

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

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

Химический факультет

УТВЕРЖДЕНО

решением президиума Ученого совета ННГУ

протокол № 1 от 16.01.2024 г.

Рабочая программа дисциплины

Кристаллохимия

Уровень высшего образования

Бакалавриат

Направление подготовки / специальность

04.03.01 - Химия

Направленность образовательной программы

Химия и материаловедение

Форма обучения

очная

г. Нижний Новгород

2024 год начала подготовки

1. Место дисциплины в структуре ОПОП

Дисциплина Б1.О.03.12 Кристаллохимия относится к обязательной части образовательной программы.

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
ОПК-1: Способен анализировать и интерпретировать результаты химических экспериментов, наблюдений и измерений	ОПК-1.1: Систематизирует и анализирует результаты химических экспериментов, наблюдений, измерений, а также результаты расчетов свойств веществ и материалов ОПК-1.2: Предлагает интерпретацию результатов собственных экспериментов и расчетно-теоретических работ с использованием теоретических основ традиционных и новых разделов химии ОПК-1.3: Формулирует заключения и выводы по результатам анализа литературных данных, собственных экспериментальных и расчетно-теоретических работ химической направленности	ОПК-1.1: Владеть алгоритмом составления приводимого представление в заданном базисе и нахождения его разложение на неприводимые представления . Уметь находить элементы симметрии пространственных геометрических фигур и молекул; характеризовать кристалл по его внешней форме, применять теоремы о сочетании закрытых элементов симметрии для поиска производных элементов симметрии, Знать элементы и операции симметрии неперiodических фигур, типы кристаллических решеток Бравэ ОПК-1.2: Владеть навыками определения точечных групп симметрии молекул. Уметь выполнять интерпретацию полученного разложения приводимого представления на неприводимые. Знать внешний вид и название простых форм кристаллов.	Опрос	Экзамен: Контрольные вопросы

		<p>ОПК-1.3:</p> <p>Владеть навыками описания элементарной ячейки кристалла исходя из обозначения пространственной группы.</p> <p>Уметь определять тип гибридизации центрального атома, число нормальных колебания и возможность электронного перехода, пользуясь таблицами характеров точечных групп,</p> <p>Знать основные понятия геометрической кристаллографии, систему обозначений точечных групп по Шёнфлису, Герману-Могену, систематику кристаллических структур по сингониям, категориям и классам.</p>		
<p>ОПК-6: Способен представлять результаты своей работы в устной и письменной форме в соответствии с нормами и правилами, принятыми в профессиональном сообществе</p>	<p>ОПК-6.1: Представляет результаты работы в виде отчета по стандартной форме на русском языке</p> <p>ОПК-6.2: Представляет информацию химического содержания с учетом требований библиографической культуры</p> <p>ОПК-6.3: Представляет результаты работы в виде тезисов доклада на русском и английском языке в соответствии с нормами и правилами, принятыми в химическом сообществе</p> <p>ОПК-6.4: Готовит презентацию по теме работы и представляет ее на русском и английском языках</p>	<p>ОПК-6.1:</p> <p>Владеть навыками построения стереографических проекций элементов симметрии простых форм кристаллов.</p> <p>Уметь графическим способом изобразить элементы симметрии</p> <p>Знать способы обозначения элементов симметрии на рисунках, чертежах и проекциях.</p> <p>ОПК-6.2:</p> <p>Владеть навыками описания точечных и пространственных групп в соответствии с международной символикой</p> <p>Уметь работать с международными кристаллографическими таблицами</p> <p>Знать основные требования библиографического описания литературных источников</p> <p>ОПК-6.3:</p>	Опрос	<p>Экзамен:</p> <p>Контрольные вопросы</p>

		<p>Владеть основными понятиями и определениями кристаллохимии</p> <p>Уметь грамотно и последовательно излагать материал.</p> <p>Знать структуру, используемую при составлении научного текста</p> <p>ОПК-6.4:</p> <p>Владеть навыками работы с современным компьютерным программным обеспечением.</p> <p>Уметь наглядно представлять теоретический материал</p> <p>Знать международное обозначение элементов симметрии, точечных групп симметрии.</p>		
--	--	---	--	--

3. Структура и содержание дисциплины

3.1 Трудоемкость дисциплины

	очная
Общая трудоемкость, з.е.	5
Часов по учебному плану	180
в том числе	
аудиторные занятия (контактная работа):	
- занятия лекционного типа	32
- занятия семинарского типа (практические занятия / лабораторные работы)	16
- КСР	2
самостоятельная работа	94
Промежуточная аттестация	36
	Экзамен

3.2. Содержание дисциплины

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

Наименование разделов и тем дисциплины	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 (практические занятия/ лабора	Всего	

			торные работы), часы		
	0 Ф 0	0 Ф 0	0 Ф 0	0 Ф 0	0 Ф 0
Тема 1 Элементы и операции симметрии	20	4	2	6	14
Тема 2 Точечные группы симметрии	27	6	3	9	18
Тема 3 Химические аспекты симметрии	37	10	5	15	22
Тема 4 Внешняя форма кристалла	29	6	3	9	20
Тема 5 Внутреннее строение кристалла	29	6	3	9	20
Аттестация	36				
КСР	2			2	
Итого	180	32	16	50	94

Содержание разделов и тем дисциплины

Тема 1 Элементы и операции симметрии
Тема 2 Точечные группы симметрии
Тема 3 Химические аспекты симметрии
Тема 4 Внешняя форма кристалла
Тема 5 Внутреннее строение кристалла

4. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся

Самостоятельная работа обучающихся включает в себя подготовку к контрольным вопросам и заданиям для текущего контроля и промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины приведенным в п. 5.

А.А.Сибиркин. Конспекты лекций по кристаллохимии. Рукопись.

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

5.1 Типовые задания, необходимые для оценки результатов обучения при проведении текущего контроля успеваемости с указанием критериев их оценивания:

5.1.1 Типовые задания (оценочное средство - Опрос) для оценки сформированности компетенции ОПК-1:

1. Пользуясь таблицей характеров неприводимых представлений групп, перечислите возможные типы гибридизации атомных орбиталей центрального атома в конкретной молекуле или ионе (молекула и центральный атом в ней указываются преподавателем).
2. Пользуясь таблицей характеров неприводимых представлений групп, предскажите возможность электронного перехода из одного состояния в другое состояние в конкретной молекуле или ионе (симметрия исходного и конечного состояний и химическая формула молекулы или иона указываются преподавателем).

3. Пользуясь таблицей характеров неприводимых представлений групп, установите число характеристических частот колебаний, активных в ИК- и КР-спектрах конкретной молекулы или иона, и число совпадающих мод (химическая формула молекулы или иона указываются преподавателем).

5.1.2 Типовые задания (оценочное средство - Опрос) для оценки сформированности компетенции ОПК-6:

1. Охарактеризуйте кристалл по его внешней форме. Приведите название простой формы. Определите точечную группу, соответствующую голоэдрическому классу симметрии. Приведите обозначения точечной группы по Шенфлису и Герману-Могену, формулу симметрии, сингонию и категорию. Изобразите стереографическую проекцию элементов симметрии этой формы.

2. Кристаллическая решетка некоторого кристалла характеризуется заданной пространственной группой. Напишите, что обозначает каждый из символов в этой записи. Назовите тип решетки Бравэ, сингонию и точечную группу, соответствующую простой форме этой пространственной группы. Укажите, какие параметры элементарной ячейки принимают тривиальные и нетривиальные значения, какие из них равны друг другу (пространственная группа указывается преподавателем).

Критерии оценивания (оценочное средство - Опрос)

Оценка	Критерии оценивания
зачтено	знает основные положения материала дисциплины
не зачтено	не знает значительной части материала дисциплины

5.2. Описание шкал оценивания результатов обучения по дисциплине при промежуточной аттестации

Шкала оценивания сформированности компетенций

Уровень сформированности компетенций (индикатора достижения компетенций)	плохо	неудовлетворительно	удовлетворительно	хорошо	очень хорошо	отлично	превосходно
	не зачтено		зачтено				
<u>Знания</u>	Отсутствие знаний теоретического материала. Невозможность оценить полноту знаний вследствие отказа обучающегося от	Уровень знаний ниже минимальных требований. Имели место грубые ошибки	Минимально допустимый уровень знаний. Допущено много негрубых ошибок	Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки. Допущено несколько негрубых	Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки. Допущено несколько несуществе	Уровень знаний в объеме, соответствующем программе подготовки. Ошибок нет.	Уровень знаний в объеме, превышающем программу подготовки.

	ответа			ошибок	нных ошибок		
<u>Умения</u>	Отсутствие минимальных умений. Невозможность оценить наличие умений вследствие отказа обучающегося от ответа	При решении стандартных задач не продемонстрированы основные умения. Имели место грубые ошибки	Продемонстрированы основные умения. Решены типовые задачи с негрубыми ошибками. Выполнены все задания, но не в полном объеме	Продемонстрированы все основные умения. Решены все основные задачи с негрубыми ошибками. Выполнены все задания в полном объеме, но некоторые с недочетами	Продемонстрированы все основные умения. Решены все основные задачи. Выполнены все задания в полном объеме, но некоторые с недочетами	Продемонстрированы все основные умения. Решены все основные задачи с отдельными несущественными недочетами, выполнены все задания в полном объеме	Продемонстрированы все основные умения. Решены все основные задачи. Выполнены все задания, в полном объеме без недочетов
<u>Навыки</u>	Отсутствие базовых навыков. Невозможность оценить наличие навыков вследствие отказа обучающегося от ответа	При решении стандартных задач не продемонстрированы базовые навыки. Имели место грубые ошибки	Имеется минимальный набор навыков для решения стандартных задач с некоторыми недочетами	Продемонстрированы базовые навыки при решении стандартных задач с некоторыми недочетами	Продемонстрированы базовые навыки при решении стандартных задач без ошибок и недочетов	Продемонстрированы навыки при решении нестандартных задач без ошибок и недочетов	Продемонстрирован творческий подход к решению нестандартных задач

Шкала оценивания при промежуточной аттестации

Оценка		Уровень подготовки
зачтено	превосходно	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «превосходно», продемонстрированы знания, умения, владения по соответствующим компетенциям на уровне выше предусмотренного программой
	отлично	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «отлично».
	очень хорошо	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «очень хорошо»
	хорошо	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «хорошо».
	удовлетворительно	Все компетенции (части компетенций), на формирование которых направлена дисциплина, сформированы на уровне не ниже «удовлетворительно», при этом хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «удовлетворительно»
не зачтено	неудовлетворительно	Хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «неудовлетворительно».
	плохо	Хотя бы одна компетенция сформирована на уровне «плохо»

5.3 Типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки результатов обучения на промежуточной аттестации с указанием критериев их оценивания:

5.3.1 Типовые задания (оценочное средство - Контрольные вопросы) для оценки сформированности компетенции ОПК-1

1. Пользуясь таблицей характеров неприводимых представлений групп, перечислите возможные типы гибридизации атомных орбиталей центрального атома в конкретной молекуле или ионе (молекула и центральный атом в ней указываются преподавателем).
2. Пользуясь таблицей характеров неприводимых представлений групп, предскажите возможность электронного перехода из одного состояния в другое состояние в конкретной молекуле или ионе (симметрия исходного и конечного состояний и химическая формула молекулы или иона указываются преподавателем).
3. Пользуясь таблицей характеров неприводимых представлений групп, установите число характеристических частот колебаний, активных в ИК- и КР-спектрах конкретной молекулы или иона, и число совпадающих мод (химическая формула молекулы или иона указываются преподавателем).

5.3.2 Типовые задания (оценочное средство - Контрольные вопросы) для оценки сформированности компетенции ОПК-6

1. Охарактеризуйте кристалл по его внешней форме. Приведите название простой формы. Определите точечную группу, соответствующую голоэдрическому классу симметрии. Приведите обозначения точечной группы по Шенфлису и Герману-Могену, формулу симметрии, сингонию и категорию. Изобразите стереографическую проекцию элементов симметрии этой формы.
2. Кристаллическая решетка некоторого кристалла характеризуется заданной пространственной группой. Напишите, что обозначает каждый из символов в этой записи. Назовите тип решетки Бравэ, сингонию и точечную группу, соответствующую простой форме этой пространственной группы. Укажите, какие параметры элементарной ячейки принимают тривиальные и нетривиальные значения, какие из них равны друг другу (пространственная группа указывается преподавателем).

Критерии оценивания (оценочное средство - Контрольные вопросы)

Оценка	Критерии оценивания
превосходно	выполнено более 90 % задания
отлично	выполнено от 80 % до 89 % задания
очень хорошо	не используется
хорошо	выполнено от 60 % до 79 % задания
удовлетворительно	выполнено от 40 % до 59 % задания

Оценка	Критерии оценивания
неудовлетворительно	выполнено менее 39 % задания
плохо	не используется

6. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины (модуля)

Основная литература:

1. Бокий Георгий Борисович. Кристаллохимия / АН СССР, Ин-т радиотехники и электроники. - Изд. 3-е, перераб. и доп. - М. : Наука, 1971. - 400 с., 1 л. табл. : ил. - 2.34., 41 экз.
2. Бокий Г. Б. Введение в кристаллохимию. - М. : Изд-во Моск. ун-та, 1954. - 491 с., 2 л. табл. : ил. - Шмуцтит.: К 200-летию Московского университета. 1755-1955. - 27.90., 2 экз.
3. Шаскольская Марианна Петровна. Кристаллография : [учеб. пособие для вузов]. - 2-е изд., перераб. и доп. - М. : Высшая школа, 1984. - 375 с., 4 л. ил. : ил. - 1.40., 96 экз.
4. Урусов Вадим Сергеевич. Теоретическая кристаллохимия : [учеб. для геохим. и хим. специальностей вузов]. - М. : Изд-во МГУ, 1987. - 272, [3] с. : ил. - 0.85., 111 экз.
5. Драго Р. Физические методы в химии. Ч. 1 / пер. с англ. Соловьянова А. А. ; под ред. Реутова О.А. - М. : Мир, 1981. - 419 с. - 2.20., 3 экз.
6. Эткинс П. Физическая химия : [в 2 т.]. [Т.] 2 / пер. с англ. К. П. Бутина. - М. : Мир, 1980. - 584 с. : ил. - 2.90., 3 экз.
7. Зоркий Петр Маркович. Симметрия молекул и кристаллических структур / под ред. М. А. Порай-Кошица. - М. : Изд-во МГУ, 1986. - 231, [1] с. : ил. - 2.60., 2 экз.
8. Кребс Г. Основы кристаллохимии неорганических соединений / пер. с нем. Э. Г. Жукова [и др.] ; под ред. Н. П. Лужной и А. А. Левина. - М. : Мир, 1971. - 304 с. : с черт. - 1.41., 4 экз.

Дополнительная литература:

1. Шаскольская Марианна Петровна. Кристаллография : [учеб. для вузов]. - М. : Высшая школа, 1976. - 391 с. : ил. - 1.52., 68 экз.
2. Шаскольская Марианна Петровна. Очерки о свойствах кристаллов. - М. : Наука, 1978. - 191 с. : ил. - 0.30., 1 экз.
3. Урусов Вадим Сергеевич. Энергетическая кристаллохимия / АН СССР, Ин-т геохимии и аналит. химии им. В. И. Вернадского. - М. : Наука, 1975. - 335 с. : граф. - 2.38., 1 экз.
4. Маянц Лазарь Соломонович. Теория и расчет колебаний молекул / АН СССР, Ин-т элементоорганич. соединений. - М. : Изд-во АН СССР, 1960. - 526 с. : черт. - 0.60., 3 экз.
5. Зоркий Петр Маркович. Симметрия молекул и кристаллов / под ред. М. А. Порай-Кошица. - М. : Изд-во МГУ, 1979. - 176 с. : ил. - 0.50., 3 экз.

Программное обеспечение и Интернет-ресурсы (в соответствии с содержанием дисциплины):

Не используются

7. Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля)

Учебные аудитории для проведения учебных занятий, предусмотренных образовательной программой, оснащены мультимедийным оборудованием (проектор, экран), техническими средствами обучения, специализированным оборудованием: Набор моделей простых форм кристаллов, набор шаро-стержневых моделей внутреннего строения кристаллов

Помещения для самостоятельной работы обучающихся оснащены компьютерной техникой с возможностью подключения к сети "Интернет" и обеспечены доступом в электронную информационно-образовательную среду.

Программа составлена в соответствии с требованиями ОС ННГУ по направлению подготовки/специальности 04.03.01 - Химия.

Автор(ы): Сибиркин Алексей Алексеевич, доктор химических наук, доцент.

Заведующий кафедрой: Пермин Дмитрий Алексеевич, кандидат химических наук.

Программа одобрена на заседании методической комиссии от 28.09.2023 г., протокол № 1.