

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
ФГБОУ ВО «БАШКИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
ИНЖЕНЕРНЫЙ ФАКУЛЬТЕТ

Актуализировано:
на заседании кафедры технической химии и
материаловедения протокол №26 от 13.06.2017
г.

Согласовано:
Председатель УМК факультета /института

Зав. кафедрой  /Мухамедзянова А.А.

 / Мельникова А.Я.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
«Структурная химия и кристаллохимия»

Вариативная часть, дисциплина по выбору – Б1.В.1.ДВ.04.01

программа бакалавриата


Направление подготовки

04.03.02 – Химия, физика и механика материалов

Направленность (профиль) подготовки

Медицинские и биоматериалы

квалификация
бакалавр

Разработчик (составитель) доцент, к.х.н.	 / Мурзагулова Э.И.
---	---

Для приема 2016 г

Уфа 2017 г.

Составитель:  / Мурзагулова Э.И.

Рабочая программа дисциплины актуализирована на заседании кафедры технической химии и материаловедения протокол № 26 от «13» июня 2017 г.

Дополнения и изменения, внесенные в рабочую программу дисциплины: обновлены программное обеспечение и базы данных; изменен рейтинг план дисциплины; в списке рекомендованной литературы обновлены ссылки на издания, размещенные в ЭБС БашГУ, утверждены на заседании кафедры технической химии и материаловедения протокол № 27 от «11» июня 2018 г.

Заведующий кафедрой

 / Мухамедзянова А.А.

Список документов и материалов

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы
2. Цель и место дисциплины в структуре образовательной программы
3. Содержание рабочей программы (объем дисциплины, типы и виды учебных занятий, учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся)
4. Фонд оценочных средств по дисциплине
 - 4.1. Перечень компетенций с указанием этапов их формирования в процессе освоения образовательной программы. Описание показателей и критериев оценивания компетенций на различных этапах их формирования, описание шкал оценивания
 - 4.2. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций
 - 4.3. *Рейтинг-план дисциплины (при необходимости)*
5. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины
 - 5.1. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины
 - 5.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» и программного обеспечения, необходимых для освоения дисциплины
6. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине

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

Результаты обучения	Формируемые компетенции	Примечание
Знания	1. Понятие о кристалле, кристаллическом веществе и кристаллохимии. Свойства кристаллов. Зависимость свойств кристаллов от их строения.	– способность к самоорганизации и самообразованию (ОК-7);
	2. Теорию симметрии молекул. Элементы и операции симметрии. Теоремы о сочетаниях операций симметрии – точечные группы. Символы Шенфлиса. Взаимосвязь симметрии молекулы и ее оптических и магнитных свойств.	– владением современными методами химии, физики, математики, механики, биологии на уровне, необходимом для приобретения новых знаний с их использованием и
	3. Теорию симметрии кристаллов. Открытые и закрытые элементы симметрии. Трансляция, вектор трансляции. Вращательная симметрия кристаллов. Решетка кристалла. Элементарная ячейка. Кристаллографические системы координат. Возможные и действительные грани кристаллов. Простая форма. Закон целых чисел. Индексы Миллера. Кристаллографические категории и системы (сингонии) кристаллов. 14 решеток Браве.	решения задач, возникающих при выполнении профессиональных функций и имеющих естественнонаучное содержание (ОПК-1); – способность использовать практические навыки экспериментальной работы в областях неорганической, аналитической, органической и
	4. Основы рентгеновской спектроскопии, устройство рентгеновской трубки, условия возникновения характеристического и «белого» (монохроматического) излучений. Уравнение Вульфа-Брэгга. Основные дифракционные методы исследования кристаллов: метод порошка (метод Дебая); метод вращения монокристалла. Типы кубических решеток.	физической химии; химии и физики высокомолекулярных соединений; структурной химии и кристаллохимии; общей физики; физики конденсированного состояния и механики материалов, позволяющие эффективно работать в различных
	5. Теорию плотнейших упаковок. Симметрия плотноупакованных слоев. Пустоты в плотнейших упаковках. Их расположение и симметрия. Металлические радиусы. Ионные радиусы. Ковалентные радиусы. Ионные	экспериментальных областях наук о материалах и в современной технологии материалов (ОПК-2)

	радиусы.		
	6. Типы изоморфизма. Твердые растворы. Условия, необходимые для проявления изоморфизма. Изоморфизм с заполнением пространства. Полиморфизм. Структурная модификация типов полиморфизма. Твердые структуры второго рода. Структуры внедрения.		
	7. Точечные дефекты. Дислокации. Мозаичность. Структура поверхности и тонких пленок. Влияние дефектов кристаллов на их свойства.		
Умения	1. Определять симметрию молекул: определять элементы симметрии, присущие молекуле, определять точечную группу симметрии молекулы.	– способность использовать практические навыки экспериментальной работы в областях неорганической, аналитической, органической и физической химии; химии и физики высокомолекулярных соединений; структурной химии и кристаллохимии; общей физики; физики конденсированного состояния и механики материалов, позволяющие эффективно работать в различных областях наук о материалах и в современной технологии материалов (ОПК-2);	
	2. Использовать теорию симметрии для предсказания наличия у молекулы оптических свойств и дипольного момента.		
	3. Определять тип кубической кристаллической решетки. Находить индексы граней кубических решеток. Вычислять параметры элементарных ячеек, межплоскостные расстояния.		
	4. Определять углы, при которых происходит отражение рентгеновских лучей от плоскостей различного типа в кристаллах.		
	5. Различать типы изоморфизма, определять условия проявления изоморфизма. Различать структуры внедрения.		
	6. Описывать точечные дефекты, дислокации, мозаичность, структуру поверхности и тонких пленок, влияние дефектов кристаллов на их свойства.		– готовность к использованию синтетических и приборно-аналитических навыков, позволяющих работать в различных

		областях современной технологии, связанных с решением материаловедческих задач (ПК-2)	
Владения (навыки/опыт деятельности)	1. Навыками определения групп симметрии молекул, использования теории симметрии молекул.	– готовность к использованию синтетических и приборно-аналитических навыков, позволяющих работать в различных областях современной технологии, связанных с решением материаловедческих задач (ПК-2)	
	2. Навыками индентирования плоскостей, расчета параметров элементарных ячеек, межплоскостных расстояний в кубических кристаллах различного типа.		
	3. Навыками вычисления углов, при которых происходит отражение рентгеновских лучей от плоскостей различного типа в кристаллах.		

2. Цель и место дисциплины в структуре образовательной программы

Дисциплина «*Структурная химия и кристаллохимия*» относится к *вариативной* части.

Дисциплина изучается на 2 курсе в 4 семестре.

Целями освоения дисциплины «Кристаллохимия» являются изучение студентами атомного строения кристаллов, зависимости физических и химических свойств от их состава и строения, формирование умения предсказать поведение кристаллических веществ при внешних воздействиях.

Дисциплина «*Структурная химия и кристаллохимия*» входит в вариативную часть Образовательной программы бакалавриата по направлению «Химия, физика и механика материалов» по профилям подготовки «Современные материалы для медицины и промышленности». Она находится в логической взаимосвязи с другими частями ОП. Используется приобретенная в результате освоения дисциплин, входящих в базовую часть ОП способность к обобщению научных результатов, к обработке данных эксперимента, работе с отечественными и зарубежными научными источниками, коммуникативность при работе в коллективе. Навыки в информатике, владение математическим инструментом применяются при решении научно-исследовательских задач.

Для освоения дисциплины необходимы компетенции, сформированные в рамках изучения следующих дисциплин:

1. общая химия (периодический закон Д.И. Менделеева, строение атома, химическая связь и валентность);
2. неорганическая химия (свойства и строение элементов);
3. органическая химия (стереохимия, классификация органических соединений);
4. математика (векторная алгебра, тензоры, высшая геометрия);
5. современная физическая химия (строение атома, электронное строение молекулы).

Изучение дисциплины структурная химия и кристаллохимия необходимо для последующего изучения дисциплины «Органическая химия», «Специальные главы органической химии».

3. Содержание рабочей программы (объем дисциплины, типы и виды учебных занятий, учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся)

Содержание рабочей программы представлено в Приложении № 1.

4. Фонд оценочных средств по дисциплине

4.1. Перечень компетенций с указанием этапов их формирования в процессе освоения образовательной программы. Описание показателей и критериев оценивания компетенций на различных этапах их формирования, описание шкал оценивания ОК-7 – способность к самоорганизации и к самообразованию

Этап (уровень) освоения компетенции и	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций)	Критерии оценивания результатов обучения	
		Зачтено	Не зачтено
Первый этап (уровень)	Знать: 1. Понятие о кристалле, кристаллическом веществе и кристаллохимии. Свойства кристаллов. Зависимость свойств кристаллов от их строения. 2. Теорию симметрии молекул. Элементы и операции симметрии. Теоремы о сочетаниях операций симметрии – точечные группы. Символы Шенфлиса. Взаимосвязь симметрии молекулы и ее оптических и магнитных свойств.	1. Не знает современного определения кристалла, свойств кристаллических веществ, взаимосвязи свойств кристаллов и их строения.	1. Знает современное определение кристалла, все пять свойств кристаллического вещества, влияние строения кристаллов на их свойства.
		2. Не знает элементы и операции симметрии, теоремы о сочетаниях операций симметрии – точечные группы, символы Шенфлиса, взаимосвязь симметрии молекулы и ее оптических и магнитных свойств.	2. Знает элементы и операции симметрии, теоремы о сочетаниях операций симметрии – точечные группы, символы Шенфлиса, взаимосвязь симметрии молекулы и ее оптических и магнитных свойств.
Второй этап (уровень)	Уметь: 1. Определять симметрию молекул: определять элементы симметрии, присущие молекуле, определять точечную группу симметрии молекулы. 2. Использовать теорию симметрии для предсказания наличия у молекулы оптических свойств и дипольного момента.	1. Не умеет определять симметрию молекул: определять элементы симметрии, присущие молекуле, определять точечную группу симметрии молекулы.	1. Умеет определять симметрию молекул: определять элементы симметрии, присущие молекуле, определять точечную группу симметрии молекулы.
		2. Не умеет использовать теорию симметрии для предсказания наличия у молекулы оптических свойств и дипольного момента.	2. Умеет использовать теорию симметрии для предсказания наличия у молекулы оптических свойств и дипольного момента.

Третий этап (уровень)	Владеть: 1. Навыками определения групп симметрии молекул, использования теории симметрии молекул.	1. Не владеет навыками определения групп симметрии молекул, использования теории симметрии молекул.	1. Владеет навыками определения групп симметрии молекул, использования теории симметрии молекул.
-----------------------	--	---	--

ОПК-1 – способность использовать современные методы химии, физики, математики, механики, биологии на уровне, необходимом для приобретения новых знаний с их использованием и решения задач, возникающих при выполнении профессиональных функций и имеющих естественнонаучное содержание

Этап (уровень) освоения компетенции	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций)	Критерии оценивания результатов обучения	
		Зачтено	Не зачтено
Первый этап (уровень)	Знать: 1. Теорию симметрии кристаллов. Открытые и закрытые элементы симметрии. Трансляция, вектор трансляции. Вращательная симметрия кристаллов. Решетка кристалла. Элементарная ячейка. Закон целых чисел. Возможные и действительные грани кристаллов. Простая форма. Индексы Миллера. Кристаллографические категории и системы (сингонии) кристаллов. 14 решеток Браве. 2. Основы рентгеновской спектроскопии, устройство рентгеновской трубки, условия возникновения характеристического и «белого» (монохроматического) излучений. Уравнение Вульфа-Брэгга. Основные дифракционные методы исследования кристаллов: метод порошка (метод Дебая); метод вращения монокристалла. Типы кубических решеток.	1. Не знает теорию симметрии кристаллов, что такое трансляция и вектор трансляции, вращательную симметрию кристаллов; определение решетки кристалла, элементарной ячейки, формулировку закона целых чисел; не имеет представления об индексах Миллера, кристаллографических категориях и системах (сингониях) кристаллов, 14 решетках Браве.	1. Знает теорию симметрии кристаллов, что такое трансляция и вектор трансляции, вращательную симметрию кристаллов; определение решетки кристалла, элементарной ячейки, формулировку закона целых чисел; имеет представление об индексах Миллера, кристаллографических категориях и системах (сингониях) кристаллов, 14 решетках Браве.
		2. Не знает основ рентгеновской спектроскопии, устройства рентгеновской трубки, условий возникновения характеристического и «белого» (монохроматического)	2. Знает основы рентгеновской спектроскопии, устройство рентгеновской трубки, условия возникновения характеристического и «белого» (монохроматического)

		о) излучений, уравнения Вульфа-Брэгга; основных дифракционных методов исследования кристаллов: метод порошка (метод Дебая); метод вращения монокристалла; не имеет представления о типах кубических решеток.	излучений, уравнение Вульфа-Брэгга; основные дифракционные методы исследования кристаллов: метод порошка (метод Дебая); метод вращения монокристалла; типы кубических решеток.
Второй этап (уровень)	Уметь: 1. Определять тип кубической кристаллической решетки. Находить индексы граней кубических решеток. Вычислять параметры элементарных ячеек, межплоскостные расстояния. 2. Определять углы, при которых происходит отражение рентгеновских лучей от плоскостей различного типа в кристаллах. 3. Определять углы, при которых происходит отражение рентгеновских лучей от плоскостей различного типа в кристаллах.	1. Не умеет определять тип кубической кристаллической решетки, находить индексы граней кубических решеток, вычислять параметры элементарных ячеек, межплоскостные расстояния.	1. Умеет определять тип кубической кристаллической решетки, находить индексы граней кубических решеток, вычислять параметры элементарных ячеек, межплоскостные расстояния.
		2. Не умеет определять углы, при которых происходит отражение рентгеновских лучей от плоскостей различного типа в кристаллах.	2. Умеет определять углы, при которых происходит отражение рентгеновских лучей от плоскостей различного типа в кристаллах.
		3. Не умеет определять углы, при которых происходит отражение рентгеновских лучей от плоскостей различного типа в кристаллах.	3. Умеет определять углы, при которых происходит отражение рентгеновских лучей от плоскостей различного типа в кристаллах.

Третий этап (уровень)	Владеть: 1. Навыками индцирования плоскостей, расчета параметров элементарных ячеек, межплоскостных расстояний в кубических кристаллах различного типа.	1. Не владеет навыками индцирования плоскостей, расчета параметров элементарных ячеек, межплоскостных расстояний в кубических кристаллах различного типа.	1. Владеет индцирования плоскостей, расчета параметров элементарных ячеек, межплоскостных расстояний в кубических кристаллах различного типа.
-----------------------	--	---	---

ОПК-2 – способность использовать практические навыки экспериментальной работы в областях неорганической, аналитической, органической и физической химии; химии и физики высокомолекулярных соединений; структурной химии и кристаллохимии; общей физики; физики конденсированного состояния и механики материалов, позволяющие эффективно работать в различных экспериментальных областях наук о материалах и в современной технологии материалов

Этап (уровень) освоения компетенции	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций)	Критерии оценивания результатов обучения	
		Зачтено	Не зачтено
Первый этап (уровень)	Знать: 1. Теорию плотнейших упаковок. Симметрия плотноупакованных слоев. Расположение и симметрия пустот в плотнейших упаковках. Металлические радиусы. Ионные радиусы. Ковалентные радиусы. Ионные радиусы. 2. Типы изоморфизма. Условия, необходимые для проявления изоморфизма. Изоморфизм с заполнением пространства. Полиморфизм. Структурная модификация типов полиморфизма. Твердые структуры второго рода. Структуры внедрения.	1. Не знает теорию плотнейших упаковок, симметрию плотноупакованных слоев, расположение и симметрию пустот в плотнейших упаковках, формулы расчета металлических, ионных и ковалентных радиусов.	1. Знает теорию плотнейших упаковок, симметрию плотноупакованных слоев, расположение и симметрию пустот в плотнейших упаковках, формулы расчета металлических, ионных и ковалентных радиусов.
		2. Не знает типов изоморфизма, условия, необходимые для проявления изоморфизма, что такое изоморфизм с заполнением пространства, полиморфизм, структурных модификаций типов полиморфизма,	2. Знает типы изоморфизма, условия, необходимые для проявления изоморфизма, что такое изоморфизм с заполнением пространства, полиморфизм, структурную модификацию типов полиморфизма, твердые структуры

		твердых структур второго рода, структур внедрения.	второго рода, структуры внедрения.
Второй этап (уровень)	Уметь: 1. Различать типы изоморфизма, определять условия проявления изоморфизма. Различать структуры внедрения.	1. Не умеет различать типы изоморфизма, определять условия проявления изоморфизма. Различать структуры внедрения.	1. Умеет различать типы изоморфизма, определять условия проявления изоморфизма. Различать структуры внедрения.
Третий этап (уровень)	Владеть: 1. Навыками охарактеризовывать различные типы изоморфизма, условия проявления изоморфизма, различать структуры внедрения.	1. Не владеет навыками охарактеризовывать различные типы изоморфизма, условия проявления изоморфизма, различать структуры внедрения.	1. Владеет навыками охарактеризовывать различные типы изоморфизма, условия проявления изоморфизма, различать структуры внедрения.

ПК-2 – готовность к использованию синтетических и приборно-аналитических навыков, позволяющих работать в различных областях современной технологии, связанных с решением материаловедческих задач

Этап (уровень) освоения компетенции и	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций)	Критерии оценивания результатов обучения	
		Зачтено	Не зачтено
Первый этап (уровень)	Знать: 1. Точечные дефекты. Дислокации. Мозаичность. Структура поверхности и тонких пленок. Влияние дефектов кристаллов на их свойства.	1. Не знает определения точечных дефектов, дислокаций, мозаичности, структуру поверхности и тонких пленок, влияния дефектов кристаллов на их свойства.	1. Знает определения точечных дефектов, дислокаций, мозаичности, структуру поверхности и тонких пленок, влияние дефектов кристаллов на их свойства.
Второй этап (уровень)	Уметь: 1. Описывать точечные дефекты, дислокации, мозаичность, структуру поверхности и тонких пленок, влияние дефектов кристаллов на их свойства.	1. Не умеет описывать точечные дефекты, дислокации, мозаичность, структуру поверхности и тонких пленок, влияние дефектов	1. Умеет описывать точечные дефекты, дислокации, мозаичность, структуру поверхности и тонких пленок, влияние дефектов кристаллов на их свойства.

		кристаллов на их свойства.	
Третий этап (уровень)	Владеть: 1. Навыками охарактеризовывать точечные дефекты, дислокации, мозаичность, структуру поверхности и тонких пленок, влияние дефектов кристаллов на их свойства.	1. Не владеет навыками охарактеризовывать точечные дефекты, дислокации, мозаичность, структуру поверхности и тонких пленок, влияние дефектов кристаллов на их свойства.	1. Владеет навыками охарактеризовывать точечные дефекты, дислокации, мозаичность, структуру поверхности и тонких пленок, влияние дефектов кристаллов на их свойства.

Показатели сформированности компетенции:

Критериями оценивания являются баллы, которые выставляются преподавателем за виды деятельности (оценочные средства) по итогам изучения модулей (разделов дисциплины), перечисленных в рейтинг-плане дисциплины (*для зачета*: текущий контроль – максимум 50 баллов; рубежный контроль – максимум 50 баллов, поощрительные баллы – максимум 10).

Шкалы оценивания:

зачтено – от 60 до 110 рейтинговых баллов (включая 10 поощрительных баллов),
не зачтено – от 0 до 59 рейтинговых баллов).

4.2. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы.

Методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций

Этапы освоения	Результаты обучения	Компетенция	Оценочные средства
1-й этап Знания	1. Понятие о кристалле, кристаллическом веществе и кристаллохимии. Свойства кристаллов. Зависимость свойств кристаллов от их строения.	ОК-7, ОПК-2, ПК-2	Коллоквиум
	2. Теорию симметрии молекул. Элементы и операции симметрии. Теоремы о сочетаниях операций симметрии – точечные группы.		Коллоквиум, контрольная работа

Символы Шенфлиса. Взаимосвязь симметрии молекулы и ее оптических и магнитных свойств.		
3. Теорию симметрии кристаллов. Открытые и закрытые элементы симметрии. Вращательная симметрия кристаллов. Решетка кристалла. Элементарная ячейка. Кристаллографические системы координат. Возможные и действительные грани кристаллов. Простая форма. Закон целых чисел. Индексы Миллера. Кристаллографические категории и системы (сингонии) кристаллов. 14 решеток Браве.		Коллоквиум, контрольная работа
4. Основы рентгеновской спектроскопии, устройство рентгеновской трубки, условия возникновения характеристического и «белого» (монохроматического) излучений. Уравнение Вульфа-Брэгга. Основные дифракционные методы исследования кристаллов: метод порошка (метод Дебая); метод вращения монокристалла. Типы кубических решеток.		Коллоквиум, контрольная работа
5. Теорию плотнейших упаковок. Симметрия плотноупакованных слоев. Пустоты в плотнейших упаковках. Их расположение и симметрия. Металлические радиусы. Ионные радиусы. Ковалентные радиусы. Ионные радиусы.		Коллоквиум
6. Типы изоморфизма.		Коллоквиум

	<p>Твердые растворы. Условия, необходимые для проявления изоморфизма. Изоморфизм с заполнением пространства. Полиморфизм. Структурная модификация типов полиморфизма. Твердые структуры второго рода. Структуры внедрения.</p>		
	<p>7. Точечные дефекты. Дислокации. Мозаичность. Структура поверхности и тонких пленок. Влияние дефектов кристаллов на их свойства.</p>		Коллоквиум
2-й этап	<p>1. Определять симметрию молекул: определять элементы симметрии, присущие молекуле, определять точечную группу симметрии молекулы.</p>	ОПК-1, ПК-2	Контрольная работа
Умения	<p>2. Использовать теорию симметрии для предсказания наличия у молекулы оптических свойств и дипольного момента.</p>		Контрольная работа
	<p>3. Определять тип кубической кристаллической решетки. Находить индексы граней кубических решеток. Вычислять параметры элементарных ячеек, межплоскостные расстояния.</p>		Контрольная работа
	<p>4. Определять углы, при которых происходит отражение рентгеновских лучей от плоскостей</p>		Контрольная работа

	различного типа в кристаллах.		
	5. Различать типы изоморфизма, определять условия проявления изоморфизма. Различать структуры внедрения.		Коллоквиум
	6. Описывать точечные дефекты, дислокации, мозаичность, структуру поверхности и тонких пленок, влияние дефектов кристаллов на их свойства.		Коллоквиум
3-й этап Владеть навыками	1. Навыками определения групп симметрии молекул, использования теории симметрии молекул.	ПК-2	Контрольная работа
	2. Навыками индцирования плоскостей, расчета параметров элементарных ячеек, межплоскостных расстояний в кубических кристаллах различного типа.		Контрольная работа
	3. Навыками вычисления углов, при которых происходит отражение рентгеновских лучей от плоскостей различного типа в кристаллах.		Контрольная работа

Задачи

Предназначены для текущей проверки умений применять полученные знания для решения задач по изученной теме, а также для выполнения домашних заданий с целью усвоения и закрепления пройденного материала.

Примеры задач

1. Определите все элементы симметрии молекулы воды. Покажите, используя теорию симметрии, что молекула воды может быть полярной.
2. Установите наличие оси собственного вращения в молекуле аммиака, определите элементарный угол поворота и порядок этой оси.

3. Определите все элементы симметрии молекулы бензола. Покажите, используя теорию симметрии, что молекула бензола не может быть полярной.
4. Докажите, что в молекуле метана присутствует такой элемент симметрии как ось несобственного вращения. Установите порядок этой оси.
5. Определите все элементы симметрии молекулы гексафторида серы. Покажите, используя теорию симметрии, что молекула гексафторида серы не может быть оптически активной (хиральной)
6. ...

Критерии оценки (в баллах):

- 1 балл выставляется студенту, если студент самостоятельно решил поставленную задачу, используя формулы и законы по изученной теме материала, допуская небольшие неточности;

- 0 баллов выставляется студенту, если студент не справился с задачей, продемонстрировав незнание пройденного материала.

Коллоквиум

В ходе коллоквиума осуществляется беседа преподавателя со студентом по вопросам пройденной темы, с целью определения знаний студента. Коллоквиум может служить формой не только проверки, но и повышения знаний студентов.

Примерные вопросы к коллоквиумам:

Коллоквиум № 1

1. Дайте определение понятию «операция симметрии», каким фигурам присущи открытые операции, каким – закрытые?
2. Что такое поворотная ось симметрии? Что определяет порядок оси? Какой угол поворота вокруг оси симметрии называется элементарным?
3. Что такое ось несобственного вращения? Каким элементам симметрии эквивалентны оси несобственного вращения 1-го и 2-го порядков?
4. ...

Коллоквиум № 2

1. Что такое ряд, параметр ряда, сетка, ячейка решетки, кристаллическая решетка? Что такое трансляция?
2. Что такое простая форма? Что такое моноэдр? Какие простые формы называются общими и частными? Что такое закрытые и открытые простые формы? Какие простые формы вы знаете?
3. Сформулируйте закон целых чисел. Какую грань называют единичной? Что называют индексами Миллера, как их определяют?
4. Какие элементы симметрии называют открытыми? Какие закрытыми? Назовите их и опишите, какие симметрические операции им соответствуют.
5. Чем отличаются кристаллографические системы координат от декартовых? Как выбираются кристаллографические системы координат?

6. Какие категории кристаллов вы знаете? На какие сингонии подразделяются эти категории?
7. Как определяются металлические, ковалентные и ионные радиусы? От чего они зависят?
8. ...

Коллоквиум № 3

1. Опишите устройство и принцип работы рентгеновской трубки.
2. При каких условиях с помощью рентгеновской трубки можно получить монохроматическое, характеристическое излучение? От чего зависит их состав?
3. Приведите условия дифракции рентгеновских лучей на кристаллах. При каком условии будет наблюдаться отражение рентгеновских лучей от набора плоскостей с индексами hkl . Какое уравнение связывает между собой расстояние между плоскостями в кристалле и углом, при котором происходит отражение рентгеновских лучей с длиной волны λ ?
4. Опишите такой метод рентгеноструктурного анализа, как метод вращения. В каких случаях его используют, что он позволяет установить?
5. ...

Коллоквиум № 4

1. Как происходит чередование слоев в гексагональной плотнейшей упаковке? Сколько слоев в ней выделяют?
2. Как происходит чередование слоев в кубической плотнейшей упаковке? Сколько слоев в ней выделяют?
3. Какие типы пустот, имеющихся в плотнейших упаковках, вы знаете? Сколько и каких пустот приходится на каждый атом в упаковке? Каким образом происходит укладка ионов в ионных кристаллах? Какие ограничения накладываются на размеры ионов, заполняющих различные пустоты?
4. Что такое полиморфизм? При каких температурах устойчивы более плотно упакованные структуры, а при каких – менее? Как обозначаются различные полиморфные модификации одного и того же вещества?
5. На какие группы подразделяются полиморфные превращения, которые происходят при изменении температуры, но при постоянном давлении? Как соотносится точка перехода из одной модификации в другую с температурой плавления вещества?
6. Перечислите структурные типы полиморфных превращений.
7. ...

Критерии оценки (в баллах):

- 8-10 баллов выставляется студенту, если на все вопросы даны полные и исчерпывающие ответы;
- 6-8 баллов выставляется студенту, если на все вопросы даны не полные ответы;
- 3-5 баллов выставляется студенту, если не на все вопросы даны полные ответы;
- 0-2 балла выставляется студенту, если не на все вопросы даны ответы.

Контрольная работа

Описание контрольной работы:

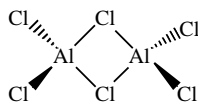
Средство проверки умений применять полученные знания для решения задач определенного типа по теме или разделу, состоит из небольшого количества средних по трудности вопросов, задач или заданий, требующих поиска обоснованного ответа.

Пример варианта контрольной работы № 1:

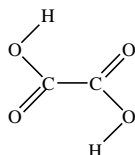
ВАРИАНТ № 1

Определите все элементы симметрии следующих молекул. Установите, к каким точечным группам симметрии они относятся, а также оцените их полярность и хиральность.

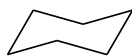
а)



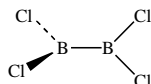
б)



в)



г)



Пример варианта контрольной работы № 2:

Вариант 1

1. На порошковой рентгенограмме молибдена отражения наблюдается под углами $20,25$; $29,30$; $36,82$; $43,81$; $50,69$; $58,00$; $66,30^{\circ}$ и под большими углами, когда используется излучение меди (длина волны равна $1,5405 \text{ \AA}$). а) В какой кубической решетке кристаллизуется молибден? б) Каково ребро элементарной ячейки? в) Какова плотность молибдена?

2. Алюминий образует гранецентрированные кубические кристаллы; ребро элементарной ячейки равно $4,050 \text{ \AA}$ при 25°C . Вычислить: а) плотность алюминия при этой температуре; б) расстояния между плоскостями (300), (220) и (111).

3. Кристаллы хлористого, бромистого и йодистого цезия имеют примитивную кубическую, а не взаимоперпендикулярную гранецентрированную решетку, как все галогениды щелочных металлов. Ребро элементарной ячейки CsCl равно $4,121 \text{ \AA}$.

а) Какова плотность CsCl ?

б) Вычислить радиус Cs^+ , предположив, что ионы касаются по диагонали элементарной ячейки и что радиус иона Cl^- равен $1,81 \text{ \AA}$.

4. Кристалл вольфрама имеет объемноцентрированную кубическую решетку. Зная, что плотность вольфрама составляет $19,3 \text{ г/см}^3$ вычислить:

а) ребро элементарной ячейки;

б) d_{200} , d_{110} и d_{222} .

Описание методики оценивания:

Подготовленная и оформленная в соответствии с требованиями контрольная работа оценивается по следующим критериям:

- знания и умения на уровне требований стандарта данной дисциплины: знание фактического материала, усвоение общих понятий;

Критерии оценки (в баллах):

- 20-25 баллов выставляется студенту, если студент самостоятельно и правильно решил все задачи варианта, используя формулы и законы по изученной теме материала, могут быть допущены небольшие неточности;

- 15-19 баллов выставляется студенту, если студент самостоятельно и правильно решил большую часть задач варианта, используя формулы и законы по изученной теме материала;

- 14-10 баллов выставляется студенту, если студент самостоятельно и правильно решил половину задач варианта, используя формулы и законы по изученной теме материала; допустил несколько существенных ошибок. Заметны пробелы в знании материала;

- 0-9 баллов выставляется студенту, если студент самостоятельно и правильно решил менее половины задач варианта, используя формулы и законы по изученной теме материала; допустил несколько существенных ошибок. Заметны пробелы в знании материала.

4.3. Рейтинг-план дисциплины

Рейтинг-план дисциплины представлен в приложении 2.

5. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины
5.1. Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой
для освоения дисциплины

Основная литература:

1. Егоров-Тисменко Ю.К. Кристаллография и кристаллохимия: учебник. — М.: КДУ, 2005. — 592 с.: ил.
2. Бокий Г.Б. Кристаллохимия. М.: Наука, 1971. 400 с.
3. Сизова О.В., Иванова Н.В., Ванин А.А. Молекулярная симметрия в неорганической и координационной химии: учебное пособие. — 2-е изд., перераб. И доп. — СПб.: Лань, 2016. — 276 с. Доступ к тексту электронного издания возможен через Электронно-библиотечную систему «Лань»: https://e.lanbook.com/book/76285?category_pk=3868#book_name.
4. Адеева Л.Н., Диденко Т.А. Кристаллография и кристаллохимия: практикум для студентов химического факультета. Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского, 2013. 44 с. Доступ к тексту электронного издания возможен через Электронно-библиотечную систему «Лань»: https://e.lanbook.com/book/75422?category_pk=3868#book_name
5. Мухамедзянова А.А. «Симметрия молекул и кристаллов». РИЦ БашГУ, 2008 г. 37 с.

Дополнительная литература:

1. Камышов В.М., Мирошникова Е.Г., Татауров В.П. Строение вещества : учебное пособие 3-е изд., испр. И доп. — СПб.: Лань, 2018. — 236 с. Доступ к тексту электронного издания возможен через Электронно-библиотечную систему «Лань»: <https://e.lanbook.com/book/105983>
2. Строение вещества. Строение кристаллов [Электронный ресурс] : учеб. пособие — Электрон. дан. — Москва: МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2010. — 35 с. — Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/52473> . — Загл. с экрана.
3. Зоркий П.М. Симметрия молекул и кристаллических структур. М. Изд-во МГУ, 1986. 232 с.
4. Попов Г.М., Шафрановский И.И. Кристаллография. М. Высшая школа, 1975. 370 с.
5. Зоркий П.М. Задачник по кристаллохимии и кристаллографии. М.: Изд-во МГУ, 1981. 40с.
6. Кемпбел Дж. Современная общая химия: в 3 т. М. Мир, 1985. Т. 1.
7. Даниэльс Ф., Олберти Р. Физическая химия. М. Мир, 1978. 645 с.
8. Шрайвер Д., Эткинс П. Неорганическая химия: в 2 т. М. Мир, 2004. Т.1.
9. Хаускрофт К., Констебл Э. Современный курс общей химии. М. Мир, 2009 г. Т. 1. 539 с.

5.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» и программного обеспечения, необходимых для освоения дисциплины

Ресурсы информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»:

1. Научная электронная библиотека: <http://www.elibrari.ru>
2. Российская государственная библиотека: <http://www.rsl.ru>
3. Библиотека МГУ им. М.В. Ломоносова: <http://www.lib.msu.su/>
4. Электронно-библиотечная система Znanium.com: <http://znanium.com/index.php/>
5. Библиотека БашГУ: www.bashlib.ru

6. <http://chembaby.com/wp-content/uploads/2014/06/xrd.pdf>
7. <http://chembaby.com/uchebnye-materialy/xim/4-kurs/kristalloximiya/>
8. <http://crystchem.ru/programs.htm>
9. <http://icchair.niic.nsc.ru/files.shtml>
10. <https://studfiles.net/preview/1976359/>

Программное обеспечение:

1. Пакет офисных приложений профессионального уровня OfficeProfessionalPlus 2013 RussianOLPNLAcademicEdition № 0301100003613000104-1 от 17.06.2013 г.
2. Серверная операционная система Windows Server Standard 2012 Russian OLP NL AcademicEdition 2Proc № 0301100003613000104-1 от 17.06.2013 г.
3. Операционная система для персонального компьютера Win SL & Russian OLP NL AcademicEdition Legalization GetGenuine № 0301100003613000104-1 от 17.06.2013 г.
4. Обновление операционной системы для персонального компьютера WindowsProfessional 8 RussianUpgradeOLPNLAcademicEdition № 0301100003613000104-1 от 17.06.2013 г.
5. Desktop Education ALNG LicSAPk OLVS E 1Y Academic Enterprise № 0301100003613000104-1 от 17.06.2013 г.
6. Система электронного тестирования на базе Moodle <http://moodle.bashedu.ru/course/view.php?id=2841> (afferte).

6. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине

Наименование специальных помещений и помещений для самостоятельной работы	Оснащенность специальных помещений и помещений для самостоятельной работы	Перечень лицензионного программного обеспечения. Реквизиты подтверждающего документа
1. учебная аудитория для проведения занятий лекционного типа: аудитория № 208 (учебный корпус, ул. Мингажева, 100)	<i>Лекции</i>	Аудитория № 208 <i>Учебная мебель, доска, Проектор Nec M361X(M361XG) LCD 3600Lm XGA (1024x768) 3000:1, экран ScreenMedia Economy-P 1:1 180x180см Matte White, аудиосистема, ноутбук Samsung</i>
2. учебная аудитория для проведения занятий семинарского типа: аудитория № 208 (учебный корпус, ул. Мингажева, 100)	<i>Практические занятия</i>	Аудитория № 208 <i>Учебная мебель, доска, Проектор Nec M361X(M361XG) LCD 3600Lm XGA (1024x768) 3000:1, экран ScreenMedia Economy-P 1:1 180x180см Matte White, аудиосистема, ноутбук Samsung</i>
3. учебная аудитория для проведения групповых и индивидуальных консультаций: аудитория № 208 (учебный корпус, ул. Мингажева, 100)	<i>Проведение групповых и индивидуальных консультаций</i>	Аудитория № 208 <i>Учебная мебель, доска, Проектор Nec M361X(M361XG) LCD 3600Lm XGA (1024x768) 3000:1, экран ScreenMedia Economy-P 1:1 180x180см Matte White, аудиосистема, ноутбук Samsung</i>
4. учебная аудитория	<i>Проведение текущего</i>	Аудитория № 208

<p>для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации:</p> <p>аудитория № 208, аудитория № 403 (учебный корпус, ул. Мингажева, 100)</p>	<p>контроля и промежуточной аттестации</p>	<p>Учебная мебель, доска, Проектор Nec M361X(M361XG) LCD 3600Lm XGA (1024x768) 3000:1, экран ScreenMedia Economy-P 1:1 180x180см Matte White, аудиосистема, ноутбук Samsung</p> <p>Аудитория № 403 (компьютерный класс)</p> <p>Коммутатор HP V1410-24G Персональный компьютер в комплекте Lenovo ThinkCentre All-In-One (12 шт) Персональный компьютер Моноблок барэбон ECS G11-21ENS6B 21.5 G870/2GDDR31333/320G SATA/DVD+RW (12 шт) Сервер №2 Depo Storm I350Q1 Коммутатор Hewlett Packard HP V1410-8 G.</p>
<p>5. помещения для самостоятельной работы:</p> <p>библиотека, аудитория № 201 (учебный корпус, ул. Мингажева, 100) читальный зал №2 (физмат корпус - учебное)</p>	<p>Самостоятельная работа</p>	<p>Аудитория № 201</p> <p>Pentium G2130/4Гб/500Гб/21,5"/Кл/мышь ПК в компл. Фермо Intel Intel Pentium G2130/4Гб/500Гб/21,5"/Кл/мышь</p> <p>читальный зал №2 (физмат корпус - учебное)</p> <p>Pentium G2130/4Гб/500Гб/21,5"/Кл/мышь - 5 шт.</p> <p>ПК в компл. Фермо Intel. Моноблок №1 Фермо AMD A8-5500 – 5 шт. Программное обеспечение: 1. Учебный класс АРМ Win Machine Договор №263 от 07.12.2012 г. Лицензии бессрочные. 2. Windows 8 Russian. Windows Professional 8 Russian Upgrade. OLP NL Academic Edition (бессрочная лицензия). Договор №104 от 17.06.2013 г. 3. Microsoft Office Standart 2013 Russian. OLP NL Academic Edition (бессрочная лицензия). Договор №114 от 12.11.2014 г. 4. Система централизованного тестирования БаиГУ (Moodle). GNU General Public License</p> <p>1. Windows 8 Russian. Windows Professional 8 Russian Upgrade. Договор № 104 от 17.06.2013 г. Лицензии</p>

		<i>бессрочные</i> <i>2. Microsoft Office Standard 2013</i> <i>Russian. Договор № 114 от 12.11.2014 г.</i> <i>Лицензии бессрочные</i>
--	--	---

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
ФГБОУ ВО «БАШКИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
ИНЖЕНЕРНЫЙ ФАКУЛЬТЕТ

СОДЕРЖАНИЕ РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЫ

дисциплины Структурная химия и кристаллохимия на ___4___ семестр
дневная форма обучени

Вид работы	Объем дисциплины
Общая трудоемкость дисциплины (ЗЕТ / часов)	4/144
Учебных часов на контактную работу с преподавателем:	
лекций	32
практически х/ семинарских	32
лабораторных	
других (групповая, индивидуальная консультация и иные виды учебной деятельности, предусматривающие работу обучающихся с преподавателем) (ФКР)	0,2
Учебных часов на самостоятельную работу обучающихся (СР)	79,8
Учебных часов на подготовку к экзамену/зачету/дифференцированному зачету (Контроль)	

Форма(ы) контроля:

зачет ___4___ семестр

№ п/п	Тема и содержание	Форма изучения материалов: лекции, практические занятия, семинарские занятия, лабораторные работы, самостоятельная работа и трудоемкость (в часах)				Основная и дополнительная литература, рекомендуемая студентам (номера из списка)	Задания по самостоятельной работе студентов	Форма текущего контроля успеваемости (коллоквиумы, контрольные работы, компьютерные тесты и т.п.)
		ЛК	ПР/СЕМ	ЛР	СР			
1	2	3	4	5	6	7	8	9
1.	Понятие о кристалле, кристаллическом веществе и кристаллохимии. Предмет кристаллохимии. Свойства кристаллов. Зависимость свойств кристаллов от их строения.	2	2		4	№1, с. 7-11 №2, с. 7-19	проработка конспекта лекций, учебников, учебных пособий, учебно- методической литературы, включая информационные образовательные ресурсы (электронные учебники, электронные библиотеки и др.) и использование ресурсов Интернет	Коллоквиум
2.	Симметрия молекул. Элементы симметрии: центр симметрии и	6	6		12	№1, с. 12-47 №2, с. 7-165 №6, с. 427	проработка конспекта лекций,	Коллоквиум, контрольная работа

	операция симметрии, ось симметрии и операция вращения, плоскость симметрии и операция отражения, ось несобственного вращения и операции несобственного вращения. Теоремы о сочетаниях операций симметрии – точечные группы. Символы Шенфлиса. Симметрия и дипольный момент. Симметрия и оптическая активность.					№1, с. 48-50	учебников, учебных пособий, учебно-методической литературы, включая информационные образовательные ресурсы (электронные учебники, электронные библиотеки и др.) и использование ресурсов Интернет	
3.	Симметрия кристаллов. Группы трансляций. Параллелепипеды повторяемости. Решетка и структура кристалла. Кристаллографические системы координат. Элементарная ячейка. Вращательная симметрия кристаллов.	6	6		16,4	№1, с. 51-63 №5, с. 7-20 №6, с. 565-572 №1, с. 64-106	проработка конспекта лекций, учебников, учебных пособий, учебно-методической литературы, включая информационные образовательные ресурсы (электронные учебники,	Коллоквиум, контрольная работа

	Возможные и действительные грани кристаллов. Простая форма. Миллеровские индексы. Закон постоянства межгранных углов. Закон целых чисел. Кристаллографические категории и системы (сингонии) кристаллов. 14 решеток Браве.						электронные библиотеки и др.) и использование ресурсов Интернет	
4.	Основы рентгеноструктурного анализа. Дифракция рентгеновских лучей. Методы регистрации дифракционных лучей. Устройство рентгеновской трубки. Условия возникновения «характеристического» и белого излучений. Уравнение Брэгга-Вульфа. Метод порошка (метод	6	6		16	№1, с. 106-117 №3, с. 233-268 №5, с. 20-50 №6, с. 572-583 №1, с. 118-133	проработка конспекта лекций, учебников, учебных пособий, учебно-методической литературы, включая информационные образовательные ресурсы (электронные учебники, электронные библиотеки и др.) и использование ресурсов	Коллоквиум, контрольная работа

	Дебая). Метод вращения монокристалла. Дифракция нейтронов. Основные этапы анализа структуры кристалла. Кубические решетки. Определение индексов граней кубических решеток. Определение параметров решетки.						Интернет	
5.	Химические связи в кристаллах. Физический смысл кристаллохимических радиусов. Типы химической связи в кристаллах. Металлические радиусы. Ионные радиусы. Ковалентные радиусы. Ионные радиусы. Молекулярные кристаллы и жидкости. Ван-дер-Ваальсовы радиусы. Геометрические	4	4		16	№1, с. 161-208 №3, с. 291-310 №7, с. 296-308, с. 313-351 №1, с. 209-218	проработка конспекта лекций, учебников, учебных пособий, учебно-методической литературы, включая информационные образовательные ресурсы (электронные учебники, электронные библиотеки и др.) и использование ресурсов Интернет	Коллоквиум

	пределы устойчивости кристаллических структур. Теория плотнейших упаковок. Симметрия плотноупакованных слоев. Пустоты в плотнейших упаковках. Их расположение и симметрия.							
6.	Изоморфизм и полиморфизм. Типы изоморфизма. Твердые растворы. Условия, необходимые для проявления изоморфизма. Изоморфизм с заполнением пространства. Полиморфизм. Структурная модификация типов полиморфизма. Твердые структуры второго рода. Структуры внедрения.	4	4		8,4	№1, с. 219-234 №2, с. 324-329 №1, с. 234-235	проработка конспекта лекций, учебников, учебных пособий, учебно-методической литературы, включая информационные образовательные ресурсы (электронные учебники, электронные библиотеки и др.) и использование ресурсов Интернет	Коллоквиум
7.	Реальные кристаллы.	4	4		7	№1, с. 254-266	проработка	Коллоквиум

	<p>Точечные дефекты. Дислокации. Мозаичность. Структура поверхности и тонких пленок. Влияние дефектов кристаллов на их свойства.</p>					<p>№6, с. 590-592 №1, с. 262-266</p>	<p>конспекта лекций, учебников, учебных пособий, учебно-методической литературы, включая информационные образовательные ресурсы (электронные учебники, электронные библиотеки и др.) и использование ресурсов Интернет</p>	
	Всего часов:	32	32		79,8			

Рейтинг – план дисциплины

Структурная химия и кристаллохимия

Направление: 04.03.02 Химия, физика и механика материаловкурс 2, семестр 4

Виды учебной деятельности студентов	Балл за конкретное задание	Число заданий за семестр	Баллы	
			Минимальный	Максимальный
Модуль 1: теория симметрии				
Текущий контроль:				25
1. Аудиторная работа: активная работа на семинарах, решение задач	1	5	0	5
2. Тестовый контроль: коллоквиум	10	2	0	20
Рубежный контроль:				25
1. Письменная контрольная работа	25	1	0	25
Модуль 2: систематика и методы исследования кристаллов				
Текущий контроль:				25
1. Аудиторная работа: активная работа на семинарах, решение задач	1	5	0	5
2. Тестовый контроль: коллоквиум	10	2	0	20
Рубежный контроль:				25
1. Письменная контрольная работа	25	1	0	25
Поощрительные баллы:				10
Написание реферата	10	1	0	10
Посещаемость (баллы вычитаются из общей суммы набранных баллов)				
1. Посещение лекционных занятий			0	-6
2. Посещение практических (семинарских, лабораторных занятий)			0	-10
Итоговый контроль				
Зачет				
Всего:				110