

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Санкт-Петербургский государственный университет промышленных технологий и дизайна»
(СПбГУПТД)

УТВЕРЖДАЮ

Первый проректор, проректор по
УР

_____ А.Е. Рудин

«04» ____ 04 ____ 2023 года

Рабочая программа дисциплины

Б1.О.33

Кристаллохимия

Учебный план: 2024-2025 04.05.01 ИПХЭ Медицинская химия ОО №3-1-155.plx

Кафедра: **44** Теоретической и прикладной химии

Направление подготовки:
(специальность) 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

Профиль подготовки: специализация "Медицинская химия"
(специализация)

Уровень образования: специалитет

Форма обучения: очная

План учебного процесса

Семестр (курс для ЗАО)	Контактная работа обучающихся		Сам. работа	Контроль, час.	Трудоём- кость, ЗЕТ	Форма промежуточной аттестации	
	Лекции	Практ. занятия					
9	УП	33	33	51	27	4	Экзамен
	РПД	33	33	51	27	4	
Итого	УП	33	33	51	27	4	
	РПД	33	33	51	27	4	

Санкт-Петербург
2023

Рабочая программа дисциплины составлена в соответствии с федеральным государственным образовательным стандартом высшего образования по направлению подготовки 04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия, утвержденным приказом Минобрнауки России от 13.07.2017 г. № 652

Составитель (и):

доктор химических наук, Заведующий кафедрой

Новоселов Николай
Петрович

От кафедры составителя:

Заведующий кафедрой теоретической и прикладной химии

Новоселов Николай
Петрович

От выпускающей кафедры:

Заведующий кафедрой

Новоселов Николай
Петрович

Методический отдел:

1 ВВЕДЕНИЕ К РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЕ ДИСЦИПЛИНЫ

1.1 Цель дисциплины: формирование компетенций у студентов в области физико-химических свойств и методов описания кристаллов в контексте наличия пространственной симметрии у кристаллических структур, способствующей становлению их готовности к решению задач профессиональной деятельности

1.2 Задачи дисциплины:

- познакомить с основными постулатами и принципами кристаллохимии и кристаллографии;
- научить использовать математический аппарат кристаллохимии и кристаллографии;
- познакомить с теориями групп и методов ее применения к анализу симметрии конкретных кристаллов;
- научить использовать методы термодинамического описания реальных кристаллов на основе дискретных и континуальных решеточных моделей;
- познакомить с методами экспериментального определения кристаллических структур с помощью дифракции рентгеновских лучей;
- подготовить студентов к активному использованию приобретенных знаний и умений в области кристаллохимии как при изучении смежных дисциплин подготовки специалиста, так и в своей дальнейшей профессиональной деятельности.

1.3 Требования к предварительной подготовке обучающегося:

Предварительная подготовка предполагает создание основы для формирования компетенций, указанных в п. 2, при изучении дисциплин:

- Квантовая химия
- Строение вещества
- Математика
- Физика
- Вычислительные методы в химии
- Физическая химия
- Информационные технологии

2 КОМПЕТЕНЦИИ ОБУЧАЮЩЕГОСЯ, ФОРМИРУЕМЫЕ В РЕЗУЛЬТАТЕ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

ОПК-4: Способен планировать работы химической направленности, обрабатывать и интерпретировать полученные результаты с использованием теоретических знаний и практических навыков решения математических и физических задач

Знать: основные понятия кристаллохимии и кристаллографии, методы термодинамического описания реальных кристаллов на основе дискретных и континуальных решеточных моделей

Уметь: использовать методы экспериментального определения кристаллических структур с помощью дифракции рентгеновских лучей

Владеть: навыками расчета фазовых диаграмм бинарных растворов на основании обобщенной решеточной модели

ОПК-5: Способен понимать принципы работы информационных технологий, использовать информационные базы данных и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности с учетом основных требований информационной безопасности

Знать: общие принципы получения, обработки и анализа научной информации по строению кристаллов

Уметь: использовать специализированные базы данных с учетом требований информационной безопасности для идентификации синтезированных кристаллических соединений

Владеть: навыками использования специализированных баз данных для идентификации кристаллических веществ и моделирования их структуры

3 РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

Наименование и содержание разделов, тем и учебных занятий	Семестр (курс для ЗАО)	Контактная работа		СР (часы)	Инновац. формы занятий	Форма текущего контроля
		Лек. (часы)	Пр. (часы)			
Раздел 1. Введение. Основные понятия	9					,0
Тема 1. Кристаллохимия, основные цели и задачи курса. Краткий исторический обзор. Кристаллическая структура твердых тел. Кристаллическая решетка. Конденсированное состояние вещества. Нулевые колебания и особенности гелия. Примитивная элементарная ячейка. Простые и сложные решетки. Решетки с базисом. Бесконечные решетки и конечные кристаллы. Решетка Бравэ и ее свойства. Практическое занятие: Введение. Первичные понятия и геометрическое описание кристаллических структур.		2	8	3		
Тема 2. Основы теории групп и ее терминология. Определение группы, четыре свойства элементов группы. Подгруппы, порядок группы, таблица умножения (квадрат Кэли), абелевы группы, циклические группы, прямое произведение групп, изоморфизм и гомоморфизм групп. Понятие точечных операций симметрии, матричные представления. Примеры. Группа D ₃		4		3		
Тема 3. Некоторые трехмерные решетки Бравэ и плотные упаковки кристаллов. Трехмерные решетки Бравэ кубической сингонии: простая кубическая решетка, объемноцентрированная кубическая решетка (ОЦК) и гранецентрированная кубическая решетка (ГЦК). Условная (непримитивная) элементарная ячейка и ее связь с примитивной элементарной ячейкой. Симметричный выбор тройки основных векторов ГЦК и ОЦК решеток. Простая гексогональная решетка. Симметричная ячейка (ячейка Вигнера-Зейтца).		2		3		
Тема 4. Некоторые трехмерные решетки Бравэ и плотные упаковки кристаллов (продолжение). Важные примеры: структура типа алмаза, структура типа цинковой обманки, структура типа хлорида цезия, структура типа хлорида натрия, гексагональная плотноупакованная структура (ГПУ). Типы плотных упаковок, степень упаковки, сравнение степени упаковки для ПКР, ОЦК и ГЦК решеток. Идеальный случай упаковки ГПУ- структуры. Золотое сечение.		2		3		

<p>Тема 5. Классификация решеток Бравэ и сингоний. 14 трехмерных решеток Бравэ и 7 кристаллических систем (сингоний), их связь и анализ. Кубическая, тетрагональная, ромбическая, моноклинная, триклинная, тригональная и гексагональная сингонии и их иерархия.</p>	2		3	ГД	
<p>Раздел 2. Основы кристаллографии</p>					
<p>Тема 6. Простейшие точечные операции симметрии (простой поворот, зеркальный поворот, инверсия, отражение в плоскость и т.д.) и их матричные представления. Обозначения Шенфлиса и международные обозначения. Связь точечной и трансляционной симметрии кристаллов: ограничения порядка поворотных осей в кристаллических структурах. Группы C_n, S_{2n}, C_{nv}, C_{nh}.</p>	2		3		
<p>Тема 7. Точечная симметрия кристаллов (продолжение). Группы D_n, $D_{nh}(D_{nv})$, D_{nd}. Группы T, T_d, Th, O, Oh. 32 точечных группы симметрии кристаллов. Пространственная симметрия кристаллов. Понятие пространственных (федоровских) групп. Практическое занятие: Точечная симметрия кристаллов</p>	2	5	3		
<p>Тема 8. Определение обратной решетки. Обратная решетка как решетка Бравэ. Решетка обратная к обратной. Прямая решетка. Примеры обратных решеток для простой кубической, ОЦК и ГЦК решеток. Первая зона Бриллюэна. Практическое занятие: Обратная решетка и ее свойства.</p>	2	5	3		,0
<p>Тема 9. Атомные плоскости и их свойства. Индексы Миллера атомных плоскостей. Связь семейств атомных плоскостей и векторов обратной решетки. Некоторые правила обозначения направлений в кристаллах. Примеры</p>	2		3		
<p>Тема 10. Формулировка Брэгга условия дифракции рентгеновских лучей на кристалле. Формулировка Лауэ условия дифракции рентгеновских лучей на кристалле. Эквивалентность формулировок Брэгга и Лауэ</p>	2		3		
<p>Тема 11. Экспериментальные методы, основанные на условии Лауэ: построение Эвальда, метод Лауэ, метод вращающегося кристалла, порошковый метод (метод Дебая-Шеррера). Дифракция на моноатомной решетке с базисом. Геометрический структурный фактор. Дифракция на полиатомном кристалле. Атомный форм-фактор. Практическое занятие: Определение кристаллических структур с помощью дифракции рентгеновских лучей.</p>	2	5	3	ГД	

Раздел 3. Решеточные модели и их применение для термодинамического описания кристаллов. Построение фазовых диаграмм					,РГР
Тема 12. Дискретные и непрерывные решеточные модели кристаллов, приближение самосогласованного поля, метод Гиббса. Процедура минимизации функционала свободной энергии Гельмгольца в рамках обобщенной решеточной модели (ОРМ). Описания двухфазных равновесий бинарных растворов в рамках ОРМ, спинодальный распад. Практическое занятие: Термодинамическое описание кристаллов на основе решеточных моделей	3	5	6		
Тема 13. Расчет фазовых диаграмм бинарных растворов с неограниченной растворимостью компонентов в твердом и жидком состояниях. Расчет фазовых диаграмм бинарных растворов с неограниченной растворимостью компонентов в твердом и жидком состояниях при наличии экстремума на кривой ликвидуса. Расчет фазовых диаграмм бинарных растворов с простой эвтектикой. Практическое занятие: Расчет фазовых диаграмм бинарных растворов на основании обобщенной решеточной модели.	3	5	6		
Тема 14. Расчет фазовых диаграмм бинарных растворов эвтектического типа с промежуточными фазами постоянного состава. Расчет фазовых диаграмм бинарных растворов эвтектического типа с промежуточными фазами переменного состава. Теория типов химической связи в кристаллах. Ван-дер-Ваальсово притяжение в молекулярных кристаллах. Ионная связь. Ковалентная связь. Металлы. Вещества с водородной и смешанной связью	3		6	ГД	
Итого в семестре (на курсе для ЗАО)	33	33	51		
Консультации и промежуточная аттестация (Экзамен)		2,5	24,5		
Всего контактная работа и СР по дисциплине		68,5	75,5		

4 КУРСОВОЕ ПРОЕКТИРОВАНИЕ

Курсовое проектирование учебным планом не предусмотрено

5. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

5.1 Описание показателей, критериев и системы оценивания результатов обучения

5.1.1 Показатели оценивания

Код компетенции	Показатели оценивания результатов обучения	Наименование оценочного средства
ОПК-4	излагает основные понятия кристаллохимии и кристаллографии, методов термодинамического описания реальных кристаллов; рассчитывает фазовые диаграммы бинарных систем; применяет методы экспериментального определения кристаллических структур.	Вопросы для устного собеседования Практико-ориентированные задания

ОПК-5	<p>описывает строение кристаллов с использованием специализированных баз данных;</p> <p>обрабатывает и анализирует научную информацию по строению кристаллов;</p> <p>применяет специализированные базы данных для идентификации кристаллических веществ и моделирования их структуры</p>	<p>Вопросы для устного собеседования</p> <p>Практико-ориентированные задания</p>
-------	--	--

5.1.2 Система и критерии оценивания

Шкала оценивания	Критерии оценивания сформированности компетенций	
	Устное собеседование	Письменная работа
5 (отлично)	<p>Полный исчерпывающий ответ, показывающий понимание предмета. Ориентируется в основных терминах, знаком с дополнительной литературой, правильно отвечает на дополнительные вопросы.</p> <p>Студент показывает правильное понимание условия задачи, владеет навыками анализа условия, выбором нужных законов и формул для ее решения.</p>	
4 (хорошо)	<p>Стандартный ответ, лишенный индивидуальности. Допускает незначительные погрешности при ответе на вопросы.</p> <p>Студент показывает достаточное понимание условия задачи, владеет навыками анализа условия, путается в выборе нужных законов и формул для ее решения.</p> <p>Неполный ответ, имеют место небольшие пробелы в знаниях. Допускает погрешности при ответе на вопросы.</p> <p>Студент показывает достаточное понимание условия задачи, владеет навыками анализа условия, путается в выборе нужных законов и формул для ее решения.</p> <p>Затрудняется правильно написать уравнения реакций.</p>	
3 (удовлетворительно)	<p>Показывает знания учебного материала в минимальном объеме. Допускает большое количество непринципиальных ошибок. Может устранить их с помощью преподавателя.</p> <p>Студент показывает недостаточное понимание условия задачи, путается в выборе нужных законов и формул для ее решения.</p> <p>Неполный ответ, есть ошибки в изложении нескольких тем. Путается в терминах.</p>	

2 (неудовлетворительно)	<p>Не может ответить на вопрос без помощи экзаменатора. Многочисленные грубые ошибки.</p> <p>Не понимает условие задачи, не может предложить варианты решения.</p> <p>Непонимание заданного вопроса.</p> <p>Не понимает условие задачи, не может предложить варианты решения.</p> <p>Попытка списывания, использования неразрешенных технических устройств или пользование подсказкой другого человека.</p>	
-------------------------	---	--

5.2 Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности

5.2.1 Перечень контрольных вопросов

№ п/п	Формулировки вопросов
Семестр 9	
1	Трансляционная симметрия кристаллов. Тройка основных векторов, элементарная ячейка. Простые и сложные решетки (решетка с базисом). Базисные вектора.
2	ПКР, ОЦК и ГЦК решетки. Симметричная тройка основных векторов для кубических решеток.
3	Решетка Бравэ и ее свойства. Примитивная и условная элементарные ячейки. Примеры.
4	Симметричная ячейка (ячейка Вигнера-Зейтца) и ее построение. Примеры.
5	Некоторые типы кристаллических структур.
6	Упаковки кристаллов. Вычисление степени упаковки кристалла на примере ПКР, ОЦК, ГЦК и простой гексагональной решеток. Золотое сечение.
7	Точечная симметрия кристаллов. Определение группы и основные определения теории групп (элементы, порядок, подгруппы [собственные и несобственные], таблица умножения [квадрат Кэли]).
8	Точечная группа симметрии кристалла и ее элементы. Матричные представления элементов симметрии –поворот (простой), отражение в плоскость, поворот (зеркальный), инверсия.
9	Пространственная симметрия кристаллов. Теорема о связидопустимого порядка поворотной оси и трансляционной симметрии кристалла. Группы C_n , S_{2n} , C_{nv} , C_{nh} .
10	Группы D_n , $D_{nh}(D_{nv})$, D_{nd} .
11	Группы T , T_d , T_h , O , O_h . 32 точечных группы симметрии кристаллов.
12	Классификация решеток Бравэ – 14 решеток, 7 сингоний, 3 кристаллических системы.
13	Обратная решетка и ее свойства. Обратная решетка как решетка Бравэ, выбор тройки основных векторов. Решетка обратная к обратной.
14	Нахождение обратных решеток к ПКР, ОЦК, ГЦК и простой гексагональной решеткам. Первая зона Бриллюэна.
15	Атомные плоскости и их семейства. Теорема (прямая и обратная) о связи семейства атомных плоскостей прямой решетки и некоторыми векторами обратной решетки. Индексы Миллера, обозначения направлений.
16	Экспериментальное исследование структуры кристаллических тел. Формулировки Брэгга и Лауэ, доказательство их эквивалентности.
17	Построение Эвальда. Метод Лауэ, метод вращающегося кристалла, порошковый метод.
18	Геометрический структурный фактор. Атомный структурный фактор.
19	Термодинамика кристаллов. Дискретная решеточная модель, критические явления.
20	Термодинамика кристаллов. Обобщенная решеточная модель, критические явления.

5.2.2 Типовые тестовые задания

не предусмотрены

5.2.3 Типовые практико-ориентированные задания (задачи, кейсы)

Для группы точечной симметрии (см. варианты задания):

- определить все элементы группы;
- найти матричные представления для элементов данной группы;
- путем непосредственного матричного умножения убедиться в условии полноты группы;
- построить таблицу умножения (квадрат Кэли) данной точечной группы;
- найти все собственные и несобственные подгруппы данной группы;
- исследовать основные свойства данной группы.

5.3 Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, владений (навыков и (или) практического опыта деятельности)

5.3.1 Условия допуска обучающегося к промежуточной аттестации и порядок ликвидации академической задолженности

Проведение промежуточной аттестации регламентировано локальным нормативным актом СПбГУПТД «Положение о проведении текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации обучающихся»

5.3.2 Форма проведения промежуточной аттестации по дисциплине

Устная Письменная Компьютерное тестирование Иная

5.3.3 Особенности проведения промежуточной аттестации по дисциплине

Возможность пользоваться справочными таблицами и калькулятором.

Время подготовки ответов на задания экзаменационного билета - 45 минут.

6. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

6.1 Учебная литература

Автор	Заглавие	Издательство	Год издания	Ссылка
6.1.1 Основная учебная литература				
Мордасов, Д. М., Строкова, В. В., Жерновский, И. В.	Кристаллография	Тамбов: Тамбовский государственный технический университет, ЭБС АСВ	2018	https://www.iprbooks hop.ru/94346.html
Батаев, И. А., Батаев, А. А., Веселов, С. В.	Кристаллография. Индексирование граней и ребер кристаллов	Новосибирск: Новосибирский государственный технический университет	2019	https://www.iprbooks hop.ru/98676.html
6.1.2 Дополнительная учебная литература				
Батаев, И. А., Батаев, А. А., Лазуренко, Д. В.	Кристаллография. Методы проецирования кристаллов	Новосибирск: Новосибирский государственный технический университет	2017	https://www.iprbooks hop.ru/91266.html
Тофпенец, Р. Л., Анисович, А. Г.	Кристаллография	Минск: Белорусская наука	2019	https://www.iprbooks hop.ru/95458.html

6.2 Перечень профессиональных баз данных и информационно-справочных систем

Кристаллографическая и кристаллохимическая База данных для минералов и их структурных аналогов - <http://database.iem.ac.ru/mincryst>

Всероссийское минералогическое общество - <http://www.minsoc.ru>

Горная энциклопедия - <http://www.mining-enc.ru/>

6.3 Перечень лицензионного и свободно распространяемого программного обеспечения

MicrosoftOfficeProfessional

Microsoft Windows

6.4 Описание материально-технической базы, необходимой для осуществления образовательного процесса по дисциплине

Практические занятия проводятся с использованием микроскопов.

Аудитория	Оснащение
Лекционная аудитория	Мультимедийное оборудование, специализированная мебель, доска
Учебная аудитория	Специализированная мебель, доска
Компьютерный класс	Мультимедийное оборудование, компьютерная техника с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду