеет навыками проведения съемки и расшифровки дифрактограмм и определения влияния кристаллохимических характеристик на свойства веществ (Н-2),</p>		<p>Проводит съемку рентгеновских спектров, Показывает слабые навыки использования рентгеновских методов исследования</p>	<p>Правильно выполняет алгоритм подготовки и съемки дифрактограмм методом порошка, определяет кристаллографические характеристики образца (качественный и количественный состав).</p>	<p>Самостоятельно проводит съемку дифрактометрическим методом. Анализирует полученные данные и определяет зависимость структура-свойства.</p>
	<p>Умеет навыками применения кристаллохимических баз данных для определения структуры (Н-3)</p>	<p>Ответы на вопросы № 18-20, 48-50 к экзамену, ИДЗ</p>	<p>Перечисляет виды кристаллографических и рентгеновских базы данных, но не может самостоятельно определить какую базу необходимо применить</p>	<p>Имеет затруднения при сравнении структурных данных образцов, с данными из структурных баз данных.</p>	<p>Хорошо разбирается в использовании порошковых и структурных баз данных, самостоятельно извлекает необходимую информацию и анализирует полученные данные, делает выводы о структуре и ее особенностях.</p>
<p>ПК-3.В.11.1 Применение фундаментальных понятий кристаллографии, основных принципов и закономерностей строения кристаллических веществ</p>	<p>Знает основные законы кристаллографии; атомную и морфологическую симметрию, типы кристаллических структур, терминологию и символику кристаллографии и кристаллохимии (ЗН-6).</p>	<p>Ответы на вопросы №1, 21-32 к экзамену, К/р 1</p>	<p>Знаком с законами и понятиями кристаллографии, элементы симметрии и их обозначение.</p>	<p>Владеет фундаментальными понятиями кристаллографии, терминологию и символику кристаллографии и кристаллохимии с небольшими ошибками.</p>	<p>Хорошо изучил основные принципы и закономерности строения кристаллических веществ, терминологию и символику кристаллографии и кристаллохимии. Без ошибок демонстрирует навыки записи</p>

					кристаллографических формул.
Умеет определять кристаллографические символы и типы кристаллических структур, описывать распределения атомов элементарной ячейки и элементы симметрии в кристалле (У-5).	Ответы на вопросы № 23-32 к экзамену, К/р 2	Перечисляет типы решеток Браве и виды простых форм для кристаллов низшей, средней и высшей групп симметрии, символы граней, не может провести преобразование координат атомов элементами пространственной группы с помощью преподавателя.	Определяет символы граней, тип решетки Браве, простые формы и их комбинаций для кристаллов низшей, средней и высшей групп симметрии, проводит преобразование координат атомов элементами пространственной группы с небольшими ошибками.	Безошибочно определяет символы граней, тип решетки Браве, простые формы и их комбинаций для всех типов сингонии, проводит преобразование координат атомов элементами пространственной структуры.	
Владеет навыками определения структуры кристаллических веществ и аналитическими методами расчета параметров структуры (Н-4).	Ответы на вопросы № 33-37 к экзамену, тестирование 1	С ошибками определяет структуру кристаллического вещества (параметры элементарной ячейки, пространственную группу, координаты атомов и символы граней) используя аналитические методы.	С помощью аналитических методов с небольшими ошибками определяет модификацию вещества, число формульных единиц, символы граней, индентирование кристаллов кубической сингонии, определить параметры элементарной ячейки и другие кристаллографические характеристики.	Уверенно и без ошибок поясняет связь между внешней формой и внутренним строением кристалла, демонстрирует навыки определения простых форм и их комбинаций, навыки вывода символов граней, параметры элементарной ячейки, структурных особенностей различных классов химических соединений и вытекающими из них физико-химических	

<p>ПК-4.В.11.1 Представляет возможности использования основных принципов и закономерности строения кристаллических веществ для разработки новых материалов и технологий</p>	<p>Знает о взаимосвязи состава-структуры-свойств в т.ч. связь между внешней формой и внутренним строением кристалла, кристаллографические символы кристаллических структур, распределения атомов элементарной ячейки и элементы симметрии в кристалле (ЗН-7).</p>	<p>Ответы на вопросы №38-41 к экзамену тестирование 2</p>	<p>С ошибками поясняет связь между внешней формой и внутренним строением кристалла. С ошибками определяет кристаллографические символы, элементы симметрии и пр.</p>	<p>Может описывать габидус кристалла, устанавливать элементы симметрии. С помощью наводящих вопросов способен устанавливать зависимость состав-структура -свойства и на основании полученных прикладными и аналитическими методами из кристаллографических характеристик, определять свойства материалов.</p>	<p>свойств. Демонстрирует способность описать габидус кристалла. Поясняет связь между внешней формой и внутренним строением. Понимает и использует закономерности строения кристаллов для разработки новых материалов и технологий. Применяет знания кристаллографии для решения своих научно-исследовательских задач.</p>
	<p>Умеет проводить исследование кристаллического вещества и определять качественный и количественный состав материала и его структурные характеристики (У-6);</p>	<p>Ответы на вопросы №44-48, к экзамену ИДЗ</p>	<p>Получает дифрактограммы по стандартным методикам и определяет качественный и количественный состав материала и структурные характеристики с помощью преподавателя.</p>	<p>Показывает закономерности строения кристаллов от элементов симметрии. Использует рентгеновские методы анализа для качественного и количественного определения веществ с небольшой помощью преподавателя.</p>	<p>Демонстрирует навыки определения модификации и количества веществ методом РФА. Определять структурные характеристики из полученных спектров. Проводит количественный анализ присутствующих фаз несколькими методиками.</p>
	<p>Умеет анализировать и представлять полученные данные (У-7).</p>	<p>Ответы на вопросы №46-55, к экзамену</p>	<p>Расшифровывает рентгеновские спектры, используя рентгеновские базы</p>	<p>Определяет кристаллографические характеристики с помощью программного</p>	<p>Хорошо разбирается в использовании порошковых и структурных баз данных,</p>

		ИДЗ	данных с ошибками.	обеспечения дифрактометра с небольшими ошибками.	самостоятельно извлекает необходимую информацию. Самостоятельно анализирует полученные данные и делает выводы о кристаллической структуре и ее особенностях.
	Владеет навыками определения симметрии кристалла, построения гномостереографических проекций; определения типа кристаллической решетки, пространственных групп кристаллических веществ (Н-5);	Ответы на вопросы №21-47, к экзамену, к/р 1;2	Называет определения основным понятиям симметрии, выбирает элементы симметрии континуума и дисконтинуума, рассказывает об основах гониометрии, выводит 32 класса симметрии, перечисляет теоремы сложения элементов симметрии. Слабо ориентируется в построении стереографической и гностереографической проекций. Называет типы решетки Браве и индексы Миллера с ошибками.	Демонстрирует навыки построения стереографической и гномостереографической проекции с небольшими ошибками. Дает определения основным понятиям симметрии, выбирает элементы симметрии континуума и дисконтинуума, рассказывает об основах гониометрии, выводит 32 класса симметрии, перечисляет теоремы сложения элементов симметрии, называет индексы Миллера, типа кристаллической решетки, обозначения пространственных групп с помощью наводящих вопросов.	Правильно строит стереографические и гномостереографические проекции, определяет тип кристаллической решетки, проводит индексирование кристаллов различной сингонии, определяет пространственные группы и формы их записи; рассказывает об основах гониометрии, 32 классах симметрии, применяет теоремы сложения элементов симметрии, определяет индексы Миллера, элементы симметрии конечных фигур, определяет общие и частные простые формы. Владеет прикладной кристаллохимией.
	Владеет методикой расшифровки	Ответы на вопросы №46-51 к экзамену	Использует методики рентгеновских	При расшифровке рентгеновских спектров	Владеет прикладной кристаллохимией,

	дифрактограмм и определения структуры вещества (Н-6).	ИДЗ	методов анализа для качественного и количественного определения вещества. С помощью преподавателя определяет параметры элементарной ячейки исследуемого кристаллического вещества и фазы присутствующие в образце.	применяет аналитические методы и методы обработки и интерпретирования результатов эксперимента; компьютерных банков и баз данных и других источников информации о кристаллическом веществе и методах его исследования. Рассчитывает с помощью индцирования размер параметров элементарной ячейки кубической сингонии.	методикой расшифровки дифрактограмм и определения структуры вещества, индцированием рентгеновского спектра, определяет качественный и количественный состав материала параметры элементарной ячейки различной сингонии, используя разнообразные базы данных. Владеет аналитическими методами в т.ч. теорией фазовых переходов и явлением изоморфизма, структурными особенностями различных классов химических соединений для определения структуры.
ПК-5.В.11.1 Выбор методов обработки и интерпретирования результатов эксперимента; компьютерных банков и баз данных и других источников	Знает современные компьютерные средства получения и обработки результатов эксперимента (ЗН-8)	Ответы на вопросы №45-52 к экзамену	Имеет некоторое представление о программном обеспечении для определенного круга задач исследования.	В целом, может осуществлять выбор оборудования, программного обеспечения для исследования и обработки результатов эксперимента	Уверенно работает с информацией в глобальных компьютерных сетях. Способен самостоятельно выбирать программное обеспечения для решения поставленных задач исследования

информации о кристаллическом веществе и методах его исследования	Знает источники информации об атомных структурах и дифракционных спектрах (ЗН-9).	Ответы на вопросы №11, 13, 15,16, 50 к экзамену	Показывает не достаточные знания компьютерных банков и баз данных и других источников информации о кристаллическом веществе и методах его исследования.	В целом знает основные источники информации об атомных структурах, кристаллографические базы данных. С помощью преподавателя может ориентироваться в структурных базах.	Демонстрирует знание современных информационных технологий, баз данных в области кристаллографии и кристаллохимии; расшифровки фазового состава; пакетов прикладных программ для расчета параметров элементарной ячейки и идентификации фаз.
	Умеет: выбирать экспериментальные методы исследования строения и свойств (У-8);	Ответы на вопросы №6,10,11,20, 16,50,51,55 к экзамену	Слабо ориентируется в выборе методов исследования строения и свойств кристаллических веществ.	Может проводить выбор основных экспериментальных методов исследования кристаллохимических характеристик, проводить обработку и интерпретировать свойства кристаллов не самостоятельно.	Способен самостоятельно определять методы исследования кристаллических соединений, анализировать результаты.
	применять методы обработки и интерпретирования результатов эксперимента (У-9).	Ответы на вопросы № 9,16,46,47, 54,55 к экзамену. ИДЗ.	Применяет методы обработки, но не может самостоятельно провести анализ экспериментальных кристаллографических данных	Применяет пакеты прикладных программ для расчета параметров элементарной ячейки и идентификации фаз, представляет графическое представления атомных структур веществ не самостоятельно.	Демонстрирует навыки использования рентгеновских баз данных для рентгенофазового анализа, навыки графического представления атомных структур веществ. Представлять полученные данные в соответствии с

					принятыми правилами и подготавливать их в виде пригодном для печати в научных изданиях.
	Владеть: данными компьютерных банков и баз данных и других источников информации о кристаллическом веществе и методах его исследования (Н-8).	Ответы на вопросы № 9-11,14-16,46,47, 54,55 к экзамену. ИДЗ.	Имеет навыки использования рентгеновских баз данных для рентгенофазового анализа. Сравнивает структурные данные образцов, с данными из структурных баз данных с ошибками.	Поясняет использование порошковых и структурных баз данных, извлекает необходимую информацию; сопоставляет, полученные характеристики с данными баз. С посторонней помощью делает выводы о структуре вещества. Сравнивает структурные данные образцов, с данными из структурных баз данных с помощью наводящих вопросов. Демонстрирует навыки использования, навыки графического представления атомных структур веществ с небольшими ошибками.	Демонстрирует способность применять основы общей, описательной и прикладной кристаллохимии, данные компьютерных банков и баз данных и других источников информации о кристаллическом веществе и методах его исследования. Сопоставляет и делает правильные выводы на основе полученных результатов, имеет навыки использования рентгеновских баз данных для рентгенофазового анализа, количественного анализа, навыки графического представления атомных структур веществ.

Шкала оценивания соответствует СТО СПбГТИ(ТУ):

По дисциплине промежуточная аттестация проводится в форме и экзамена, шкала оценивания – балльная («отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно»).

Вопросы для контроля самостоятельного изучения

по теме: «Основы геометрической кристаллографии»:

- Элементы симметрии простые и сложные; их обозначения.
- Единичные направления. Вид симметрии. Основные типы видов симметрии. Сингония. Категория.
- Обозначение видов симметрии. Обозначение видов симметрии по Шенфлису. Международное обозначение видов симметрии.
- Стереографические проекции элементов симметрии и граней.
- Основные типы простых форм, их гномостереографические проекции.
- Простые формы высшей, средней и низшей категории. Их особенности. Названия простых форм.
- Установка кристаллов низшей, средней и высшей категории.
- Система координат в кристаллографии.

по темам: «Основы кристаллохимии. Химическая связь и кристаллическая структура», «Основные свойства кристаллов»:

- Координационные числа и многогранники;
- Типы плотнейших упаковок. Политипия пустот плотнейших упаковок;
- Основные структурные типы кристаллов.
- Структурные типы ячеек по Браве кубической сингонии;
- Координационные полиэдры, свойственные плотнейшим упаковкам;
- Элементы симметрии пространственной решетки. Трансляция;
- Дефекты кристаллической решетки. Свойства кристаллов;
- Оптические свойства: индикатрисса и показатель преломления кристаллов высшей, средней и низшей категории.
- Хиральность, анизотропия, изоморфизм.

по теме: «Рентгеновские методы исследования»

- Рентгеновские методы исследования кристаллов.
- Аппаратура для исследования фазового состава и атомной структуры кристаллических веществ.
- Метод Лауэ, метод Дебая.
- Кристаллографические и рентгеновские базы данных.
- Индексирование рентгендифрактограмм различных сингоний.
- Методы количественного анализа.

Примерные варианты контрольной работы

Контрольная работа №1:

Задание:

1. По заданной гномостереографической проекции определить:
 - * Категорию
 - * Сингонию
 - * Вид (класс симметрии)

Контрольная работа №1:

Задание:

1. Обозначить кристалл:
 - * по Бравэ;
 - * международной номенклатуре
 - * по Шенфлису;
 - * Обозначить координатные оси.
 - * Нанести грани в соответствии с описанием ее расположения.
 - * Дать название соответствующей простой формы.
 - * Записать символы этих граней тригональной пирамиды .

2. Дать название простых форм кристаллов симметрии:
 - D_{3d} , грань которого имеет кристаллографические символы $(1\ 01\ 1)$
 - D_{2h} , грань которого имеет кристаллографические символы $(1\ 0\ 0)$
 - O_h , грань которого имеет кристаллографические символы $(h\ k\ 0)$

Варианты тестирования

по теме: «Кристаллография»:

Тест I –

вариант 1:

1. Дать название простых форм кристаллов симметрии:
 - $L44L2$, грань которого имеет кристаллографические символы $(1\ 1\ 1)$
 - $D2h$, грань которого имеет кристаллографические символы $(01\ 1)$
 - $6/m\bar{m}$, грань которого имеет кристаллографические символы $(h\ k\ l)$

вариант 2

1. Нарисовать гномостериографическую проекцию D_{2h} . Обозначить во всех системах обозначений (Шенфлиса, Германа-Могена, Бравэ).

по теме: «Структурные типы ячеек и свойства кристаллов»

Тест II –

вариант 1

Определить и обозначить пространственные формулы структур MgO , $(CuO, FeO, NaCl, ZnS)$. Выбрать из представленной проекции элементарной ячейки на плоскость $[001]$ соответствующую заданной.

Тест II -

вариант 2

1. К какому структурному типу относится кристалл KBr ?
 - а) структура меди, б) структура $NaCl$ в) алмазоподобная структура.
2. Радиусы одинаково построенных ионов (положительных и отрицательных):
 - а) возрастают с увеличением атомного номера элемента, б) зависят от температуры плавления кристалла,
 - в) уменьшаются, чем больше координационное число.
3. Напишите примеры 3-х соединений с кристаллохимической формулой AB_2 .
4. Назовите условия перехода системы из одного состояния в другое. Энтропия, условие перехода.
5. Приведите примеры кристаллических структур, в которых атом кислорода имеет координационное число 1,2,4,6.
6. Что необходимо определить при индексировании дифрактограмм:
 - а) параметры элементарной ячейки, б) тип структуры, в) ионный радиус, г) пространственную группу.

Тест III

Из предложенных вариантов выберете правильный:

1. Точечную группу симметрии образует:

- а) совокупность операций макросимметрии,
- б) совокупность операций I рода
- в) совокупность операций
- г) микросимметрии

2. *Группа $3m$ по названию общей простой формы именуется (подчеркнуть):*

- а) дидодекаэдрической
- б) пинакоидальной
- в) скаленоэдрической
- г) трапецоэдрической.

3. *Примитивная ячейка Бравэ обозначается:*

- а) P б) I в) F г) A

4. *Количество точечных групп без единичных направлений:*

- а) 32 б) 5 в) 27 г) 230

5. *Структура алмаза описывается пространственной группой?*

- а) $Fd3m$ б) $P63mC$ в) $P21/m$ г) $I41/a$ д) $P63/mmc$

6. *Расчет параметров элементарной ячейки зависит:*

- а) от категории б) вида сингонии в) числа формульных единиц.

Типовые контрольные задания для проведения промежуточной аттестации

- 1) Понятие “кристалл”. Основные свойства кристаллов. основные кристаллографические законы. Закон Стенона. В чем отличие этого закона от закона Роме-де-Лилеля? (ПК-1.1).
- 2) Определение и примеры аморфного и кристаллического вещества. Кристаллическая структура и элементарная ячейка (ПК-1.1).
- 3) Кристаллографические характеристики. (ПК-1.1).
- 4) Взаимосвязь структуры и внешней формы кристалла. Структурные особенности различных классов химических веществ (ПК-1.1, ПК-1.3).
- 5) Методики определения кристаллической структуры (ПК-1.1).
- 6) Определение кристаллического вещества методом РФА (ПК-1.2).
- 7) Сравнение структурных характеристик веществ (ПК-1.1).
- 8) Особенности подготовки образцов для определения кристалличности различных классов химических веществ (ПК-1.2).
- 9) Определение свойств различных классов соединений в зависимости от структуры кристалла (ПК-1.2).
- 10) Методика определения модификации вещества методом РФА (ПК-1.3).
- 11) Применение программного обеспечения для идентификации структуры соединения (ПК-1.3).
- 12) Кристаллографические характеристики. Параметры съемки рентгеновских спектров (ПК-2.1).
- 13) Какие рентгеновские базы данных известны? Порошковая база данных ICDD, ее особенности (ПК-2.1).
- 14) Структурная база данных ISCD, ее особенности (ПК-2.1).
- 15) Поиск и выбор данных из структурной базы данных ICDD для исследуемого вещества (ПК-2.1).
- 16) Кристаллографические базы данных (ПК-2.2).
- 17) Правила безопасности при работе с ИИИ (ПК-2.2).
- 18) Симметрия. Элементы симметрии простые и сложные; их обозначения. Оси инверсии, зеркально-поворотные оси (ПК-3.1).
- 19) Единичные направления. Вид симметрии. Основные типы видов симметрии. Сингония. Категория (ПК-3.1).
- 20) Обозначение видов симметрии. Обозначение видов симметрии по Шенфлису. Международное обозначение видов симметрии (ПК-3.1).
- 21) Стереографические проекции элементов симметрии и граней (ПК-3.1).
- 22) Простые формы и их комбинации. Их гномостереографические проекции. (ПК-3.1).
- 23) Простые формы вида симметрии T_d с символами $(hk0)$, (110) , (hkl) (ПК-3.2)..
- 24) Закон Гаюи (закон целых чисел). Символы граней. Установка кристаллов низшей категории, Единичная грань, ее символ. Название простой формы вида симметрии $(2/m)$ с символами (101) (ПК-3.1).
- 25) Установка кристаллов кубической сингонии. Названия простых форм вида

- симметрии (O) с символами (110); (hkl) (ПК-3.1).
- 26) Закон Гаюи (закон целых чисел). Символы граней. Установка кристаллов низшей категории, Единичная грань, ее символ. Название простой формы вида симметрии (2/m) с символами (101) (ПК-3.1).
 - 27) Система координат в кристаллографии. Сущность символов (100); (110); (111); (hk0); (hkl) (ПК-3.1).
 - 28) Принцип определения названия простой формы в кубической сингонии. Простые формы кубической сингонии с символом (hkl). Выбор единичных направлений (ПК-3.1).
 - 29) Обозначение элементов симметрии по международной системе и по Шенфлису кристаллов высшей сингонии. (ПК-3.1).
 - 30) Координационные числа и многогранники (ПК-3.2).
 - 31) Типы плотнейших упаковок. Политипия пустот плотнейших упаковок.
 - 32) Структура NaCl, Cu, Mg, CsCl, графита, алмаза (ПК-3.2).
 - 33) Элементы симметрии пространственной решетки. Трансляция. Плоскости скользящего отражения. Винтовые оси симметрии (ПК-3.2).
 - 34) Правильная система точек. Правило Гольдшмидта (ПК-3.2).
 - 35) Структурные типы ячеек по Браве кубической и гексагональной сингонии (ПК-4.1).
 - 36) Сложение элементов симметрии. Примеры на гномостереографических проекциях (ПК-4.1).
 - 37) 32 класса симметрии (ПК-4.1).
 - 38) Индексы Миллера (ПК-4.1).
 - 39) Аппаратура для рентгеновских исследований (ПК-4.2; ПК-2.2)).
 - 40) Свойства рентгеновских лучей (ПК-4.2).
 - 41) Методы рентгенофазового анализа. Определение вещества (ПК-4.2).
 - 42) Уравнение Вульфа-Брегга (ПК-4.2).
 - 43) Расшифровка дифрактограммы. Качественный и количественный РФА (ПК-4.2).
 - 44) Индицирование кристаллов кубической и гексагональной сингонии (ПК-4.2) .
 - 45) Базы данных и картотека для расшифровки дифрактограмм (ПК-5.1, ПК-2.2) .
 - 46) Получение информации из базы данных PDF-2 о структуре вещества (ПК-5.1) .
 - 47) Выбор программного обеспечения в зависимости от целей исследования (ПК-5.1, ПК-2.2) .
 - 48) Индицирование дифрактограмм (ПК-5.1) .
 - 49) Дефекты кристаллической решетки (ПК-5.1) .
 - 50) Оптические и магнитные свойства кристаллов (ПК-5.1, ПК-4.2) .
 - 51) Взаимосвязь состав-структура-свойства. Примеры (ПК-5.1) .
 - 52) Сопоставление и критическая интерпретация структурной информации, полученной из базы данных, с информацией о веществе, из рентгеновских данных (ПК-5.1) .

К экзамену допускаются студенты, выполнившие все формы текущего контроля. При сдаче экзамена, студент получает два вопроса из перечня, приведенного выше и задачу.

Время подготовки студента к устному ответу на вопросы - до 40 мин.

11. Методические материалы для определения процедур оценивания знаний, умений и навыков, характеризующих этапы формирования компетенций.

Промежуточная аттестация по дисциплине проводится в соответствии с требованиями СПб ГТИ(ТУ) 016-2015. КС УКВД Порядок проведения зачетов и экзаменов.