

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ
ФЕДЕРАЦИИ

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

УТВЕРЖДЕНО
решением Ученого совета ННГУ
протокол от
«31» мая 2023 г. №6

Рабочая программа дисциплины

Физическая кристаллохимия

(наименование дисциплины (модуля))

Уровень высшего образования

бакалавриат

(бакалавриат / магистратура / специалитет)

Направление подготовки / специальность

03.03.02 Физика

(указывается код и наименование направления подготовки / специальности)

Направленность образовательной программы

профиль "Теоретическая физика"

(указывается профиль / магистерская программа / специализация)

Квалификация (степень)

бакалавр

(бакалавр / магистр / специалист)

Форма обучения

очная

(очная / очно-заочная / заочная)

Год начала обучения

2022

(для обучающихся какого года начала обучения разработана Рабочая программа)

Нижний Новгород

1. Место и цели дисциплины в структуре ОПОП

Дисциплина «Физическая кристаллохимия» относится к вариативной части Б1.В.ДВ блока Б1 «Дисциплины (модули)», является элективной дисциплиной, преподается на третьем году обучения, в шестом семестре.

Целью освоения дисциплины «Физическая кристаллохимия» является:

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

2. Структура и содержание дисциплины

Объем дисциплины «Физическая кристаллохимия» составляет 7 зачетных единицы, всего 252 часа, из которых 66 часов составляет контактная работа обучающегося с преподавателем (2 часа – мероприятия промежуточной аттестации; 16 часов занятия лекционного типа, 48 часов занятия семинарского типа (практические занятия), в том числе 2 часа – мероприятия текущего контроля успеваемости), 186 часов составляет самостоятельная работа обучающегося (132 часа самостоятельная работа в течение семестра, 54 часа самостоятельная работа при подготовке к промежуточной аттестации).

Содержание дисциплины «Физическая кристаллохимия»

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	
<p>1. Основные задачи кристаллохимии.</p> <p>История науки (конец XVIII - начало XX вв.). Основные задачи кристаллохимии, ее роль в решении физических проблем.</p>	17	1	3	—	4	13
<p>2. Свойства атомов, важные для кристаллохимии.</p> <p>Строение электронных оболочек. Орбитальные радиусы атомов и ионов. Потенциалы ионизации и сродство к электрону. Поляризуемость атомов, ионов.</p>	21	2	6	—	8	13
<p>3. Химическая связь в кристаллах.</p> <p>Основные типы химической связи: ионная, ковалентная, металлическая, ван-дер-ваальсова, водородная.</p>	21	2	6	—	8	13
<p>4. Конкретные кристаллические структуры.</p> <p>Основные термины кристаллохимии. Элементарная ячейка (ячейка Бравэ). Число формульных единиц. Молекулярные и координационные соединения. Координационное число и координационный многогранник. Принципы теории плотнейшей упаковки. Интерпретация простейших структур металлов, благородных газов и ионных кристаллов в терминах плотнейших упаковок. Изображение структурных типов с помощью полиэдров. Основные структурные</p>	21	2	6	—	8	13

типы.						
5. Размеры атомов в кристаллах. Атомные радиусы. Ван-дер-ваальсовы радиусы. Ионные радиусы. Геометрические пределы устойчивости ионных структур. Зависимость ионных радиусов от заряда, координационного числа.	21	2	6	—	8	13
6. Химический состав и структура кристалла. Основные категории кристаллохимии — морфотропия, полиморфизм и изоморфизм. Закономерности морфотропии и их кристаллохимическая природа. Полиморфизм. Полиморфизм как общее свойство кристаллических веществ. История открытия полиморфизма как явления. Классификация полиморфизма. Полиморфные переходы первого и второго рода. Структурные аспекты явления полиморфизма.	21	2	6	—	8	13
7. Политипия. Отличие политипии от полиморфизма. Способы описания политипных структур. Изоморфизм. Изоморфизм и изоструктурность. Изодиморфизм. Классификация изоморфизма, его соотношение с твердыми растворами. Классические правила изоморфизма Гольдшмидта-Ферсмана. Изоморфизм как функция температуры и давления. Ряды Вернадского. Распад изоморфных смесей при понижении температуры и повышении давления. Изоморфизм в процессах кристаллизации. Правила "допуска" и "захвата" Гольдшмидта.	21	2	6	—	8	13
8. Связь физико-химических свойств кристаллов с их атомной структурой. Оптические свойства. Магнетизм. Электрические свойства. Механические свойства (твердость и ковкость). Спайность и отдельность. Зависимость физико-химических	17	1	3	—	4	13

свойств кристаллов от характера химической связи и энергии взаимодействия атомов. Термическая устойчивость (температуры плавления или разложения). Механическая устойчивость, упругие свойства, сжимаемость. Растворимость.						
9. Кристаллохимия органических соединений.	18	1	3	—	4	14
10. Кристаллохимия боратов, силикатов.	18	1	3	—	4	14
В т.ч. текущий контроль	2	2				—
Промежуточная аттестация – экзамен						

3. Образовательные технологии

- 1) Чтение лекций;
- 2) сопровождение лекций написанием и выводом формул, построением графиков, изображением рисунков на доске;
- 3) методика «вопросы и ответы»;
- 4) выполнение практического задания у доски;
- 5) индивидуальная работа над практическим заданием;
- 6) работа в парах над практическим заданием;
- 7) работа в малых группах над практическим заданием;
- 8) методика «мозговой штурм».

4. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся

Самостоятельная работа обучающихся предполагает изучение конспектов лекций, выделенных разделов основной литературы, а также дополнительной литературы, выполнение практических заданий, отвечающих изучаемым разделам дисциплины, подготовку к промежуточной аттестации.

Перечень основной и дополнительной литературы для самостоятельного изучения приведен в п. 7 настоящей Рабочей программы дисциплины.

Контрольные вопросы для промежуточной аттестации, примеры практических заданий приведены в п. 6.3 настоящей Рабочей программы дисциплины.

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

Формируемые компетенции	Планируемые результаты обучения по дисциплине
-------------------------	---

<p>ОПК-3</p> <p>способность использовать базовые теоретические знания фундаментальных разделов общей и теоретической физики для решения профессиональных задач</p>	<p>(ОПК-3) Знать основные разделы общей и теоретической физики, кристаллографии, необходимые для описания структуры и физических свойств кристаллов.</p> <p>(ОПК-3) Уметь применять теоретическую базу для анализа получаемых результатов.</p> <p>(ОПК-3) Владеть навыками использования на практике знаний, полученных при освоении отдельных разделов общей и теоретической физики, кристаллографии, для решения профессиональных задач.</p>
<p>ПК-1</p> <p>способность использовать специализированные знания в области физики для освоения профильных физических дисциплин</p>	<p>(ПК-1) Знать фундаментальные понятия кристаллохимии, зависимости между составом, строением и свойствами кристаллов.</p> <p>(ПК-1) Уметь объяснить связь физических свойств кристаллов с их структурой, самостоятельно изучать кристаллохимические особенности твердых тел.</p> <p>(ПК-1) Владеть навыками теоретического исследования физических и химических свойств кристаллических твердых тел.</p>
<p>ПК-4</p> <p>способность применять на практике профессиональные знания и умения, полученные при освоении профильных физических дисциплин</p>	<p>(ПК-4) Знать теоретические модели, используемые в физической кристаллохимии для описания пространственного строения кристаллов, для выявления зависимостей между их составом, строением и свойствами, основные компьютерные базы кристалло-структурных данных.</p> <p>(ПК-4) Уметь осуществлять поиск и использовать кристаллоструктурную информацию для определения основных особенностей строения кристаллических веществ, объяснить связь физических свойств кристаллов с их структурой.</p> <p>(ПК-4) Владеть терминологией физической кристаллохимии, структурной систематикой неорганических кристаллов, стандартными методами описания кристаллических структур, приемами кристаллохимического прогноза, навыками теоретического исследования физических и химических свойств кристаллических твердых тел.</p>

6. Фонд оценочных средств для промежуточной аттестации по дисциплине

6.1. Описание шкал оценивания результатов обучения по дисциплине

Промежуточной аттестацией для дисциплины «Физическая кристаллохимия» является **экзамен**.

По итогам экзамена выставляется оценка по семибалльной шкале: оценки «Плохо» и «Неудовлетворительно» означают отсутствие аттестации, оценки «Удовлетворительно», «Хорошо», «Очень хорошо», «Отлично» и «Превосходно» выставляются при успешном прохождении аттестации.

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).

Контрольные вопросы для индивидуального собеседования представлены в п. 6.3 настоящей Рабочей программы дисциплины.

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

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

Примеры практических заданий для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации представлены в п. 6.3 настоящей Рабочей программы дисциплины.

Критериями оценивания являются полнота знаний, наличие умений и владений (навыков), перечисленных в п. 5 настоящей Рабочей программы дисциплины.

«Плохо» – обучающийся не продемонстрировал никаких знаний об основных теоретических разделах курса, не показал никаких умений и навыков выполнения практических заданий;

«Неудовлетворительно» – обучающийся не продемонстрировал представления об основных теоретических разделах курса, не показал минимально допустимый уровень умений и навыков выполнения практических заданий;

«Удовлетворительно» – обучающийся продемонстрировал изложение формулировок основных теоретических положений курса и успешно показал умения и навыки выполнения практических заданий базового уровня сложности;

«Хорошо» – обучающийся продемонстрировал связное изложение основных теоретических положений курса и успешно показал умения и навыки выполнения стандартных практических заданий;

«Очень хорошо» – обучающийся продемонстрировал связное изложение практически всех теоретических положений курса и успешно показал умения и навыки выполнения стандартных практических заданий;

«Отлично» – обучающийся продемонстрировал связное изложение всех теоретических положений курса и успешно показал умения и навыки выполнения практических заданий повышенного уровня сложности;

«Превосходно» – обучающийся продемонстрировал уровень знаний в объеме, превышающем стандартную программу подготовки, и продемонстрировал творческий подход к выполнению практических заданий повышенного уровня сложности.

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

6.3.1. При проведении промежуточной аттестации обучающимся предлагаются следующие контрольные вопросы, охватывающие программу дисциплины «Физическая кристаллохимия»:

- Основные понятия кристаллохимии. Кристаллохимические закономерности в периодической системе элементов Менделеева.
- Ионная связь в кристаллах. Энергия решетки ионных кристаллов. Физические свойства ионных кристаллов.
- Ковалентная связь в кристаллах. Энергия ковалентной связи. Физические свойства кристаллов с ковалентной связью.
- Металлическая связь в кристаллах. Энергия металлической связи. Физические свойства кристаллов с ковалентной связью.
- Ван-дер-Ваальсова связь. Энергия Ван-дер-Ваальсовых сил. Физические свойства кристаллов с Ван-дер-Ваальсовой связью.
- Двухслойная плотнейшая упаковка. Симметрия. Пустоты в плотнейшей упаковке. Коэффициент упаковки.
- Трехслойная плотнейшая упаковка. Симметрия. Пустоты в плотнейшей упаковке. Коэффициент упаковки.
- Многослойные шаровые упаковки. Симметрия. Правила, определяющие добавочные элементы симметрии.
- Структурный тип. Классификация структурных типов. Простейшие структуры соединений типа AX , AX_2 , A_2X .
- Явление изоморфизма. Условия, необходимые для проявления изоμοфизма. Примеры изоморфных структур.
- Морфотропия и полиморфизм. Структурная классификация типов полиморфизма.
- Политипизм. Способы описания и примеры политипных кристаллических структур.

- Кристаллохимия органических соединений. Классификация структур. Сущность теории плотной упаковки молекул.
- Структурная характеристика твердых растворов и интерметаллических соединений.
- Кристаллохимия силикатов и боратов. Зависимость свойств силикатов от структуры.

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

Задача 1.

Найдите коэффициенты упаковки для плотнейшей упаковки двух типов шаров, большие из которых образуют двухслойную плотнейшую упаковку, а меньшие располагаются в пустотах. При каком соотношении радиусов коэффициент упаковки максимален? Рассмотрите случаи, когда меньшие шары заполняют все тетраэдрические пустоты; все октаэдрические пустоты.

Задача 2.

В двухслойной плотнейшей упаковке заполнена половина тетраэдрических пустот, находящихся в элементарной ячейке. Найдите возможные пространственные группы симметрии упаковки, запишите координаты шаров, пустых и заполненных пустот. Какие структурные типы описывает данная упаковка?

Задача 3.

Вычислить и сравнить между собой плотность заполнения для следующих упаковок одинаковых шаров в пространстве:

- 1) трехслойной плотнейшей упаковки;
- 2) кубической объемноцентрированной упаковки,
- 3) кубической примитивной упаковки.

Задача 4.

Какова в кристаллическом пространстве симметрия позиций, которые занимают центры шаров, тетраэдрических и октаэдрических пустот для структур алмаза, сфалерита, цинка.

Задача 5.

Определить группу симметрии внутренних электрических полей в центрах шаров, октаэдрических и тетраэдрических пустот для идеальной трехслойной упаковки.

Задача 6.

Кристалл LiH кристаллизуется в кубической сингонии в пространственной группе $Fm\bar{3}m$ с четырьмя формульными единицами на элементарную ячейку. Определите координационные многогранники атомов структуры.

Задача 7.

Доказать, что в молекулярном соединении AX_2 , кристаллическая структура которого описывается пространственной группой $Ra\bar{3}$, при

минимальном числе молекул на элементарную ячейку молекула должна быть линейной.

6.4. Методические материалы, определяющие процедуры оценивания

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

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

7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

а) основная литература:

1. Чупрунов Е.В., Хохлов А.Ф., Фаддеев М.А. – Кристаллография. – М.: Изд. физ.-мат. лит. – 2000. – 496 с.
Фонд Фундаментальной библиотеки ННГУ: 4 экз.
<http://www.lib.unn.ru/php/details.php?DocId=222770>.
2. Бокий Г.Б. – Кристаллохимия. – М.: Наука. – 1971. – 400 с.
Фонд Фундаментальной библиотеки ННГУ: 4 экз.
<http://www.lib.unn.ru/php/details.php?DocId=405382>.
3. Задачи по кристаллографии. Под ред. Чупрунова Е.В., Хохлова А.Ф. – М.: Физматлит. – 2003. – 208 с.
Фонд Фундаментальной библиотеки ННГУ: 15 экз.
<http://www.lib.unn.ru/php/details.php?DocId=59115>.

б) дополнительная литература:

1. Загальская Ю.Г., Литвинская Г.П. – Геометрическая микрокристаллография. – М.: Изд. МГУ, 1976. – 241 с.
Фонд Фундаментальной библиотеки ННГУ: 4 экз.
<http://www.lib.unn.ru/php/details.php?DocId=102107>.
2. Китайгородский А.И. – Молекулярные кристаллы. – М.: Наука. – 1971. – 424 с.
Фонд Фундаментальной библиотеки ННГУ: 5 экз.
<http://www.lib.unn.ru/php/details.php?DocId=100072>.

в) программное обеспечение и Интернет-ресурсы:

Интернет-ресурсы Фундаментальной библиотеки ННГУ
<http://www.lib.unn.ru/>.

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Материально-техническое обеспечение дисциплины обусловлено наличием учебных аудиторий для проведения занятий, оборудованных специализированной мебелью, меловыми или магнитно-маркерными досками

для представления учебной информации большой аудитории. Ресурс мела и маркеров для доски в учебных аудиториях регулярно возобновляется.

Помещения для самостоятельной работы обучающихся (на базе Фундаментальной библиотеки ННГУ) оснащены компьютерной техникой с подключением к сети «Интернет» и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду ННГУ.

Программа составлена в соответствии с требованиями самостоятельно установленного ННГУ образовательного стандарта высшего образования по направлению подготовки 03.03.02 Физика.

Автор:

доцент кафедры кристаллографии
и экспериментальной физики
физического факультета,
к. ф.-м. н.

_____ / Каткова М.Р. /

Рецензент:

Зав. кафедрой кристаллографии
и экспериментальной физики
физического факультета,
д. ф.-м. н., профессор

_____ / Чупрунов Е.В. /

Программа одобрена на заседании Учебно-методической комиссии
физического факультета ННГУ от « » _____ 2021 года,
протокол № б/н.

Председатель
Учебно-методической комиссии
физического факультета ННГУ

_____ / Перов А.А. /