

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

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

Физический факультет

УТВЕРЖДЕНО
решением Ученого совета ННГУ
протокол № 13 от 30.11.2022 г.

Рабочая программа дисциплины

Кристаллохимия новых неорганических соединений

Уровень высшего образования
Магистратура

Направление подготовки / специальность
03.04.02 - Физика

Направленность образовательной программы
магистерская программа «Физика конденсированного состояния»

Форма обучения
очная

г. Нижний Новгород

2023 год начала подготовки

1. Место дисциплины в структуре ОПОП

Дисциплина «Кристаллохимия новых неорганических соединений» относится к вариативной части Б1.В блока Б1 «Дисциплины (модули)», является элективной дисциплиной, преподается на втором году обучения, в третьем семестре.

Для освоения данной дисциплины студентам необходимо обладать базовыми знаниями по химии, физике, кристаллографии и материаловедению. Дисциплина ставит своей целью формирование у студентов современных представлений в области исследования кристаллической структуры веществ и кристаллохимического моделирования новых природы химического взаимодействия и основ строения вещества.

Целями освоения дисциплины «Кристаллохимия новых неорганических соединений» являются:

1. Изучение основных подходов к описанию кристаллической структуры неорганических соединений.
2. Рассмотрение особенностей кристаллической структуры основных классов неорганических соединений, являющихся основой современных материалов.
3. Анализ корреляции особенностей кристаллической структуры и возможных приложений материалов.

2. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями и индикаторами достижения компетенций)

Формируемые компетенции (код, содержание компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), в соответствии с индикатором достижения компетенции		Наименование оценочного средства	
	Индикатор достижения компетенции (код, содержание индикатора)	Результаты обучения по дисциплине	Для текущего контроля успеваемости	Для промежуточной аттестации
ПК-4. Способен принимать участие в разработке новых методов и методических подходов в научно-инновационных исследованиях и инженерно-технологической деятельности	<i>ПК-4.1. Знание современных методов и методических подходов в научно-инновационных исследованиях и инженерно-технологической деятельности</i> <i>ПК-4.2. Умение совершенствовать и внедрять новые методы и методики</i> <i>ПК-4.3. Навыки разработок современных методов и методических подходов в научно-инновационных исследованиях и инженерно-технологической деятельности</i>	(ПК-4) Знать современные подходы к изучению связи состав-строение -свойство для современных функциональных материалов; знать основные приемы кристаллохимического моделирования неорганических материалов; (ПК-4) Уметь использовать современное оборудование для проведения исследований структуры и свойств современных твердотельных материалов; (ПК-4) Владеть навыками разработки новых методов и методических подходов в научно-инновационных исследованиях и инженерно-технологической деятельности; владеть экспериментальными	Индивидуальные собеседования, лабораторный практикум	Индивидуальные практические задания, экзамен

		навыками получения (синтеза) неорганических соединений и материалов на их основе (порошков, керамик), а также их физико-химического исследования; владеть навыками работы с современными исследовательским оборудованием, предназначенным для характеристики нано- и ультрадисперсных порошков и керамик.		
--	--	---	--	--

3. Структура и содержание дисциплины

3.1 Трудоемкость дисциплины

	очная
Общая трудоемкость, з.е.	4
Часов по учебному плану	144
в том числе	
аудиторные занятия (контактная работа):	50
- занятия лекционного типа	16
- занятия семинарского типа (практические занятия / лабораторные работы)	32
- КСР	2
самостоятельная работа	94
Промежуточная аттестация	45 экзамен

3.2. Содержание дисциплины

(структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и виды учебных занятий)

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины	Всего (часы)	в том числе				Самостоятельная работа в течение семестра, часы
		контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем) в течение семестра, часы, из них				
		Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа	Занятия лабораторного типа	Всего	
Тема 1. Подходы к описанию кристаллической структуры веществ.	12	2	0	2	4	8

Тема 2. Структурный тип апатита.	21	4	4	4	12	9
Тема 3. Структурные типы оксидных соединений	20	4	4	4	12	8
Тема 4. Полиморфные превращения в неорганических соединениях.	14	2	2	2	6	8
Тема 5. Кристаллохимическое моделирование соединений.	14	2	2	2	6	8
Тема 6. Современное программное обеспечение для проведения анализа кристаллической структуры.	16	2	4	2	8	8
В т.ч. текущий контроль	2	2				
Промежуточная аттестация – экзамен						

4. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся

Самостоятельная работа студентов предусматривает выполнение домашних заданий, решение задач, изучение рекомендованной литературы, использование электронных ресурсов международных научных поисковых систем и подготовку к зачету.

Оценочные средства для контроля текущей успеваемости включают в себя устный опрос на занятиях в процессе лекций, активность в обсуждении качественных вопросов, решение задач на практических занятиях.

5. Фонд оценочных средств для текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)

5.1. Описание шкал оценивания результатов обучения по дисциплине

Экзамен	
Превосходно	Превосходная подготовка с очень незначительными погрешностями. Исчерпывающее и логически строгое изложение всех разделов дисциплины. Владение материалом позволяет быстро справиться с видоизмененным заданием. Успешное решение любых типов практических заданий.
Отлично	Подготовка, уровень которой существенно выше среднего с некоторыми ошибками. Твердое знание всех разделов дисциплины. Допускаются неточности, нарушения в последовательности изложения материала. Владение необходимыми приемами и способами решения практических заданий.
Очень хорошо	Хорошая подготовка с рядом заметных недочетов. Твердое знание основных разделов дисциплины. Владение необходимыми приемами и способами решения основных типов практических заданий.
Хорошо	В целом, хорошая подготовка, но со значительными ошибками. Твердое знание основных разделов дисциплины. Владение необходимыми приемами и способами решения практических заданий.

Удовлетворительно	Подготовка, удовлетворяющая минимальным требованиям. Знания основного содержания разделов дисциплины, допускаются грубые неточности, неправильные формулировки, нарушения в последовательности изложения материала. Имеющихся знаний достаточно для освоения дисциплин последующих курсов. Допускаются значительные ошибки при выполнении практических заданий.
Неудовлетворительно	Необходима дополнительная подготовка для успешного прохождения испытания. Незнание значительной части основного содержания разделов дисциплины. Имеющихся знаний недостаточно для освоения дисциплин последующих курсов.
Плохо	Подготовка совершенно недостаточная. Отсутствуют знания большей части основного содержания разделов дисциплины. Имеющихся знаний совершенно недостаточно для освоения дисциплин последующих курсов.

6.2. Процедуры и критерии оценивания результатов обучения по дисциплине

Для оценивания результатов обучения в виде знаний используются следующие процедуры и технологии:

– индивидуальное собеседование (промежуточная аттестация).

Для оценивания результатов обучения в виде умений и владений используются следующие процедуры и технологии: практические контрольные задания. Типы практических контрольных заданий:

– выполнение практических заданий (текущий контроль, промежуточная аттестация).

Критерии ответа студента на экзамене

Оценка «отлично» – Ответ полный и правильный, на основании изученной теории; материал изложен в определенной логической последовательности, грамотный научный язык; ответ самостоятельный и полностью выполнены индивидуальные практические задания.

Оценка «хорошо» – Ответ полный и правильный, на основании изученной теории; материал изложен в определенной логической последовательности при этом допущены две–три несущественные ошибки, исправленные по требованию преподавателя и правильно; полностью выполнены индивидуальные практические задания.

Оценка «удовлетворительно» – Ответ полный, но при этом допущена существенная ошибка или неполный, несвязный ответ и выполнены индивидуальные практические задания.

Оценка «неудовлетворительно» – Ответ обнаруживает непонимание студентом основного содержания учебного материала или допущены существенные ошибки, которые не могут быть исправлены при наводящих вопросах преподавателя, не выполнены индивидуальные практические задания

6.3. Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки результатов обучения

6.3.1 Примеры практических заданий для практических занятий, самостоятельной работы обучающихся, проведения текущего контроля и промежуточной аттестации:

Состав лабораторных работ дисциплины:

1. Кристаллохимическое моделирование состава и структурного типа неорганического соединения.
2. Синтез смоделированного соединения.
3. Физико-химическое исследование свойств полученного вещества.
4. Получение керамического материала на основе синтезированного соединения.
5. Исследование физико-механических свойств полученного материала.

6.3.2. Вопросы для итогового контроля сформированности компетенции:

1. Кристаллы, их основные свойства, кристаллические классы, системы, сингонии, категории. Типы решеток Бравэ.
2. Пространственная решетка и структура кристаллов.
3. Важнейшие структурные типы простых веществ, бинарных и тернарных соединений
4. Полиэдрический метод изображения структур.
5. Метод полиэдров Вороного-Дирихле.
6. Теория графов в применении к описанию структур химических соединений.
7. Координационные, цепочечные, островные, слоистые и каркасные структуры.
8. Структурные классы. Структуры со статистической и неполной упорядоченностью.
9. Структурная гомология и политипия.
10. Структурный тип апатита.
11. Анализ искажения структуры типа апатита
12. Структурный тип шпинели
13. Структурный тип пироклора
14. Структурный тип перовскита
15. Слоистые перовскиты. Классификация.
16. Структурный тип голландита
17. Структурный тип NZP
18. Факторы толерантности кристаллических структур оксидных соединений
19. Основы кристаллохимического моделирования и дизайна материалов
20. Основные этапы анализа структуры кристалла.
21. Индексирование рентгенограмм кристаллов высшей и средней категорий.
22. Индексирование рентгенограмм методом подбора изоструктурного соединения.
23. Получение и взаимодействие рентгеновских лучей с веществом.
24. Рентгеноструктурный анализ
25. Рентгенофазовый анализ.
26. Терморентгенография.
27. Области применения материалов на основе соединений различных структурных типов.
28. Построение кристаллической структуры по данным рентгеноструктурного анализа с помощью программного обеспечения ATOMS.
29. Проведение анализа невалентных взаимодействий атомов с помощью программного комплекса TOPAS.
30. Проведение уточнения кристаллической структуры с помощью полнопрофильного рентгеновского анализа (метод Ритвельда) в программном комплексе TOPOS.
31. Изучение термических деформаций кристаллических структур методом терморентгенографии с использованием программного комплекса DTC.

6.4. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания

Положение «О проведении текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации обучающихся в ННГУ», утвержденное приказом ректора ННГУ от 13.02.2014 №55-ОД.

Положение о фонде оценочных средств, утвержденное приказом ректора ННГУ от 10.06.2015 №247-ОД.

7. Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля)

Лекционная (вместимость 20 человек) аудитория, оборудованная мультимедийным проектором, ноутбуком и выходом в сеть Интернет, а также доской и мелом (для разбора частных вопросов и детализации теоретических аспектов дисциплины, а также решения практических задач).

Лаборатория (вместимость 10 человек), оснащенная вытяжками, печами, весами для проведения лабораторных работ.

Программа составлена в соответствии с требованиями федерального государственного образовательного стандарта высшего образования по направлению подготовки 03.04.02 Физика.

Автор(ы):

к.х.н., доцент Е.Н. Буланов.

Рецензенты(ы):

д.ф.-м.н., проф. В.Н. Чувильдеев.

Зав. каф. кристаллографии и экспериментальной физики _____

Программа одобрена на заседании методической комиссии от 17.11.2022, протокол № б/н.