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

УТВЕРЖДАЮ
Декан Геологического факультета
академик
_____/Д.Ю.Пущаровский/
«___» _____20 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Генетическая кристаллохимия

Автор-составитель: О.В. Якубович.

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 20__

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 – 2018.

Цель и задачи дисциплины

Цели: ознакомление студентов с генетическим направлением в кристаллохимии, его местом в ряду других направлений кристаллохимической науки, предметом и методами исследования; получение студентами современной научной информации и теоретических знаний в области кристаллогенетических исследований.

Задачи: формирование у студентов навыков выявления и анализа кристаллохимических особенностей минералов, их типоморфных структурных характеристик; установление корреляций между этими особенностями, физико-химическими условиями минералообразующей среды и физическими свойствами.

1. Место дисциплины (модуля) в структуре ОПОП ВО – вариативная часть, профессиональный цикл, дисциплины по выбору, курс – II, семестр – 3. **2. Входные требования для освоения дисциплины (модуля), предварительные условия:**

Кристаллография, Минералогия, Рентгеноструктурный анализ, Кристаллохимия

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

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

ОПК-3.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

СПК-1.М Способность использовать кристаллохимический и рентгеноструктурный анализ для теоретических и экспериментальных исследований в области кристаллографии и кристаллохимии

Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю):

знать:

- основные принципы строения природных и синтетических соединений с многокомпонентным составом и сложным строением из классов оксидов, карбонатов, боратов, силикатов, фосфатов;
- методы описания кристаллических структур;
- основные критерии современных классификаций соединений классов оксидов, карбонатов, боратов, силикатов, фосфатов;
- понятие о взаимосвязи состава соединения со строением, свойствами и условиями образования.

уметь:

- представлять развернутое описание кристаллических структур в совокупности с кристаллохимическим анализом;
- определять место конкретного соединения в классификационной схеме;
- выявлять доминирующие фрагменты структур, в том числе указывающие на наличие физических свойств соединений;
- выделять характерные детали структур, постоянные для соединений конкретного класса.

владеть:

- практическими навыками работы с кристаллической структурой, включая построение проекций и выявление особенностей строения с использованием современных программ
-методами сравнительного кристаллохимического анализа с использованием материалов современных баз данных кристаллических структур.

4. Формат обучения – лекционные и семинарские занятия (

5. Объем дисциплины (модуля) составляет **1** з.е., в том числе **28** академических часов, отведенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (**8** часов – занятия лекционного типа, **20** часов – занятия семинарского типа, **8** академических часа на самостоятельную работу обучающихся. Форма промежуточной аттестации – зачет

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

Краткое содержание дисциплины (аннотация):
Целью курса является ознакомление студентов с генетическим направлением в кристаллохимии, его предметом и методами исследования. Определяется место генетической кристаллохимии в ряду других направлений кристаллохимической науки.
В курсе рассматриваются основные закономерности развития геохимических процессов с точки зрения кристаллохимии и физической химии. Анализируется роль экспериментального моделирования в выявлении закономерностей минералообразования. Исследуются причинно-следственные связи структурных преобразований в гомологических и морфотропных рядах минералов. Большое внимание в курсе уделяется кристаллогенетическим исследованиям, основанным на прецизионном анализе электронной плотности как отдельных минералов, так и минеральных групп, объединенных определенным признаком родственности.
На примере минеральных групп фосфатов, боратов, силикатов, ванадатов прослеживаются пути формирования и преобразования кристаллических структур в породах различных геохимических типов.

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины (модуля), **Форма промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)**	**Всего (часы)**	В том числе				
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем) Виды контактной работы, часы				**Самостоятельная работа обучающегося, часы *** *(виды самостоятельной работы – эссе, реферат, контрольная работа и пр. – указываются при необходимости)*
		Занятия лекционного типа	Занятия лабораторного типа	Занятия семинарского типа	**Всего**	
Вводная часть		1		2		1
Модульная кристаллохимия и концепция полисоматизма		1		3		1
Кристаллохимическая концепция анионных построек смешенного типа		1		3		1 Письменная контрольная работа
Генетическая кристаллохимия цеолитов и цеолитоподобных минералов		1		2		1
Генетическая классификация фосфатов пегматитов		1		3		11Доклады студентов в форме презентации
Роль прецизионных рентгенографических исследований в решении проблем генетической кристаллохимии		1		3		Доклады студентов в форме презентации
Генетическая кристаллохимия ванадия		1		2		1Сдача рефератов
Генетические аспекты кристаллохимии борофосфатов		1		2		1
Промежуточная аттестация						**экзамен**
Итого	**36**	**28**				8

Содержание разделов дисциплины:

Вводная часть

Предмет и методы исследования, определяющие научное направление «Генетическая кристаллохимия»; его место в ряду других направлений кристаллохимии. Типоморфизм минералов. Понятие о структурном типоморфизме.

Исторический экскурс, обзор научных открытий Гольдшмидта, Ферсмана, Белова, Франк-Каменецкого и др. Основные открытия начала XX века, определившие интенсивное развитие кристаллохимии.

Эволюционная концепция геохимических процессов. Внешние и внутренние факторы, определяющие развитие геологической системы, как сложной физико-химической системы. Основные физико-химические законы в применении к геологической системе.

Основные понятия кристаллохимии: изоморфизм, полиморфизм и политипия, изотипия, гомеотипия, гомология, морфотропия, модулярность, полисоматизм. Примеры структурных взаимоотношений в гомологических, морфотропных и полисоматических рядах минералов: кристаллическая структура $KFePO_4$ и морфотропный ряд родственных фосфатов; кристаллическая структура $Mn_3(PO_4)_2$ в ряду гомеотипных соединений. Типы структурных трансформаций.

Модулярная кристаллохимия и концепция полисоматизма

Минералы щелочных комплексов: особенности кристаллохимии натисита. Полисоматическая трансформация натисита и морфотропный ряд структурно родственных фосфатов.

Кристаллическая структура $CuAl_2[Si_2O_7]F_2$. Концепция полисоматизма; модульное конструирование полисоматической серии силикатов на основе структуры топаза. Модульный ряд силикатов на основе структуры сейдозерита. V-ломоносовит: особенности кристаллической структуры, реализующейся в пространственной группе P1.

Кристаллическая структура бритвинита – слоистого минерала, образованного анионными кислотными комплексами трех типов. Дефекты упаковки силикатных слоев. Полисоматическая серия макаулаита – буркхардтита.

Эвристическое значение использования модульного подхода в кристаллохимии.

Кристаллохимическая концепция анионных построек смешанного типа (смешанных анионных радикалов)

«Кристаллохимия смешанных анионных радикалов» П.А. Сандомирского и Н.В. Белова. Катионные и анионные фрагменты кристаллических структур. Понятие об анионных постройках смешанного типа, анализ их химических и геометрических особенностей. Кристаллохимическая функция амфорных оксокомплексов в кристаллических структурах минералов различного генезиса. Кристаллохимическая интерпретация минералов различных химических классов (силикатов, фосфатов, боратов, ванадатов и др.) на основе выделения в их кристаллических структурах анионных фрагментов смешанного типа.

Генетическая кристаллохимия цеолитов и цеолитоподобных минералов

Кристаллическая структура бахчисарайцевита, структурная аналогия с римкорольгитом. Варианты кристаллогенезиса. Цеолиты и цеолитоподобные минералы. Особенности кристаллохимии мерлиноитов; факторы, обусловливающие степень ромбического искажения кристаллической структуры .

Роль щелочных металлов в формировании производных структурных мотивов на основе берилла. Генетическая кристаллохимия воробьевита и пеззоттаита. Генетическая кристаллохимия минералов изоморфного ряда сахаита – харкерита. Генетическая кристаллохимия содалитов.

Генетическая классификация фосфатов пегматитов.

Роль амфотерных оксокомплексов в структурах фосфатов. Особенности катионных построек фосфатов гранитных пегматитов, их типоморфные характеристики.

Процессы преобразования трифилина в пегматитах. Структурный ряд трифилин - феррисиклерит - гетерозит. Генетическая кристаллохимия вторичных фосфатов литиевых

пегматитов на основе трифилина. Кристаллические структуры симферита и Fe^{3+}-трифилина. Синтетический трифилин - современный катодный материал для литиевых батарей. Фосфаты гранитных пегматитов стадии автометасоматоза. Особенности кристаллохимия аллюодитов в контексте детализации систематики и генезиса.
Анионные постройки смешанного типа в кристаллических структурах фосфатов щелочных пегматитов.

Роль прецизионных рентгенографических исследований в решении проблем генетической кристаллохимии

Особенности электронной плотности в морфотропном ряду фосфатов с гексагональной плотнейшей упаковкой. Кристалло-генетическая интерпретация.
Кристаллическая структура криолитионита. Особенности распределения электронной плотности. Кристаллохимическая роль лития. Вероятный компенсационный механизм во фтор-замещенных гранатах. Кристаллическая структура либетенита, факторы ее стабилизации, особенности кристаллохимии в ряду изотипных минералов.

Генетическая кристаллохимия ванадия.

Структурный типоморфизм амфотерных оксокомплексов в литофильной геохимической системе кристаллогенезиса. Особенности геохимии и минералогии ванадия. Валентные состояния и варанты координационного окружения ванадия в минералах. Ванадий в высокощелочных системах. Ванадилфосфаты. Кристаллохимия фосфатов с катионами $(VO_2)^+$. Кристаллохимия бушмакинита – гипергенного минерала из зоны окисления. Синтетические разновидности минералов ванадия, полученные в кислой среде при гидротермальном синтезе. Новые фазы и структурные типы полиоксованадатов.

Генетические аспекты кристаллохимии борофосфатов.

Борофосфаты – особенности кристаллохимии. Борофофаты в природе и в лаборатории. Кристаллохимия 1t:1Δ борофосфатов. Примеры фосфатных архетипов. Морфотропная природа полиморфизма борофосфатного аниона $[BP_2O_8(OH)]^{4-}$.

Рекомендуемые образовательные технологии
Подготовка студентами и презентация докладов на заданные преподавателем темы**.**
Интерактивное обсуждение презентаций. Обсуждение особенностей кристаллохимии минералов с использованием оригинального набора полиэдрических моделей структур.
Подготовка рефератов на основе работ основателей российских минералогических и кристаллохимических школ.

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 конт рольных работ :

Кристаллохимия: предмет и метод исследования. Генетическая кристаллохимия, предмет исследования.
Основные научные открытия начала XX века, определившие развитие кристаллохимии.
Типоморфизм. Типоморфные и полигенные минералы. Типоморфные свойства минералов.
Структурный типоморфизм. Изоморфизм, твердые растворы, полиморфизм. Дать определения и привести примеры.

Гомология и морфотропия. Примеры гомологических и морфотропных рядов соединений. В чем отличие понятий «морфотропный ряд структур», «ряд изоструктурных соединений», «твердый раствор»?
Основные положения концепции полисоматизма. Примеры полисоматических серий минералов и/или синтетических аналогов.
Суть концепции «смешанных анионных радикалов» П.А. Сандомирского и Н.В. Белова. Привести примеры различных вариантов анионных построек смешанного типа.
Полиморфный ряд фосфатов *AM*[PO4] (*A* = K, *M* = Fe, Zn, Ni, Mn). Особенности кристаллохимии.
Генетическая кристаллохимия криолитионита.
Генетическая кристаллохимия либетенита.

Расчетные домашние задания:

Основные породообразующие силикаты: кристаллохимическая классификация и кристаллогенетические взаимоотношения.

Роль водородных связей в структурах минералов на примере водных полиоксованадатов и сульфато-фосфатов.

Структурные аналоги минералов и их роль в современных технологиях (ионные аккумуляторы, магнитные материалы, матрицы для захоронения радиоактивных отходов, молекулярные сита и др.).

Какие минералы самые сложные? (Критерии оценки сложности кристаллической структуры и химического состава минерала).

Биоминералы, пути их формирования и роль в современном обществе.

Литофильная геохимическая система и ее моделирование в лаборатории: экспериментальные возможности, подходы, ограничения.

Эволюционная концепция геохимических процессов (по А.Е. Ферсману).

«Вилка» Боуэна и кристаллохимическая интерпретация теории магматической дифференциации породообразующих силикатов Н.В. Белова.

Таблица химических элементов Д.И. Менделеева – ключ к пониманию многих кристаллохимических закономерностей.

Первая (У. Брэгга) и вторая (Н.В. Белова) главы кристаллохимии силикатов.

Различные подходы к интерпретации кристаллических структур: какой выбрать? Кристаллохимия боратов: принципы классификации, основные структурные блоки, роль катионов и молекул воды в формировании структурных типов.

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

Примерный перечень вопросов при промеж ут очной ат т ест ации:

1. Характеристика гетерополиэдрического (смешанного) каркаса. Особенности строения и свойства минералов данного типа, их отличие от минералов с однородными

октаэдрическими и тетраэдрическими каркасами.

2. Строение и свойства микропоровых минералов с гетерополиэдрическими каркасами групп ловозерита и лабунцовита.
3. Особенности строения и причины разнообразия минеральных видов групп ловозерита и лабунцовита.
4. Механизмы твердофазных превращений в группах ловозерита и лабунцовита. Общие черты и различия.
5. Особенности структурных соотношений в полиморфном ряду Ca_2SiO_4. Структурные типы глазерита-арканита-оливина.
6. Механизмы фазовых переходов и причины структурного родства синтетических и природных соединений полиморфного ряда Ca_2SiO_4.
7. Глазеритовый модуль как фундаментальный строительный блок соединений полиморфного ряда Ca_2SiO_4. Способы комбинаций блока в структурах, производных от глазеритовой.
8. Характеристика трехслойных модулей-блоков: *T-O-T* и *H-O-H* на примерах структур слюд и их титаносиликатных аналогов.
9. Особенности строения минералов групп бафертисита и астрофиллита. Роль катионного состава и способа объединения трехслойных пакетов при образовании новых минеральных видов.
10. Гибридные структуры, производные от структур бафертиситового и астрофиллитового типов. Примеры.
11. Сходство и различие гетерофиллосиликатов с псевдокаркасными постройками и микропоровых силикатов с гетерополиэдрическими каркасами.
12. Строение минералов семейства «палысепиолов» как производных от пироксенов и амфиболов. Примеры.
13. Особенности строения интерсилита и его место в ряду родственных структур.
14. Основные строительные единицы в кристаллических структурах боратов. Наиболее распространенные структурные фрагменты.
15. Основные классификационные схемы боратных минералов. Примеры структур минералов с однородными B-радикалами.
16. Типология слоев и примеры слоистых структур боратов с различными фундаментальными строительными блоками.
17. Общие черты строения филлопентаборатов групп бирингучита и витчита.
18. Трехслойные пакеты в структурах пентаборатов с полярными борокислородными слоями. Их состав. Особенности симметрийной связи слоев внутри пакета и между отдельными пакетами.
19. Принцип выделения фундаментального строительного блока в группе витчитоподобных пентаборатов, его состав и точечная симметрия.
20. Влияние состава, симметрии фундаментальных строительных блоков и способов их объединения в структурах витчитоподобных политипов на разнообразие минеральных видов. Особенности структур бирингучита, назинита и говерита.
21. Особенности строения триборатов с постоянным отношением $CaO:B_2O_3$= 2:3 и роль воды в структурном разнообразии минералов указанной группы.
22. Основные принципы анион-центрированной кристаллохимии на примере висмут содержащих оксидов и оксосолей. Особенности строения указанных соединений и структурная обусловленность свойств.
23. Принципы выделения комплексов из анион-центрированных тетраэдров и треугольников и сравнительный кристаллохимический анализ синтетических оксофосфатов висмута.

Шкала и критерии оценивания результатов обучения по дисциплине.

Результаты обучения	«Неудовлетво-рительно»	«Удовлетво-рительно»	«Хорошо»	«Отлично»
Знание: *основных методов и подходов поиска закономерных связей между кристаллохими-ческими особенностями минералов и условиями их формирования*	Знания отсутствуют	Фрагментарные знания	Общие, но не структурирован-ные знания	Систематичес-кие знания
Умение: *проводить сравнительный анализ кристаллических структур минералов и их синтетических разновидностей, обнаруживать типоморфные структурные параметры, выявлять кристаллохими-ческую функцию амфотерных катионов, находить взаимосвязи в цепочке кристалл – среда*	Умения отсутствуют	В целом успешное, но не систематическое умение, допускает неточности непринципиаль-ного характера, обнаруживает неуверенность	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы умение проводить сравнительный кристаллохими-ческий анализ, выявлять типоморфнные структурные параметры и взаимосвязи в цепочке кристалл - среда	Успешное умение проводить сравнительный кристаллохими ческий анализ, выявлять типоморфнные структурные параметры и взаимосвязи в цепочке кристалл - среда
Владение: *навыками кристаллогене-тических исследований минералов*	Навыки проведения кристалло-генетических исследований отсутствуют	Фрагментарное владение методикой, неуверенное использование полученных навыков	В целом сформированные навыки проведения кристаллогенети-ческих исследований	Уверенное владение методикой кристаллогене-тических исследований минералов

8. Ресурсное обеспечение:

А) Перечень основной и дополнительной литературы.

- основная литература:

а) основная литература

Белов Н.В. Очерки по структурной минералогии. М.: Недра, 1975.

б) дополнительная литература

Якубович О.В., Урусов В.С. Генетическая кристаллохимия фосфатов гранитных пегматитов // Вестник МГУ. Сер. 4, Геология. 1996. № 2. С. 28 - 54.
Якубович О.В., Урусов В.С. Роль прецизионных рентгенодифракционных исследований в решении проблем генетической кристаллохимии // Сборник «Проблемы кристаллологии», Вып. 5, Москва, изд-во «Геос», 1999, С. 170 - 195.
Якубович О.В. Структурный типоморфизм амфотерных оксокомплексов в литофильной геохимической системе кристаллогенезиса: генетическая кристаллохимия ванадия // Сборник «Проблемы кристаллологии», Вып. 6, Москва, изд-во «Геос», 2009, С. 101-120.
Якубович О.В., Кирюхина Г.В. Модульное представление кристаллических структур и новые полисоматические серии. Сборник «Проблемы кристаллологии», Вып. 7, Москва, 2019, С. 81-111.
Yakubovich O. Phosphates with amphoteric oxocomplexes: from structural features to genetic conclusions // Z. Kristallogr. 2008, Bd. 223, S. 126-131.
Yakubovich O. Phosphates with amphoteric oxocomplexes: crystal chemical features and expected physical properties // Minerals as advanced materials I. Sergey V. Krivovichev (Ed.). Springer, 2008, P. 129 – 110.
Yakubovich O. Microporous vanadylphosphates – perspective materials for technological applications // Minerals as advanced materials II. Sergey V. Krivovichev (Ed.). Springer, 2011.
Yakubovich O., Steele I., Massa W., Dimitrova O. Genetic aspects of borophosphate crystal chemistry // Zeitschfrift für Kristallographie, 2013, том 228, № 10, с. 509-519.
Yakubovich O.V., Dem'yanetz L.N., Massa W. A new Cu, Al fluoride disilicate $CuAl_2F_2(Si_2O_7)$ and its relations to topaz. Zeitschrift fuer Anorganische und Allgemeine Chemie, 2000, том 626, № 7, с. 1514-1518.
Massa W., Yakubovich O.V., Kireev V.V., Mel'nikov O.K. Crystal structure of a new vanadate variety in the lomonosovite group: $Na_5Ti_2O_2[Si_2O_7](VO_4)$. Solid State Sciences, 2000, том 2, № 6, с. 615-623.
Yakubovich O.V., Massa W., Liferovich R.P., Pakhomovsky Y.A. The crystal structure of bakhchisaraitsevite, $[Na_2(H_2O)_2]\{(Mg_{4.5}Fe_{0.5})(PO_4)_4(H_2O)_5\}$, a new mineral species of hydrothermal origin from the Kovdor phoscorite-carbonatite complex, Russia. Canadian Mineralogist, 2000, том 38, с. 831-838.
Yakubovich O., Massa W., Dimitrova O.V. A new type of anionic framework in microporous potassium iron (II) phosphate $K[Fe(PO_4)]$. Z.Inorg.Allg.Chem, 2005, том 631, № 12, с. 2445-2449.
Massa W., Yakubovich O.V., Dimitrova O.V. A novel modification of manganese orthophosphate $Mn_3(PO_4)_2$. Solid State Sciences, 2005, том 7, № 8, с. 950-956.
Yakubovich O.V., Massa W., Dimitrova O.V. A new type of mixed anionic framework in microporous caesium titanium vanadyl(V) phosphate $Cs_2[Ti(VO_2)_3(PO_4)_3$. Solid State Sciences, 2006, том 8, № 1, с. 71-76.
Якубович О.В., Масса В., Чуканов Н.В. Кристаллическая структура бритвинита $[Pb_7(OH)_3F(BO_3)_2(CO_3)][Mg_{4.5}(OH)_3(Si_5O1_4)]$ – нового слоистого силиката с оригинальным типом кремнекислородных сеток. Кристаллография, 2008, том 53, № 2, с. 233-242.
Якубович О.В., Котельников А.Р., Щекина Т.И., Граменицкий Е.Н., Зубков Е.С. Новый представитель в структурном типе содалита с внекаркасными анионами [AlF6]. Кристаллография, 2011, том 56, № 2, с. 217-224.

Б) Перечень лицензионного программного обеспечения пакеты программ

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.

https://www.mindat.org/- база данных минералов American Mineralogist.

Г) программное обеспечение и Интернет-ресурсы (лицензионное программное обеспечение не требуется):
http://cryst.geol.msu.ru/courses/sravn/ − официальная страница курса;

Д) Материально-технического обеспечение: - персональные компьютеры.

9. Язык преподавания – русский.

10. Преподаватель (преподаватели) – О.В. Якубович

11. Автор (авторы) программы – О.В. Якубович