

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

**федеральное государственное автономное
образовательное учреждение высшего образования
«Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им.
Н.И. Лобачевского»**

Физический

(факультет / институт / филиал)

УТВЕРЖДАЮ:

И.о. декана
физического факультета _____

Малышев А.И.

« 30 » августа 2017г.

Рабочая программа дисциплины (модуля)

Физическая кристаллохимия

(наименование дисциплины (модуля))

Уровень высшего образования

бакалавриат

(бакалавриат / магистратура / специалитет)

Направление подготовки / специальность

03.03.02 «Физика»

(указывается код и наименование направления подготовки / специальности)

Направленность образовательной программы

Физика конденсированного состояния

(указывается профиль / магистерская программа / специализация)

Квалификация (степень)

бакалавр

(бакалавр / магистр / специалист)

Форма обучения

очно-заочная

(очная / очно-заочная / заочная)

Нижегород

2017

год набора 2014

1. Место дисциплины «Физическая кристаллохимия» в структуре ООП

Дисциплина «Физическая кристаллохимия» относится к дисциплинам по выбору вариативной части профессионального цикла основной образовательной программы по направлению 03.03.02 «Физика».

Для усвоения данного курса необходимо освоить некоторые модули (дисциплины) в рамках образовательной программы бакалавра по направлению Физика: общая физика, химия, кристаллография.

Данный курс предоставляет возможность профессионального овладения современными проблемами, методами исследования, комплексной обработки и интерпретации экспериментального и теоретического материала в области рентгеноструктурного анализа, физики анизотропных сред, физики твердого тела.

Цели освоения дисциплины «Физическая кристаллохимия»

Целью курса является получение студентами знаний об атомном строении кристаллов, являющегося фундаментом для всестороннего изучения физических свойств кристаллических веществ.

Курс «Физическая кристаллохимия» включает в себя изучение истории развития кристаллохимии, получение современных представлений о свойствах атомов и основных факторах, определяющих структуру кристалла; связь структуры с физико-химическими свойствами кристаллов; изучение важнейших кристаллохимических явлений (полиморфизм, изоморфизм, морфотропия).

2. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников)

Формируемые компетенции (код компетенции, уровень освоения – при наличии в карте компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), характеризующие этапы формирования компетенций
(ПК-1) способность использовать специализированные знания в области физики для освоения профильных физических дисциплин	З1 (ПК-1) <i>Знать</i> фундаментальные понятия кристаллохимии, зависимости между составом, строением и свойствами кристаллов. У1 (ПК-1) <i>Уметь</i> объяснить связь физических свойств кристаллов с их структурой, самостоятельно изучать кристаллохимические особенности твердых тел. В1 (ПК-1) <i>Владеть</i> навыками теоретического исследования физических и химических свойств кристаллических твердых тел.
(ПК-4) способность применять на практике профессиональные знания и умения, полученные при освоении профильных физических дисциплин	З1 (ПК-4) <i>Знать</i> теоретические модели, используемые в физической кристаллохимии для описания пространственного строения кристаллов, для выявления зависимостей между их составом, строением и свойствами, основные компьютерные базы кристалло-структурных данных. У1 (ПК-4) <i>Уметь</i> осуществлять поиск и использовать кристаллоструктурную информацию для определения основных особенностей строения кристаллических веществ, объяснить связь физических свойств кристаллов с их структурой. В1 (ПК-4) <i>Владеть</i> терминологией физической кристаллохимии, структурной систематикой неорганических кристаллов, стандартными методами описания кристаллических структур, приемами кристаллохимического прогноза, навыками теоретического исследования физических и

	химических свойств кристаллических твердых тел.
--	---

3. Структура и содержание дисциплины «Физическая кристаллохимия»

Объем дисциплины составляет 7 зачетных единиц, всего 252 часа, из которых 50 часов составляет контактная работа обучающегося с преподавателем (16 часов занятия лекционного типа, 32 часа занятия лабораторного типа, в том числе 2 часа - мероприятия текущего контроля успеваемости, 2 часа - мероприятия промежуточной аттестации), 202 часа составляет самостоятельная работа обучающегося.

Содержание дисциплины «Физическая кристаллохимия»

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины (модуля), форма промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)	Всего (часы)	В том числе				Самостоятельная работа обучающегося, часы
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы из них				
		Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа	Занятия лабораторного типа	Всего	
	Очно-заочное	Очно-заочное	Очно-заочное	Очно-заочное	Очно-заочное	Очно-заочное
1. История науки (конец XVIII - начало XX вв.). Основные задачи кристаллохимии, ее роль в решении физических проблем.	12	1		2	3	9
2. Свойства атомов, важные для кристаллохимии. Строение электронных оболочек. Орбитальные радиусы атомов и ионов. Потенциалы ионизации и сродство к электрону. Поляризуемость атомов, ионов.	12	1		2	3	9
3. Химическая связь в кристаллах. Основные типы химической связи: ионная, ковалентная, металлическая, ван-дер-ваальсова, водородная.	12	1		2	3	9
4. Конкретные кристаллические структуры. Основные термины кристаллохимии. Элементарная ячейка (ячейка Бравэ). Число формульных единиц. Молекулярные и координационные соединения. Координационное число и координационный многогранник. Принципы теории плотнейшей упаковки. Интерпретация простейших структур металлов, благородных газов и ионных кристаллов в терминах плотнейших упаковок. Изображение структурных типов с помощью полиэдров. Основные структурные типы.	24	1		4	5	19
5. Размеры атомов в кристаллах. Атомные радиусы. Ван-дер-ваальсовы радиусы. Ионные радиусы. Геометрические пределы устойчивости ионных структур. Зависимость ионных радиусов от заряда, координационного числа.	28	2		4	6	22

6. Химический состав и структура кристалла. Основные категории кристаллохимии - морфотропия, полиморфизм и изоморфизм. Закономерности морфотропии и их кристаллохимическая природа. Полиморфизм. Полиморфизм как общее свойство кристаллических веществ. История открытия полиморфизма как явления. Классификация полиморфизма. Полиморфные переходы первого и второго рода. Структурные аспекты явления полиморфизма.	24	2		4	6	18
7. Политипия. Отличие политипии от полиморфизма. Способы описания политипных структур. Изоморфизм. Изоморфизм и изоструктурность. Изодиморфизм. Классификация изоморфизма, его соотношение с твердыми растворами. Классические правила изоморфизма Гольдшмидта-Ферсмана. Изоморфизм как функция температуры и давления. Ряды Вернадского. Распад изоморфных смесей при понижении температуры и повышении давления. Изоморфизм в процессах кристаллизации. Правила "допуска" и "захвата" Гольдшмидта.	24	2		4	6	18
8. Связь физико-химических свойств кристаллов с их атомной структурой. Оптические свойства. Магнетизм. Электрические свойства. Механические свойства (твердость и ковкость). Спайность и отдельность. Зависимость физико-химических свойств кристаллов от характера химической связи и энергии взаимодействия атомов. Термическая устойчивость (температуры плавления или разложения). Механическая устойчивость, упругие свойства, сжимаемость. Растворимость.	24	2		4	6	18
9. Кристаллохимия органических соединений. Коллоквиум.	13	2		2	4	9
10. Кристаллохимия боратов, силикатов.	23	2		4	6	17
В т.ч. текущий контроль	2			2	2	
Промежуточная аттестация - Экзамен						

4. Образовательные технологии

Занятия по дисциплине проходят в лекционной форме, далее излагаемый на лекциях теоретический материал закрепляется в ходе практических занятий. Студенты работают как индивидуально, так и коллективно.

Самостоятельная работа включает в себя выполнение домашних заданий и теоретическую подготовку к занятиям и коллоквиуму по материалам лекций и рекомендованной литературе, приведенной в конце данной программы.

Формой итогового контроля знаний студентов по дисциплине является экзамен, в ходе которого оценивается уровень теоретических знаний и навыки решения практических задач.

5. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов.

Самостоятельная работа студента – неотъемлемая часть подготовки высококвалифицированного специалиста в соответствующей области. Её цель сформировать у студентов способности и навыки к непрерывному самообразованию и профессиональному совершенствованию.

Самостоятельная работа студентов предусматривает выполнение домашних заданий, изучение материала лекций, прочтение рекомендованной литературы, подготовку к коллоквиуму.

Проработка лекционного материала осуществляется еженедельно после проведения аудиторных занятий в рамках часов, отведённых студентам на самостоятельную работу. Кроме того, работа с лекционным и дополнительным материалом проводится в период сессии при подготовке к экзамену по дисциплине.

6. Фонд оценочных средств для промежуточной аттестации по дисциплине (в приложении)

6.1. Перечень компетенций выпускников образовательной программы, в формировании которых участвует дисциплина «Кристаллография».

Формируемые компетенции (код компетенции, уровень освоения – при наличии в карте компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), характеризующие этапы формирования компетенций
(ПК-1) способность использовать специализированные знания в области физики для освоения профильных физических дисциплин	З1 (ПК-1) <i>Знать</i> фундаментальные понятия кристаллохимии, зависимости между составом, строением и свойствами кристаллов. У1 (ПК-1) <i>Уметь</i> объяснить связь физических свойств кристаллов с их структурой, самостоятельно изучать кристаллохимические особенности твердых тел. В1 (ПК-1) <i>Владеть</i> навыками теоретического исследования физических и химических свойств кристаллических твердых тел.
(ПК-4) способность применять на практике профессиональные знания и умения, полученные при освоении профильных физических дисциплин	З1 (ПК-4) <i>Знать</i> теоретические модели, используемые в физической кристаллохимии для описания пространственного строения кристаллов, для выявления зависимостей между их составом, строением и свойствами, основные компьютерные базы кристалло-структурных данных. У1 (ПК-4) <i>Уметь</i> осуществлять поиск и использовать кристаллоструктурную информацию для определения основных особенностей строения кристаллических веществ, объяснить связь физических свойств кристаллов с их структурой. В1 (ПК-4) <i>Владеть</i> терминологией физической кристаллохимии, структурной систематикой неорганических кристаллов, стандартными методами описания кристаллических структур, приемами кристаллохимического прогноза, навыками теоретического исследования физических и химических свойств кристаллических твердых тел.

Описание показателей и критериев оценивания компетенций на различных этапах их формирования, карты компетенций, в формировании которых участвует дисциплина, приводятся в Приложении.

6.2. Описание шкал оценивания.

Аттестация проводится в форме экзамена. Форма проведения – индивидуальное собеседование.

Экзаменационная оценка выставляется по семибальной шкале. Экзаменационные оценки «превосходно» и «отлично» – соответствуют оценке 5 (отлично) по пятибальной шкале, оценки «очень хорошо» и «хорошо» – соответствуют оценке 4 (хорошо), оценка «удовлетворительно» – соответствует оценке 3 (удовлетворительно), оценки «неудовлетворительно» и «плохо» – соответствуют оценке 2 (неудовлетворительно).

6.3. Критерии оценивания результатов обучения для проведения аттестации обучающихся по дисциплине.

Для оценки результатов обучения, характеризующих сформированность компетенций, используются билеты, состоящие из 2-х вопросов, составленных на основе контрольных вопросов и задачи.

превосходно	Отличная подготовка. Студент полностью выполнил практические задания, отвечает полностью на вопросы билета и дополнительные вопросы (задания), выходящие за рамки изученного объема курса и изученных алгоритмов и подходов, проявляя инициативу и творческое мышление.
отлично	Отличная подготовка. Студент полностью выполнил практические задания, отвечает полностью на вопросы билета, самостоятельно решает задачу в рамках изученных алгоритмов и подходов. При ответе на дополнительные вопросы (задания) допускаются незначительные неточности.
очень хорошо	Хорошая подготовка. Студент полностью выполнил практические задания, однако имеются отдельные замечания по представлению и интерпретации полученных результатов. Студент показывает хороший уровень знания вопросов билета, самостоятельно решает задачу и отвечает на вопросы (задания) преподавателя с небольшими неточностями.
хорошо	Хорошая подготовка. Студент полностью выполнил практический задания, однако имеются замечания по представлению и интерпретации полученных результатов. Студент показывает средний уровень знания вопросов билета, решает задачу с наводящими вопросами преподавателя и отвечает на некоторые дополнительные вопросы преподавателя (в рамках билета).
удовлетворительно	Удовлетворительная подготовка. Студент выполнил не менее 2/3 практических заданий, имеются замечания по представлению и интерпретации полученных результатов. Студент показывает удовлетворительное знание вопросов билета и знание базовых понятий, может решить типовую задачу с помощью преподавателя.
неудовлетворительно	Студент выполнил менее 1/3 практических заданий, показывает неудовлетворительное знание основ курса и базовых понятий. Необходима дополнительная подготовка для успешного прохождения испытания.
плохо	Студент не выполнил практические задания. Подготовка совершенно недостаточна. Последующая пересдача возможна только с комиссией.

6.4. Типовые вопросы к экзамену по дисциплине «Физическая кристаллохимия»

Вопрос	Код компетенции
Основные понятия кристаллохимии. Кристаллохимические закономерности в периодической системе элементов Менделеева.	ПК-1, ПК-4
Ионная связь в кристаллах. Энергия решетки ионных кристаллов. Физические свойства ионных кристаллов.	ПК-1, ПК-4
Ковалентная связь в кристаллах. Энергия ковалентной связи. Физические свойства кристаллов с ковалентной связью.	ПК-1, ПК-4

Металлическая связь в кристаллах. Энергия металлической связи. Физические свойства кристаллов с ковалентной связью.	ПК-1, ПК-4
Ван-дер-Ваальсова связь. Энергия Ван-дер-Ваальсовых сил. Физические свойства кристаллов с Ван-дер-Ваальсовой связью.	ПК-1, ПК-4
Двухслойная плотнейшая упаковка. Симметрия. Пустоты в плотнейшей упаковке. Коэффициент упаковки.	ПК-1, ПК-4
Трехслойная плотнейшая упаковка. Симметрия. Пустоты в плотнейшей упаковке. Коэффициент упаковки.	ПК-1, ПК-4
Многослойные шаровые упаковки. Симметрия. Правила, определяющие добавочные элементы симметрии.	ПК-1, ПК-4
Структурный тип. Классификация структурных типов. Простейшие структуры соединений типа AX, AX ₂ , A ₂ X.	ПК-1, ПК-4
Явление изоморфизма. Условия, необходимые для проявления изоморфизма. Примеры изоморфных структур.	ПК-1, ПК-4
Морфотропия и полиморфизм. Структурная классификация типов полиморфизма.	ПК-1, ПК-4
Полиптипизм. Способы описания и примеры полиптипных кристаллических структур.	ПК-1, ПК-4
Кристаллохимия органических соединений. Классификация структур. Сущность теории плотной упаковки молекул.	ПК-1, ПК-4
Структурная характеристика твердых растворов и интерметаллических соединений.	ПК-1, ПК-4
Кристаллохимия силикатов и боратов. Зависимость свойств силикатов от структуры.	ПК-1, ПК-4

7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины «Физическая кристаллохимия»

Основная литература:

1. Чупрунов Е. В., Хохлов А. Ф., Фадеев М. А. - Основы кристаллографии: учеб. для вузов. - М.: Физматлит, 2004. - 500 с. <http://www.lib.unn.ru/php/details.php?DocId=59410&DB=1>
2. Бокий Г.Б. Кристаллохимия. М.: Наука, 1971, 400 с. <http://www.lib.unn.ru/php/details.php?DocId=405382>
3. Т. Пенкаля. Очерки кристаллохимии, Л., Химия, 1974 <http://www.lib.unn.ru/php/details.php?DocId=99742>
4. П.М. Зоркий. Симметрия молекул и кристаллических структур, МГУ, 1986 <http://www.lib.unn.ru/php/details.php?DocId=102110>
5. Задачи по кристаллографии: учеб. пособие для вузов по физ. и хим. специальностям/Головачев В. П., Сафьянов Ю. Н., Чупрунов Е. В., Фадеев М. А., Хохлов А. Ф. - М.: Физматлит, 2003. - 208 с. <http://www.lib.unn.ru/php/details.php?DocId=59115&DB=1>
6. Бокий Г.Б. Введение в кристаллохимию. М., 1952 <http://www.lib.unn.ru/php/details.php?DocId=99772>

Дополнительная литература:

1. Загальская Ю.Г., Литвинская Г.П. Геометрическая микрокристаллография. М.: Изд. МГУ, 1976, 241 с. <http://www.lib.unn.ru/php/details.php?DocId=102107&DB=1>
2. Китайгородский А.И. Молекулярные кристаллы. М.: Наука, 1971, 424 с. <http://www.lib.unn.ru/php/details.php?DocId=100072>
3. Вайнштейн Б.К., Фридкин В.М., Инденбом В.Л. Современная кристаллография. Т 2. М.: Наука, 1979, 355 с. <http://www.lib.unn.ru/php/details.php?DocId=100137>

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины « Физическая кристаллохимия»

Для проведения лекций требуется типовое оборудование лекционной аудитории (ауд.226). Для выполнения самостоятельной работы студенты имеют возможность работать в компьютерных классах с соответствующим лицензионным программным обеспечением и выходом в Интернет.

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО по направлению 03.03.02 – «Физика».

Автор (ы)	_____	к.ф.-м.н. доцент Каткова М.Р.
Рецензент (ы) Зав. Кафедрой КЭФ	_____	д.ф.-м.н. профессор Чупрунов Е.В.
Программа одобрена на заседании методической комиссии физического факультета от « <u>30</u> » августа 2017 г., протокол № <u>б/н</u>		
Председатель учебно-методической комиссии физического факультета ННГУ	_____	Сдобняков В.В.