

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего
профессионального образования
Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова
Геологический факультет

УТВЕРЖДАЮ
Декан Геологического
факультета
академик

_____ /Д.Ю.Пушаровский/
«__» _____ 20 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Физическая и теоретическая кристаллохимия

Автор-составитель: профессор Еремин Н.Н.

Уровень высшего образования:

Магистратура

Направление подготовки:

05.04.01 Геология

Направленность (профиль) ОПОП:

«Геохимия»

Магистерская программа

«Кристаллография и кристаллохимия ИМ»

Форма обучения:

Очная

Рабочая программа рассмотрена и одобрена

Учебно-методическим Советом Геологического факультета

(протокол № _____, _____)

Москва 2019

На обратной стороне титула:

Рабочая программа дисциплины (модуля) разработана в соответствии с самостоятельно установленным МГУ образовательным стандартом (ОС МГУ) для реализуемых основных профессиональных образовательных программ высшего образования по направлению подготовки «Геология» (*программы бакалавриата, магистратуры, реализуемых последовательно по схеме интегрированной подготовки*) в редакции приказа МГУ от 30 декабря 2016 г. №1674

Год (годы) приема на обучение – 2019

Цель и задачи дисциплины

- получение современных знаний об атомарном строении кристаллов, являющегося фундаментом для всестороннего изучения минералов, горных пород и руд, для понимания процессов минералообразования, для направленного синтеза кристаллов с заранее заданными свойствами;
- получение современных представлений о правилах организации кристаллического вещества;
- изучение взаимосвязи кристаллической структуры с физико-химическими свойствами кристаллов.

Задачи:

- изучение принципов современных методов моделирования и предсказания кристаллических структур и их физических свойств на основе знаний, полученных в курсах, кристаллография, кристаллохимия, петрология и геохимия;
- обучение студентов приемам грамотной кристаллохимической интерпретации минералообразующих и геохимических процессов;

1. Место дисциплины (модуля) в структуре ОПОП ВО – вариативная часть, профессиональный цикл, обязательные дисциплины, курс – I, семестр – 2.

2. **Входные требования для освоения дисциплины (модуля), предварительные условия:**

Кристаллография, Минералогия, Петрология, Основы физической геохимии, Кристаллохимия

3. **Результаты обучения по дисциплине (модулю), соотнесенные с требуемыми компетенциями выпускников.**

Компетенции выпускников, формируемые (полностью или частично) при реализации дисциплины (модуля):

ОПК-4.М Способность применять на практике знания фундаментальных и прикладных разделов дисциплин, определяющих профиль подготовки

ПК-4.М Способность создавать и исследовать модели изучаемых объектов на основе использования теоретических и практических знаний в области геологии

ПК-4.М Способность обобщать и использовать результаты исследований для выявления новых явлений, закономерностей, законов и теоретических положений в области кристаллографии и кристаллохимии

Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю):

знать: физико-химические основы кристаллохимии на современном уровне, основные законы, определяющие кристаллическую структуру минералов, взаимосвязь кристаллической структуры и физических свойств кристаллов

уметь: пользоваться современными базами кристаллохимических данных, давать полное описание кристаллической структуры по ее модели, чертежу либо словесному описанию,

высказывать предположения о физических свойствах кристаллического соединения по его структуре.

Владеть: структурной систематикой неорганических кристаллов, методическими приемами кристаллохимического прогноза, способами описания кристаллических структур, как в стандартном, так и в анионоцентрированном представлении.

4. Формат обучения – лекционные и семинарские занятия (*отметить, если дисциплина или часть ее реализуется с использованием электронного обучения и (или) дистанционных образовательных технологий*)

5. Объем дисциплины (модуля) составляет **5** з.е., в том числе **180** академических часов, отведенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (**13** часов – занятия лекционного типа, **39** часов – занятия семинарского типа), **128** академических часа на самостоятельную работу обучающихся. Форма промежуточной аттестации – экзамен

6. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и виды учебных занятий

Краткое содержание дисциплины (аннотация):

Принципы выделения кристаллохимии как науки об атомном строении кристаллов из наук о твердом веществе. Связь кристаллохимии с родственными науками. Центральная проблема кристаллохимии – предсказание структуры кристалла для заданного химического состава. Иерархия методов предсказания и уточнения пробной структуры. Причины ограниченности числа неорганических соединений и особенно минеральных видов. Неравномерность распределения минералов и неорганических соединений по классам симметрии и пространственным группам. Принцип минимальной диссимметризации. Конструирование топологических моделей кристаллов. Принципы плотнейшей упаковки, табулирование структурных типов неорганических веществ и их производных, использование полиэдров Полинга-Белова и Вороного-Дирехле, параллелоэдры и сфеноиды Федорова. Пустоты в плотнейших упаковках и мотивы их заселения. Основные структурные типы на основе координационных полиэдров катионов. Анионоцентрированные полиэдры и соответствующие структурные типы. Связь между координационными числами катионов и анионов в нормально-валентных структурах. Вторичные структурные единицы и структуры каркасных силикатов, в частности, цеолитов. Конструирование островных кремнекислородных радикалов из SiO_4 -тетраэдров. Принципы топологического конструирования слоистых силикатов из тетраэдрических и октаэдрических сеток. Структурный тип кристаллов и родственные понятия и концепции кристаллохимии. Изотипизм и изоструктурность. Структурный класс. Изотипизм и пространственные группы симметрии. Структурные деформации и псевдосимметрия. Принцип толерантности и структурные дескрипторы. Представления о структурной гомологии кристаллов. Производные и вырожденные структуры. Упорядочение атомов и сверхструктуры. Основные структурные прототипы (NaCl - MgO - PbS , сфалерит, флюорит и др.) и их гомологические ряды. Понятие о полисоматических сериях минералов и неорганических веществ. Радиусы ионов и атомов. Принципы их вывода и соотношения между ними. Зависимость величин радиусов от валентности, координационных чисел и

спинового состояния переходных элементов. Современные представления о переменных радиусов ионов. Структурные сортировочные диаграммы. Принципы их построения и возможности практического использования. Правила строения ионных кристаллов. Критерий Магнуса-Гольдшмидта и его ограничения. Понятия о втором, третьем и четвертом правилах Полинга. Современное понимание общего значения пятого правила Полинга (правила экономичности). Правила строения ковалентных и существенно ковалентных кристаллов. Правило октета. Понятие электронных концентраций. Направленные связи и гибридизация. Правила Грима-Зоммерфельда, правила Пирсона, Партэ и др. для кристаллов с неполновалентными элементами (неподеленными парами электронов). Современное состояние второго правила Полинга. Локальный баланс валентностей в варианте Полинга и его современная форма. Значение отклонений от локального баланса для кристаллохимического анализа. Качество баланса. Минералогически вероятные структуры. Метод валентности связи. Правило сумм валентности связей, контуры связей. Решение систем линейных уравнений для отыскания значений валентности связей. Программа BONDVAL и тестовые задачи. «Закон» частности координационных чисел (КЧ). Простые и составные КЧ и соответствующие координационные полиэдры. Автодуальное многообразие Платоновых тел. Автодуальные многообразия $F=V$ (число граней равно числу вершин). Теоремы дисторсии координационных полиэдров. Геометрический и аналитический выводы теоремы дисторсии. Экспериментальная проверка теорем дисторсии. Конструирование вероятных кристаллических структур из тетраэдров $T^{n+}O_4$ на примере модификаций кремнезема. Конструирование вероятных кристаллических структур из октаэдров $M^{n+}O_6$: случаи $M^{2+}O$, $M_2^{3+}O_3$, $M^{4+}O_2$, $M^{6+}O_3$. Конструирование вероятных кристаллических структур из полиэдрических кластеров (тетраэдры и октаэдры). Применение правил минимальной дисторсии при сравнении топологических моделей структур. Теорема Шубникова и правила заселения точечных конфигураций. Шубниковские кристаллохимические формулы. Методы уточнения топологических моделей. Методы DLS, VLS, DVLS. Связь свойств кристаллов с характеристиками химических связей. Основы уточнения кристаллических структур и свойств кристаллов методами минимизации энергии межатомного взаимодействия.

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины (модуля), Форма промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)	Всего (часы)	В том числе				Самостоятельная работа обучающегося, часы * (виды самостоятельной работы – эссе, реферат, контрольная работа и пр. – указываются при необходимости)
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем) Виды контактной работы, часы				
		Занятия лекционного типа	Занятия лабораторного типа	Занятия семинарского типа	Всего	
Принципы выделения кристаллохимии как науки об атомном строении кристаллов из наук о твердом веществе. Связь кристаллохимии с родственными науками		2		6		20 Защита рефератов
Конструирование островных кремнекислородных радикалов из SiO ₄ -тетраэдров.		2		6		20 Коллоквиум №1. Защита рефератов
Структурный тип кристаллов и родственные понятия и концепции кристаллохимии		2		6		20 Защита рефератов
Правила строения ионных кристаллов.		3		6		20 Защита рефератов
Современное состояние второго правила Полинга.		2		9		20 Защита рефератов
Конструирование вероятных кристаллических структур из тетраэдров T ⁿ⁺ O ₄ на примере модификаций кремнезема.		2		6		28 Коллоквиум №2 Защита рефератов
ИТОГОВАЯ АТТЕСТАЦИЯ						ЭКЗАМЕН
ВСЕГО	180	52				128

Содержание разделов дисциплины:

Введение.

Принципы выделения кристаллохимии как науки об атомном строении кристаллов из наук о твердом веществе. Связь кристаллохимии с родственными науками. Центральная проблема кристаллохимии – предсказание структуры кристалла для заданного химического состава. Иерархия методов предсказания и уточнения пробной структуры. Причины ограниченности числа неорганических соединений и особенно минеральных видов. Неравномерность распределения минералов и неорганических соединений по классам симметрии и пространственным группам. Принцип минимальной диссимметризации

Конструирование топологических моделей кристаллов. Принципы плотнейшей упаковки, табулирование структурных типов неорганических веществ и их производных, использование полиэдров Полинга-Белова и Вороного-Дирехле, параллелоэдры и сфеноиды Федорова. Пустоты в плотнейших упаковках и мотивы их заселения. Основные структурные типы на основе координационных полиэдров катионов.

Анионоцентрированные полиэдры и соответствующие структурные типы. Связь между координационными числами катионов и анионов в нормально-валентных структурах.

Вторичные структурные единицы и структуры каркасных силикатов, в частности, цеолитов

Конструирование островных кремнекислородных радикалов из SiO_4 -тетраэдров.

Принципы топологического конструирования слоистых силикатов из тетраэдрических и октаэдрических сеток.

Структурный тип кристаллов и родственные понятия и концепции кристаллохимии. Изотипизм и изоструктурность. Структурный класс. Изотипизм и пространственные группы симметрии. Структурные деформации и псевдосимметрия. Принцип толерантности и структурные дескрипторы. Представления о структурной гомологии кристаллов. Производные и вырожденные структуры. Упорядочение атомов и сверхструктуры. Основные структурные прототипы (NaCl-MgO-PbS , сфалерит, флюорит и др.) и их гомологические ряды. Понятие о полисоматических сериях минералов и неорганических веществ. Радиусы ионов и атомов. Принципы их вывода и соотношения между ними. Зависимость величин радиусов от валентности, координационных чисел и спинового состояния переходных элементов. Современные представления о переменных радиусов ионов. Структурные сортировочные диаграммы. Принципы их построения и возможности практического использования.

Правила строения ионных кристаллов. Критерий Магнуса-Гольдшмидта и его ограничения. Понятия о втором, третьем и четвертом правилах Полинга. Современное понимание общего значения пятого правила Полинга (правила экономичности). Правила строения ковалентных и существенно ковалентных кристаллов. Правило октета. Понятие электронных концентраций. Направленные связи и гибридизация. Правила Грима-

Зоммерфельда, правила Пирсона, Партэ и др. для кристаллов с неполновалентными элементами (неподеленными парами электронов).

Современное состояние второго правила Полинга. Локальный баланс валентностей в варианте Полинга и его современная форма. Значение отклонений от локального баланса для кристаллохимического анализа. Качество баланса. Минералогически вероятные структуры. Метод валентности связи. Правило сумм валентности связей, контуры связей. Решение систем линейных уравнений для отыскания значений валентности связей.

Программа BONDVAL и тестовые задачи. «Закон» частности координационных чисел (КЧ). Простые и составные КЧ и соответствующие координационные полиэдры.

Автодуальное многообразие Платоновых тел. Автодуальные многообразия $F=V$ (число граней равно числу вершин). Теоремы дисторсии координационных полиэдров.

Геометрический и аналитический выводы теоремы дисторсии. Экспериментальная проверка теорем дисторсии

Конструирование вероятных кристаллических структур из тетраэдров $T^{n+}O_4$ на примере модификаций кремнезема. Конструирование вероятных кристаллических структур из октаэдров $M^{n+}O_6$: случаи $M^{2+}O$, $M^{3+}O$, $M^{4+}O$, $M^{6+}O$.

Конструирование вероятных кристаллических структур из полиэдрических кластеров (тетраэдры и октаэдры). Применение правил минимальной дисторсии при сравнении топологических моделей структур. Теорема Шубникова и правила заселения точечных конфигураций. Шубниковские кристаллохимические формулы. Методы уточнения топологических моделей. Методы DLS, VLS, DVLS. Связь свойств кристаллов с характеристиками химических связей. Основы уточнения кристаллических структур и свойств кристаллов методами минимизации энергии межатомного взаимодействия.

Рекомендуемые образовательные технологии

При освоении дисциплины Физическая и теоретическая кристаллохимия активно используется образовательная технология педагогических мастерских - преподаватель создаёт атмосферу открытости, доброжелательности, сотворчества в общении, равен ученику в поиске знания, не торопится давать ответы на поставленные вопросы. В курсе предусматривается широкое использование активных и интерактивных форм проведения занятий. По результатам внеаудиторной работы (работа с литературными источниками, ресурсами Интернет, базами данных, моделями кристаллических структур) студенты готовят решение индивидуальных задач по основным разделам дисциплины. Предусмотрены индивидуальные рефераты, наиболее удачные из которых используются в качестве справочного материала на официальной странице курса.

При чтении лекций используются *интерактивные лекции-визуализации* с выделением в визуальной форме основных понятий теоретической и физической кристаллохимии

7. Фонд оценочных средств (ФОС) для оценивания результатов обучения по дисциплине (модулю)

7.1. Типовые контрольные задания или иные материалы для проведения текущего контроля успеваемости.

Текущий контроль усвоения дисциплины осуществляется при сдаче каждым студентом выполненных лабораторных/практических/расчетных работ (при наличии).

Для текущего контроля студентов в ходе семестра проводятся контрольные работы/опросы.

Примерный перечень вопросов для проведения текущего контроля/ Темы контрольных работ:

Предусмотрено 2 коллоквиума по завершённым темам:

Коллоквиум №1 – по теме: «Конструирование топологических моделей кристаллов» В суммарную оценку за коллоквиум также входит написание персонального реферата.

Коллоквиум №2 – по теме «Метод валентности связи и Теоремы дисторсии координационных полиэдров» В суммарную оценку входит написание персонального реферата; также оцениваются персональные навыки работы в программе BONDVAL.

7.2. Типовые контрольные задания или иные материалы для проведения промежуточной аттестации.

Примерный перечень вопросов при промежуточной аттестации:

1. Принципы выделения кристаллохимии как науки об атомном строении кристаллов из наук о твердом веществе.
2. Связь кристаллохимии с родственными науками.
3. Центральная проблема кристаллохимии – предсказание структуры кристалла для заданного химического состава.
4. Иерархия методов предсказания и уточнения пробной структуры.
5. Причины ограниченности числа неорганических соединений и особенно минеральных видов. Неравномерность распределения минералов и неорганических соединений по классам симметрии и пространственным группам.
6. Принцип минимальной диссимметризации.
7. Конструирование топологических моделей кристаллов. Принципы плотнейшей упаковки, табулирование структурных типов неорганических веществ и их производных, использование полиэдров Полинга-Белова и Вороного-Дирехле, параллелоэдры и сфеноиды Федорова.
8. Пустоты в плотнейших упаковках и мотивы их заселения. Основные структурные типы на основе координационных полиэдров катионов.
9. Анионоцентрированные полиэдры и соответствующие структурные типы.
10. Связь между координационными числами катионов и анионов в нормально-валентных структурах.
11. Вторичные структурные единицы и структуры каркасных силикатов, в частности, цеолитов.
12. Конструирование островных кремнекислородных радикалов из SiO_4 -тетраэдров.
13. Принципы топологического конструирования слоистых силикатов из тетраэдрических и октаэдрических сеток.
14. Структурный тип кристаллов и родственные понятия и концепции кристаллохимии. Изотипизм и изоструктурность. Структурный класс.
15. Изотипизм и пространственные группы симметрии.
16. Структурные деформации и псевдосимметрия.
17. Принцип толерантности и структурные дескрипторы.
18. Представления о структурной гомологии кристаллов.
19. Производные и вырожденные структуры.
20. Упорядочение атомов и сверхструктуры.
21. Основные структурные прототипы (NaCl-MgO-PbS , сфалерит, флюорит и др.) и их гомологические ряды.
22. Понятие о полисоматических сериях минералов и неорганических веществ
23. Радиусы ионов и атомов. Принципы их вывода и соотношения между ними.

Зависимость величин радиусов от валентности, координационных чисел и спинового состояния переходных элементов.

24. Современные представления о переменных радиусов ионов. Структурные сортировочные диаграммы. Принципы их построения и возможности практического использования.
25. Правила строения ионных кристаллов. Критерий Магнуса-Гольдшмидта и его ограничения.
26. Понятия о втором, третьем и четвертом правилах Полинга. Современное понимание общего значения пятого правила Полинга (правила экономичности).
27. Правила строения ковалентных и существенно ковалентных кристаллов. Правило октета. Понятие электронных концентраций. Направленные связи и гибридизация.
28. Правила Грима-Зоммерфельда, правила Пирсона, Партэ и др. для кристаллов с неполновалентными элементами (неподеленными парами электронов).
29. Современное состояние второго правила Полинга. Локальный баланс валентностей в варианте Полинга и его современная форма.
30. Современное состояние второго правила Полинга. Значение отклонений от локального баланса для кристаллохимического анализа. Качество баланса. Минералогически вероятные структуры.
31. Метод валентности связи. Правило сумм валентности связей, контуры связей. Решение систем линейных уравнений для отыскания значений валентности связей.
32. Программа BONDVAL и тестовые задачи.
33. «Закон» частности координационных чисел (КЧ). Простые и составные КЧ и соответствующие координационные полиэдры.
34. Автодуальное многообразие Платоновых тел. Автодуальные многообразия $F=V$ (число граней равно числу вершин).
35. Теоремы дисторсии координационных полиэдров. Геометрический и аналитический выводы теоремы дисторсии. Экспериментальная проверка теорем дисторсии.
36. Конструирование вероятных кристаллических структур из тетраэдров $T^{n+}O_4$ на примере модификаций кремнезема.
37. Конструирование вероятных кристаллических структур из октаэдров $M^{n+}O_6$: случаи $M^{2+}O$, $M_2^{3+}O_3$, $M^{4+}O_2$, $M^{6+}O_3$.
38. Конструирование вероятных кристаллических структур из полиэдрических кластеров (тетраэдры и октаэдры).
39. Применение правил минимальной дисторсии при сравнении топологических моделей структур.
40. Теорема Шубникова и правила заселения точечных конфигураций. Шубниковские кристаллохимические формулы.
41. Методы уточнения топологических моделей. Методы DLS, VLS, DVLS.
42. Связь свойств кристаллов с характеристиками химических связей.
43. Основы уточнения кристаллических структур и свойств кристаллов методами минимизации энергии межатомного взаимодействия.

Шкала и критерии оценивания результатов обучения по дисциплине.

Результаты обучения	«Неудовлетворительно»	«Удовлетворительно»	«Хорошо»	«Отлично»
Знания: физико-химические	Знания отсутствуют	Фрагментарные знания	Общие, но не структурированные знания	Систематические знания

<p>основы кристаллохимии на современном уровне, основные законы, определяющие кристаллическую структуру минералов, взаимосвязь кристаллической структуры и физических свойств кристаллов.</p>				
<p>Умения: пользоваться современными базами кристаллохимических данных, давать полное описание кристаллической структуры по ее модели, чертежу либо словесному описанию, высказывать предположения о физических свойствах кристаллического соединения по его структуре</p>	<p>Умения отсутствуют</p>	<p>В целом успешное, но не систематическое умение, допускает неточности не принципиального характера</p>	<p>В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы умение давать полное описание кристаллической структуры по ее модели, чертежу либо словесному описанию, высказывать предположения о физических свойствах кристаллического соединения по его структуре.</p>	<p>Успешное умение пользоваться современными базами кристаллохимических данных, давать полное описание кристаллической структуры по ее модели, чертежу либо словесному описанию, высказывать предположения о физических свойствах кристаллического соединения по его структуре</p>
<p>Владения: структурной систематикой неорганических кристаллов, методическими приемами кристаллохимического прогноза, способами описания кристаллических структур, как в стандартном, так и</p>	<p>Отсутствие понимания структурной систематики неорганических кристаллов</p>	<p>Фрагментарные знания по рассмотренным в курсе проблемам</p>	<p>В целом видна работа студента и освоен материал, связанный со структурной систематикой неорганических кристаллов, методическими приемами кристаллохимического</p>	<p>Очевидна компетентность и грамотное изложение ответов по представленному в курсе проблемам</p>

в анионо-центрированном представлении			прогноза	
---------------------------------------	--	--	----------	--

8. Ресурсное обеспечение:

А) Перечень основной и дополнительной литературы.

основная литература:

- 1) Урусов В.С. Теоретическая кристаллохимия. М., МГУ, 1987
- 2) Урусов В.С., Еремин Н.Н. «Кристаллохимия. Краткий курс» М., Изд-во МГУ, 2010, 258стр.
- 3) Бокий Г.Б. Кристаллохимия. М., Наука, 1973.

дополнительная литература

- 1) Белов Н.В. Очерки по структурной минералогии. М., Недра, 1976.
- 2) Ворошилов Ю.В. Павлишин В.И. «Основы кристаллографии и кристаллохимии. Рентгенография кристаллов» Киев, КНТ, 2011. 568 стр.
- 3) Урусов В.С. Еремин Н.Н. Атомистическое моделирование кристаллических структур минералов их дефектов и твердых растворов. М, ГЕОС, 2011.
- 4) Урусов В.С., Дубровинский Л.С. Конструирование вероятных кристаллических структур минералов. МГУ, 1990 г.

Б) Перечень лицензионного программного обеспечения пакеты программ Microsoft Office Excel, Microsoft Office PowerPoint (при необходимости)

В) Перечень профессиональных баз данных и информационных справочных систем, <http://database.iem.ac.ru/mincryst/> - база данных кристаллических структур МИНКРИСТ; <http://rruff.geo.arizona.edu/AMS/amcsd.php> - база данных кристаллических структур American Mineralogist.

Г) программное обеспечение и Интернет-ресурсы

<http://cryst.geol.msu.ru/courses/theorcrchem/> - официальная страница курса

<http://www.shapesoftware.com/> - программное обеспечение для визуализации кристаллов и кристаллических структур

Д) Материально-технического обеспечение: - компьютерный класс, рассчитанные на группу из 8 учащихся с лицензионным программным обеспечением, включающим современные специализированные программы для обработки рентгендифракционных данных и базы данных;

- уникальная коллекция моделей кристаллов и их структур, окрашенных поделочных и полудрагоценных кристаллов

- мультимедийный проектор

.

9. Язык преподавания – русский.

10. Преподаватель (преподаватели) – профессор Еремин Н.Н., Гурбанова О.А.

11. Автор (авторы) программы – профессор Еремин Н.Н.