

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

УТВЕРЖДАЮ
Декан геологического факультета
МГУ имени М.В.Ломоносова
чл.-корр. РАН Еремин Н.Н.



«18» декабря 2025г.

ОЦЕНОЧНЫЕ И МЕТОДИЧЕСКИЕ МАТЕРИАЛЫ (ФОС)

для оценивания результатов обучения
по дисциплине (модулю):

Вар Кристаллохимия

Направление подготовки/ специальность:

05.03.01 Геология

Профиль программы бакалавриата:

Геохимия

Форма обучения:

Очная

Москва 2025

Фонд оценочных средств по дисциплине «**Кристаллохимия**» разработан на основе ОС по специальности/направлению подготовки 05.03.01 Геология, утвержденного приказом по МГУ от 21.12.2021 № 1404 (в действующей редакции)

© Геологический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова

Программа не может быть использована другими подразделениями университета и другими вузами без разрешения факультета.

1. Требования к результатам освоения дисциплины

№ п/п	Код компет енции	Содержание компетенции (или ее части)	Индикаторы достижения компетенций	Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с индикаторами достижения компетенций		
				Знать	Уметь	Владеть
1	ОПК-1.Б.	Способен решать стандартные задачи профессиональной деятельности в соответствии с профилем подготовки	Б.ОПК-1. И-1. Использует базовые знания фундаментальных разделов математических и естественных наук в профессиональной деятельности Б.ОПК-1. И-2. Использует базовые знания фундаментальных разделов наук о Земле в профессиональной деятельности	физико-химические основы кристаллохимии		
	ОПК-2.Б.	Способен применять теоретические основы фундаментальных геологических дисциплин при решении задач профессиональной деятельности.	Б.ОПК-2. И-1. Использует теоретические знания о закономерностях и особенностях геологических процессов для решения профессиональных задач.	основные законы, определяющие кристаллическую структуру минералов, взаимосвязь кристаллической структуры и физических свойств кристаллов		

	ОПК-3.Б.	Способен решать стандартные задачи профессиональной деятельности в соответствии с профилем подготовки	Б.ОПК-3. И-1. Использует типовые подходы и методы при решении задач профессиональной деятельности. Б.ОПК-3. И-2. Владеет базовыми навыками получения информации (полевой, камеральной, лабораторной) для решения стандартных задач профессиональной деятельности в соответствии с профилем подготовки. Б.ОПК-3. И-3. Владеет базовыми навыками обработки и интерпретации информации при решении стандартных задач профессиональной деятельности в соответствии с профилем подготовки		пользоваться современным и 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	структурной систематикой неорганических кристаллов, современным и программами визуализации кристаллических структур, методическим и приемами кристаллохимического прогноза, способами описания кристаллических структур, как в стандартном, так и в анионоцентрированном представлении.
--	----------	---	--	--	---	--

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

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

Текущий контроль усвоения дисциплины осуществляется при сдаче каждым студентом выполненных домашних работ. Для текущего контроля студентов в ходе семестра проводятся контрольные работы.

Форма промежуточного контроля – третий семестр зачет, итогового контроля – 4 семестра экзамен.

Шкала и критерии оценивания результатов обучения по дисциплине применяется для всех типов контроля.

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

Коллоквиум №1 – письменный тест по темам: «Эволюция кристаллохимических идей»,

«Свойства свободных атомов и ионов» - включает в себя 8 вопросов, кристаллохимическое описание структуры согласно списку, расчетную задачу по пройденному материалу. В суммарную оценку за коллоквиум также входит текущее ведение персонального атласа кристаллических структур.

Коллоквиум №2 - письменная работа по темам «Химическая связь» и «Свойства атомов в кристалле» - включает в себя теоретический вопрос, кристаллохимическое описание структуры согласно списку, расчетную задачу по пройденному материалу. В суммарную оценку входит текущее ведение персонального атласа кристаллических структур, также оцениваются персональные навыки работы в программах визуализации кристаллических структур.

Коллоквиум №3 - письменная работа по теме «Морфотропия» - включает в себя теоретический вопрос, кристаллохимическое описание структуры согласно списку, расчетную задачу по пройденному материалу. В суммарную оценку входит текущее ведение персонального атласа кристаллических структур

Коллоквиум №4 - письменная работа по теме «Полиморфизм и политипия»

- включает всебя теоретический вопрос, кристаллохимическое описание структуры согласно списку, расчетную задачу по пройденному материалу. В суммарную оценку за коллоквиум входит текущее ведение персонального атласа кристаллических структур и сдача первого персонального задания (реферата).

Коллоквиум №5 - письменная работа по темам «Изоморфизм», «Структурная гомология», «Методы кристаллохимического прогноза» - включает в себя теоретический вопрос, кристаллохимическое описание структуры согласно списку, расчетную задачу по пройденному материалу. В суммарную оценку за коллоквиум входит текущее ведение персонального атласа кристаллических структур и сдача второго персонального задания (реферата).

Примерный список вопросов и задач по материалу

- Из каких двух основных частей состоит волновая функция электрона?
- Какова форма и симметрия волновых функций с разными орбитальными квантовыми числами?
- Какими функциями описывается распределение электронной плотности?
- Что такое орбитальный радиус электронной оболочки? Что такое орбитальный радиус атома или иона?
- Дайте определения принципа Паули и правила Гунда.
- Назовите основные принципы заполнения электронных уровней атомов. Какова их связь с периодичностью свойств химических элементов в Системе Менделеева?
- Укажите основные группы элементов по строению их электронных оболочек. Что лежит в основе разделения элементов на *a* и *b* подгруппы?
Какие свойства характеризуют энергию связи валентных электронов с атомным остовом
- Какая связь существует между размерными и энергетическими характеристиками электронных оболочек?
- Для чего вводятся понятия валентного состояния атома и гибридизации валентных орбиталей? Можно ли дать их строго физическое обоснование или они должны рассматриваться как вспомогательные, облегчающие понимание валентности понятия?
- Дайте определение орбитальной электроотрицательности. Какое свойство атома характеризует эта функция? Как понятие валентного состояния атома связано с орбитальной электроотрицательностью?
- Что характеризует поляризуемость атома или иона? С каким атомным свойством она ближе всего связана?
- На какие группы делятся атомы по их магнитным свойствам? Какие атомы и ионы имеют постоянный магнитный момент?
- В рамках какой теории кислот и оснований можно приписать атомам и ионам кислотно-основные свойства? Какие

характеристики или свойства атомов(ионов) используются для построения шкалы кислотности-основности?

- На какие основные типы можно разделить химические связи в кристаллах?
- Как суммируется электростатическая энергия взаимодействия между ионами в кристалле? Что такое константа Маделунга, от чего она зависит и что она характеризует?
- Какими эмпирическими законами описывается энергия отталкивания между ионами в кристалле?
- Дайте определение понятия «энергия решетки» и напишите основные уравнения для этой величины.
- Запишите цикл Борна-Габера для экспериментального определения энергии решетки.
- В чем причина особого поведения ионов переходных металлов в кристаллическом поле? Что такое энергия стабилизации и как она определяется для координационных полиэдров разного типа?
- В чем состоит разница между высоко- и низкоспиновым состояниями? Какова природа энергии предпочтения октаэдрической координации перед тетраэдрической для ионов переходных металлов и как она управляет структурой таких кристаллов, как нормальные и обращенные шпинели?
- Приведите основные характеристики ковалентной связи в сравнении с ионной. В чем заключается структурное различие между ними? Дайте определение правила Юм-Розери и несколько примеров структур для его иллюстрации.
- Почему кремний и германий имеют только одну кристаллическую структуру типа алмаза, а углерод широко представлен двумя модификациями – структурами алмаза и графита? Какова причина столь резкого различия свойств этих двух модификаций?
- В чем причина резкого различия химии и кристаллохимии углерода – основы органических соединений («царства живого вещества»), и кремния - основы кремнезема и силикатов (главных представителей «царства минералов»)?
- Как можно описать промежуточные между ионными и ковалентными связи, что такое степень ионности? Определите понятие «электроотрицательность» и укажите способы его отыскания. Обрисуйте основные черты изменения значений электроотрицательности элементов в группах и периодах Периодической Системы.
- Опишите основные черты энергетического зонного строения металлов, полупроводников и диэлектриков. Почему столь различны электрические свойства гомологов по 4-ой группе: углерод (алмаз) – изолятор, кремний, германий и серое олово – полупроводники, белое олово и свинец – металлы?
- Почему одни одновалентные элементы (водород и галоиды) образуют молекулярные кристаллы, а другие одновалентные элементы (щелочные элементы, медь, серебро, золото) – металлические кристаллы?
- Как можно охарактеризовать происхождение энергии сцепления и основные черты структур металлов с помощью моделей «желе» и «электронного газа»?
- Что можно сказать о структурах и свойствах металлоидов - простых веществ, переходных между ковалентными и

металлическими? Почему висмут при плавлении сжимается?

- В результате каких электронных взаимодействий возникает Ван-дер-ваальсова связь, в каких кристаллах она определяет их структуру и какую? Присутствует ли она в других веществах и почему? Почему с возрастанием атомного номера температуры плавления молекулярных кристаллов галоидов растут, а щелочных металлов – уменьшаются?
- Водородная связь, ее происхождение и свойства. Как водородная связь действует в структуре льда?
- Что является причиной огромной роли и большой распространенности водородной связи в структурах органических веществ и минералов, образующихся на поверхности Земли?
- Почему в гомологическом ряду H_2O - H_2S - H_2Se - H_2Te лед обладает аномально высокой температурой плавления? Каковы структурные причины увеличения плотности при плавлении льда?
- Укажите приблизительное соотношение между энергиями ионной (ковалентной, металлической), водородной и Ван-дер-ваальсовой связей.
- Какие характеристики различных типов химической связи в кристаллах являются общими, а какие отличают их друг от друга? Имеются ли различия в физических свойствах этих основных групп кристаллов и какие?
- Приведите примеры кристаллов, в которых атомы связаны одновременно с помощью нескольких различных типов химической связи.
- Какие подходы использовались при выводе основных систем ионных радиусов? Кто были их создатели?
- Каким образом выводились основные систематики атомных радиусов?
- От каких факторов зависит величина ионного радиуса?
- Дайте определение Ван-дер-ваальсовых радиусов.
- Что такое кристаллический радиус атома?
- Каким образом можно оценить эффективный заряд атома в кристалле?
- Рассчитайте радиус атома меди, если известно, что параметр элементарной ячейки Cu равен 3,61 Å.
- Рассчитайте нижний предел устойчивости катиона в тетраэдрической координации.
- Рассчитайте нижний предел устойчивости катиона в октаэдрической координации.
- Рассчитайте нижний предел устойчивости катиона в квадратной координации.
- MgFe_2O_4 – полностью обращенная шпинель. Определите валентность и координационное окружение атомов железа, если известно, что в одной элементарной ячейке содержатся 16 кислородных октаэдров, а валентность атомов Mg равна 2.
- FeAl_2O_4 – нормальная шпинель. Определите координационное окружение каждого катиона и валентность железа, если известно, что в одной элементарной ячейке шпинели 16 кислородных октаэдров, а валентность атомов Al равна 3.

- В энстатите MgSiO_3 атомы Mg занимают октаэдрические ($\text{КЧ}=6$), а Si -тетраэдрические ($\text{КЧ} = 4$) позиции. Найти КЧ (O).
- Рассчитайте константу Маделунга для кристаллов а) NaCl; б) MgO в приближении 2-ой координационной сферы центрального атома.
- Рассчитайте константу Маделунга для кристалла CsCl в приближении 2-ой координационной сферы центрального атома.
- Рассчитайте константы Маделунга для кристалла Li_2O в приближении 2-ой координационной сферы центрального катиона, центрального аниона.
Рассчитайте константу Маделунга для кристалла CaF_2 в приближении 2-ой координационной сферы центрального катиона, центрального аниона
- Энергия решетки элементарной ячейки NaCl = -32.60 эВ. Рассчитайте значение энергии атомизации кристалла, используя данные Приложения 1-2.
- Связь Ti-O в рутиле TiO_2 на 52% ионная. Определите валентности и эффективные заряды всех атомов, образующих это соединение.
- Связь Si-O в стишовите SiO_2 на 49% ионная. Определите валентности и эффективные заряды всех атомов, образующих это соединение.
- Электроотрицательность лития (по Полингу) равна 1 и его сродство к электрону $F=0.4$ эВ. С помощью формулы Малликена оцените его первый потенциал ионизации.
- Электроотрицательность фтора (по Полингу) равна 4 и его потенциал ионизации $I=17.4$ эВ. С помощью формулы Малликена оцените его сродство к электрону.
- В структуре NaCl ионы Cl образуют кубическую плотнейшую упаковку из несжимаемых шаров. Параметр элементарной ячейки NaCl = 5.65 Å. Определите ионный радиус Na^+ , если ионы Cl^- соприкасаются друг с другом.
- Энергия решетки U элементарной ячейки стишовита SiO_2 равна - 259 эВ. Рассчитайте значение энергии атомизации кристалла. Последовательные потенциалы ионизации кремния равны: $I_1=8$ эВ, $I_2=15$ эВ, $I_3=23$ эВ, $I_4=57$ эВ. Значения сродства к электрону для кислорода равно: $F_1=1,5$ эВ, $F_2=-9$ эВ.
- Во сколько (примерно) раз менее поляризуем Be^{2+} (ионный радиус 0.3 Å) чем I^- и Br^- с ионными радиусами (2.1 Å) и (1.8 Å), соответственно?
- Берлинит AlPO_4 - изоструктурный аналог кварца, в котором половина атомов Si замещена на Al, а половина на P. Исследования распределения электронной плотности выявили, что заряд Al меньше формальной валентности в 3 раза, а интегрирование электронной плотности в области кислорода привело к величине 8,6 e. Определите величины эффективных зарядов атомов.
- Запишите кристаллохимическую формулу фаялита Fe_2SiO_4 , если

известно, что в этом силикате анионы образуют плотнейшую гексагональную упаковку. Известно также, что в этой ГПУ занято $1/8$ тетраэдрических пустот, а атомы железа занимают половину октаэдрических пустот.

- Дайте определения основных категорий кристаллохимии.
- Почему взаимосвязь между категориями удобно изображать в виде тетраэдра?
- Какие наблюдения подвели П.Грота к введению понятия «морфотропия»?
- Сформулируйте принципы, которым должны подчиняться стабильные структуры существенно ионных кристаллов.
- В чем геометрический смысл правил Магнуса-Гольдшмидта и 1-ого Правила Полинга? Какой фундаментальный принцип отражает второе правило Полинга?
- Какие с точки зрения 2-ого правила Полинга максимальные отклонения допустимы от суммы валентных усилий для существования устойчивой кристаллической постройки?
- Возможно ли применять 2-ое правило Полинга для структур с существенной долей ковалентности связи?
- Каким образом можно выделить первую координационную сферу центрального атома?
- Во сколько раз вырастут силы отталкивания, если тетраэдры соединить не по вершине, а по ребру (по грани)?
- Во сколько раз вырастут силы отталкивания, если октаэдры соединить не по вершине, а по ребру (по грани)? Каким образом кристалл компенсирует это увеличение сил отталкивания?
- В чем геометрический смысл фактора толерантности?
- В чем (с точки зрения фактора толерантности) причина неупорядоченного вхождения различных катионов как в тетраэдрическую, так и в октаэдрическую позицию структуры шпинели?
- На чем основано деление кристаллохимии силикатов на 2 главы: «Брэгговскую» и «Беловскую»?
- В чем практическая польза введения Гольдшмидтом понятия «модельных структур»?
- В какие правила трансформируется правило Юм-Розери для простых веществ в случае бинарных соединений типа M_kX_l ?
- Приведите примеры поликатионных и полианионных кристаллических соединений. Каковы их структурные особенности?
- Почему помимо числа 18 Белов ввел еще одно «магическое число 13(14)?
- Как были объяснены отличия между структурными типами FeS_2 , с одной стороны и MoS_2 и CdI_2 , с другой стороны?
- К каким структурным образованиям ведет избыток валентных электронов катионов? Приведите примеры.
- В чем особенность кристаллохимии существенно ковалентных соединений с неполновалентными катионами? Приведите примеры.
- До каких пор атом кремния устойчиво сохраняет в структуре тетраэдрическую координацию? В каком случае он меняет ее на октаэдрическую?

- Поясните действие правила взаимного влияния связей на примере силикатов.
- В чем выражается родственность структур CdI_2 -NiAs- Ni_2In ?
- В чем выражается родственность структур WO_3 и перовскита?
- Каковы структурные причины существования гибридных построек биопириболов?
- Напишите последовательный ряд вырожденных структур для станнина.
- Напишите последовательный ряд производных структур от структурного типалонсдейлита.
- Какие полиэдры могут возникнуть, если удалить одну или две вершины у куба? Приведите примеры соединений с такими полиэдрами.
- В чем отличие реконструктивных и дисторсионных переходов?
- Возможно ли изменить первое координационное число без разрыва химических связей? Если возможно, то каким образом? Приведите примеры.
- Что такое переход Вервея?
- К каким типам полиморфных переходов относятся следующие структурные превращения: α -кварц – β -кварц – тридимит – кристобалит – стишовит?
- Увеличивается или уменьшается симметрия при образовании сверхструктур?
- Увеличивается или уменьшается симметрия при появлении эффектов вращения радикалов?
- В чем причина резкого скачка объема элементарной ячейки Се под действием давления около 7 кбар?
- В чем причина резкого скачка объема элементарной ячейки гематита под действием давления около 500 кбар?
- В чем заключаются структурные причины повышения симметрии более высокотемпературных полиморфных модификаций?
- Приведите примеры понижения симметрии более высокотемпературных полиморфных модификаций.
- Как влияет давление на структуры полиморфных модификаций?
- Как объяснить увеличение под действием давления поля стабильности киновари HgS (первые координационные числа 2 и 2) относительно метациннабарита (первые координационные числа 4 и 4)?
- Какие параметры являются более правильными, чем КЧ, характеристиками относительной плотности структуры?
- В чем причины резкого преобладания среди минералов кристаллов низших и средних сингоний? Отличается ли симметричная статистика минералов от статистики неорганических соединений?
- Опишите с помощью символов Жданова 15 слойную модификацию карборунда ABCBAACBACBACB . В чем состоит принцип его символики?
- Опишите с помощью символов Полинга 21 слойную модификацию карборунда $\text{ABCACBACBACBACBACBACBACB}$. В чем состоит принцип его символики?
- В чем отличия понятий «изоморфная смесь» и «твердый раствор замещения»?
- В чем отличия понятий «изоморфизм», «изотипность» и

«изоструктурность»?

- Какие кристаллы Митчерлих считал изоморфными и почему?
- Опишите возможные схемы гетеровалентных замещений без изменения общегочисла атомов в элементарной ячейке.
- Опишите два основных вида гетеровалентных замещений с изменением числа атомов в ячейке. Насколько принципиально они отличаются друг от друга?
- В чем отличие правила Вегарда и Ретгерса?
- Какими, согласно Гольдшмидту и Юм-Розери, могут быть максимальные геометрические различия между изоморфными атомами?
- Приведите примеры правила полярности изоморфизма.
- На что может указывать знакопеременный характер отклонения от правила Ве-гарда?
- Кто должен легче входить в чужую кристаллическую структуру: Na^+ в сильвин KCl , или K^+ в галит NaCl ? Обоснуйте ответ.
- Приведите примеры действия правил ассистирования и депрессии.
- В чем заключается эффект улавливания микропримеси?
- Какие два фактора обеспечивают разные типы диаграмм состояния бинарной смеси?
- В чем состоят причины неодинаковой распространенности минералов и неорганических соединений по различным сингониям?
- Каким образом можно сконструировать пробную структуру кристалла определенного состава?
- Каким образом можно уточнить пробную структуру кристалла определенного состава?

2) Список кристаллических структур к изучению: Ag, Al, Au, модификации железа, модификации кварца, BaTiO_3 , BeO, латунь, $\text{Ca(BO}_3)_2$, CdI_2 -2сл, CdI_2 -3сл, Ce, Cs, CsCl , Cu_3Au , CuAu , GeO_2 , HgSe , KDP, KTP, Li_2O , LiOH, Ni_2In , Pb, PI_2 , RbNO_3 , ReO_3 , ReS_2 , SCL , ZnIn_2S_4 , ZnP_2 , агрон, алабандин, александрит, аллеганит, алмаз, альбит, альмандин, анатаз, андалузит, андрадит, анортит, антигорит, апатит-беловит, арагонит, аргутит, арсенолит, ауростибит, бадделейт, баотит, барит, беловит, бёмит, бенитоит, берилл, биксбиит, борнитрид, броммелит, брукит, брусит, ванадомалаяит, висмут, витерит, волластонит, вульфенит, вюртцит, вюстит, галенит, галит, гафнон, гафнон, гейкилит, гексастаннин, гелий, гематит, георгобоксит, германий, гётит, гиббсит, гидраргиллит, гипс, гранаты, граутит, графит 2 сл, графит 3 сл, гринокит, гроссуляр, гумит, джерригиббсит, диаспор, диопсид, диоптаз, доломит, известь, ильменит, йод (хлор), каламин, кальциоборит, кальцит, каолинит, карбид кальция, карборунд, карелианит, касситерит, квазикристаллы (сплавы), кианит, киноварь, киноит, клиногумит, кнориингит, кноррингит, корунд, коттунит, коффинит, коэсит, кремний, кристобалит, ксенотим, кубанит, куперит, куприт, лабрадор, лантан, лед, лейкофёницит, лепидокрокит, литвинскит, лонсдейлит, магнезит, магнетит, магний, малаяит, мангангумит, марказит, медь, метациннобарит, микроклин, миллерит, молибденит, муассонит, мусковит, мышьяк, накафит, никелин,

норбергит, оливин, олово-белое, олово-серое, ольдгамит, ортоклаз, отавит, периклаз, перовскит, пирит, пиролюзит, пироп, пирофанит, пирофиллит, пирохлор, пирротин, повеллит, полоний, полунит, псевдобрукит, реальгар, риббеит, рингвудит, родохрозит, ртуть, рутил, санидин, сейдозерит, селен, селлаит, сенамортит, сера (2 модификации), сидерит, силлиманит, сильвин, смитсонит, содалит, соналит, спессартит, станнин, стишовит, стронцианит, сурьма, сфалерит, сфен, талантит, тальк, таусонит, теллур, тетраэдрит, тефроит, титан, топаз, торит, тортвейтит, тремолит, тридимит, троилит, турмалин, уваровит, уголек, уранинит, урусовит, фазы Лавеса, фаялит, фенакит, флогопит-биотит, флюорит, форстерит, фуллерены (модификации), халькопирит, хондрит, хризоберилл, хризотил, хромит, целестин, церрусит, циммофан, цинк, цинкит, циркон, цоизит, шеелит, шпинели, энстатит, эсколаит

Домашние задания для самостоятельной подготовки студентов

3) План кристаллохимического описания кристаллической структуры:

а) Кристаллографическое описание:

- Определить ячейку Браве структуры.
- Подсчитать, сколько атомов различного типа приходится на ячейку Браве, определить кристаллохимическую формулу соединения, число формульных единиц.
- Определить взаимную координацию атомов, КЧ и КП для каждого сорта атомов.
- Там, где возможно, – идентифицировать атомы разного сорта.

б) Кристаллохимическое описание структуры:

- Там, где возможно, - использовать термины плотнейшей упаковки.
- Указать характер сочленения разнообразных структурных фрагментов.
- Пояснить предпочтение атомов определенного сорта наблюдаемым позициям.
- Указать, какие именно минералы кристаллизуются в этом структурном типе.
- По возможности сослаться на родственные структуры (производные, вырожденные, фазы вычитания и внедрения).
- Указать на границы устойчивости структурного типа (существование морфотропного ряда, гомологических связей с другими структурами, наличие полиморфных модификаций).
 - Указать возможный изоморфизм в конкретных атомных позициях.
 - Указать типы химических связей между атомами.

в) нарисовать кристаллическую структуру в плане, выделив контуры элементарной ячейки и обозначив высоты (координаты z) атомов.

г) Нарисовать репрезентативный фрагмент структуры в компьютерной программе-визуализаторе (ATOMS, Diamond и др.)

3. Вопросы и задания для текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины.

1. Основные вехи истории кристаллохимии. Кристаллохимия среди других наук о веществе. Основные задачи кристаллохимии.
2. Свойства атомов, важные для кристаллохимии: угловая форма

орбиталей, орбитальные радиусы, потенциалы ионизации и сродство к электрону, орбитальные электроотрицательности, поляризуемость, кислотно-основные свойства.

3. Построение периодической системы элементов: принцип Паули, правило Гунда.
4. Потенциалы ионизации и сродство к электрону. Периодическая зависимость от порядкового номера Z . Химические свойства и классификация элементов: металлы, полуметаллы и неметаллы.
5. Понятие об электроотрицательности. Шкала электроотрицательности Полинга. Связь электроотрицательности с потенциалом ионизации и сродством к электрону (формула Малликена). Степень ионности связи и разность электроотрицательностей.
6. Поляризуемость атомов и ионов. Ее связь с размерами атомов и ионов. Слоистые структуры как результат поляризации анионов.
7. Структуры гомодесмические и гетеродесмические. Структурные мотивы, примеры структур с разными мотивами.
8. Координационные полиэдры и координационные числа. Связи между координационными числами разных атомов в структуре. Среднее координационное число. Структурный тип. Изоструктурность, изотипность, структурный класс. Гомеотипия.
9. Структурные единицы кристалла. Мотив структуры. Кристаллохимические формулы.
10. Эффективные радиусы ионов. Критерии вывода радиусов Ланде, Гольдшмидта, Полинга.
11. Зависимость ионного радиуса от заряда, координационного числа, спинowego состояния.
12. Периодические зависимости ионных радиусов.
Лантаноидное сжатие. Атомные и ковалентные радиусы. Их периодические зависимости. Соотношение между атомными и ионными радиусами
13. Ван-дер-ваальсовы радиусы.
14. Распределение электронной плотности и «кристаллические» радиусы атомов. Сжатие аниона и расширение катиона в кристаллическом поле.

15. Эффективные заряды атомов в кристалле и методы их определения
16. Структурные особенности разных типов связи: ионной, ковалентной, металлической, ван-дер-ваальсовой
17. Ионная связь. Энергия решетки ионных кристаллов.
18. Цикл Борна-Габера. Формулы Борна-Майера и Борна-Ландэ
19. Энергия связи в кристаллах: энергия решетки, энергия атомизации. Потенциальная кривая химической связи
20. Переходные типы химической связи в кристаллах. Степень ионности химической связи и разность электроотрицательностей. Структуры кристаллов, переходные от ионных к ковалентным.
21. Переходные типы химической связи в кристаллах. Структуры, переходные между металлическими и ковалентными.
22. Металлическая связь. Радиусы Металлических атомов. Основные структуры металлов.
23. Остаточная (вандерваальсова) связь. Ван-дер-ваальсовы радиусы. Молекулярные кристаллы.
24. Диполь-дипольные взаимодействия. Поляризация аниона в низкосимметричных позициях структуры (пример: O в структуре шпинели). Причина образования слоистых структур: структурные типы CdI_2 и MoS_2
25. Водородная связь. Строение кристаллогидратов. Структура льда. Структуры гидроксидов. Конфигурационная энтропия льда.
26. Элементы теории кристаллического поля. Спиновое состояние. Ионы переходных металлов в кристаллическом поле. Расщепление d -электронов в октаэдрическом окружениях. Предпочтение иона переходного металла к октаэдру или тетраэдру. Энергия стабилизации в кристаллическом поле. Радиусы ионов переходных металлов в высокоспиновом и низкоспиновом состояниях.
27. Кислотно-основные свойства атомов и ионов
28. Современные методы кристаллохимического прогноза. Критерии и принципы конструирования пробных структур.
29. Современные методы кристаллохимического прогноза. Возможные эмпирические методы уточнения пробных структур.
30. Современные методы кристаллохимического прогноза. Возможности атомистического полуэмпирического моделирования.

31. Современные методы кристаллохимического прогноза. Метод валентности связи.
32. Современные методы кристаллохимического прогноза. Метод DLS.
33. Современные методы кристаллохимического прогноза.
Расчеты из первых принципов. Возможности и ограничения метода.
34. Симметричная статистика минералов и неорганических соединений.
35. Современное программное обеспечение структурного моделирования различными методами.
36. Структурно несовершенные кристаллы. Классификация дефектов кристаллической структуры.
37. Эффект улавливания микропримеси.
38. Возможности моделирования структурных несовершенств кристалла.
39. Анионоцентрированная кристаллохимия.
40. Основы количественной теории изоморфизма. Принципы расчета областей распада изоморфных смесей. Возможные методы моделирования смесимости в твердых телах.
41. Локальная структура твердых растворов замещения. Понятия виртуального кристалла, модель чередования связей. Податливость позиции.
42. Внешние факторы изоморфизма. Влияние температуры и давления на изоморфизм
43. Внутренние факторы изоморфизма: роль различия свойств атомов (ионов) на смесимость.
44. Физико-химические основы изоморфизма. Роль энтропии и энтальпии смешения.
45. Соотношение между термодинамическими функциями смешения и типами диаграмм состояния на примере двухкомпонентной системы. Критическая температура распада и ее связь с энергией смешения.
46. Изоморфные ряды. Роль лантанидного сжатия в изоморфизме.
47. Изоморфизм, определение, история открытия и изучения. Классификация.
48. Эмпирические правила изоморфизма (Вегаарда, Ретгерса, Гольдшмидта, Юм-Розери).
49. Правило полярности изоморфизма Гольдшмидта для гомо- и гетеровалентных замещений.

50. Диагональные ряды и звезды изоморфизма Ферсмана.
51. Полярность изоморфизма, влияние общей структурной единицы на смесимость
52. Структурная гомология. Производные и вырожденные структуры.
53. Структурная гомология. Фазы вычитания и внедрения.
54. Структурная гомология. Полисоматические серии на примере ряда сейдозерит-накафит
55. Структурная классификация полиморфизма.
56. Полиморфные переходы 1 типа
57. Полиморфные переходы 2 типа
58. Полиморфные переходы 3 типа
59. Полиморфные переходы 4 типа
60. Полиморфные переходы 5 типа
61. Полиморфизм: определение, история открытия и изучения
62. Политипизм. Отличие от полиморфизма. Основные способы обозначения. Примеры.
63. Изменение симметрии кристалла при изменении Т и Р.
Координационные правила полиморфизма.
64. Критерии устойчивости структурного типа для ковалентных кристаллов. Диаграмма Музера-Пирсона
65. Критерии устойчивости структурного типа для ковалентных кристаллов. Правила Юм-Розери, Грима-Зоммерфельда, Музера-Пирсона
66. Критерии устойчивости структурного типа для ковалентных кристаллов. Обобщенное правило Пирсона для сложных соединений.
67. Критерии устойчивости структурного типа для ковалентных кристаллов. 1 и 2 правило Партэ
68. Критерии устойчивости структурного типа для ковалентных кристаллов. Числовые законы Белова
69. Фактор толерантности для ABX_3
70. Фактор толерантности для AB_2X_4
71. Модельные структуры Гольдшмидта
72. Морфотропный ряд силикатов
73. Локальный баланс валентностей (второе правило Полинга), примеры.
74. Критерии устойчивости структур ионных кристаллов. Первое

правило Полинга.Правило Магнуса-Гольдшмидта

75. 3, 4 и 5-ое правило Полинга

76. Основной закон кристаллохимии в формулировке Гольдшмидта и его современное понимание.

77. Основные категории кристаллохимии и соотношения между ними. «Тетраэдр»кристаллохимии.

78. Морфотропия. История изучения. Её закономерности (отношение радиусов катиона и аниона, поляризуемость и т.п).

Шкала и критерии оценивания результатов обучения по дисциплине (зачет).

Оценка результатов обучения, соответствующие виды оценочных средств	Незачет	Зачет
Знания: физико-химические основы кристаллохимии, основные законы, определяющие кристаллическую структуру минералов, взаимосвязь кристаллической структуры и физических свойств кристаллов	Фрагментарные знания или отсутствие знаний	Сформированные систематические знания или общие, но не структурированные знания
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	В целом успешное, но не систематическое умение или отсутствие умений	Успешное и систематическое умение или в целом успешное, но содержащее отдельные пробелы умение (допускает неточности не принципиального характера)
Владения: структурной систематикой неорганических кристаллов, современными программами визуализации кристаллических структур, методическими приемами кристаллохимического	Наличие отдельных навыков или отсутствие навыков	Сформированные навыки (владения), применяемые при решении задач или, в целом, сформированные навыки (владения), но используемые не в активной форме

прогноза, способами описания кристаллических структур		
---	--	--

Шкала и критерии оценивания результатов обучения по дисциплине (экзамен).

Результаты обучения	«Неудовлетвори тельно»	«Удовлетворите льно»	«Хорошо»	«Отлично»
Знания: физико-химические основы кристаллохимии, основные законы, определяющие кристаллическую структуру минералов, взаимосвязь кристаллической структуры и физических свойств кристаллов	Знания отсутствуют или весьма фрагментарны	Знания есть, но отсутствует их систематичность	Знания систематические, но имеются пробелы	Систематические знания в достаточном объеме
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	Умения отсутствуют	В целом успешное, но не систематическое умение, студент допускает неточности непринципиального характера	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы	Успешное умение пользоваться современным и базами кристаллохимических данных, давать полное описание кристаллической структуры по ее модели, чертежу либо словесному описанию, высказывать предположения о физических свойствах

Владения: структурной систематикой неорганических кристаллов, современными программами визуализации кристаллических структур, методическими приемами кристаллохимическог о прогноза, способами описания кристаллических структур, как в стандартном, так и в анионоцентрированн ом представлении	Навыки отсутствуют	Фрагментарное владение структурной систематикой, наличие отдельных навыков	В целом, навыки структурной систематикой неорганических кристаллов, современными программами визуализации кристаллически х структур, методическими приемами кристаллохими ческого прогноза сформированы	Успешное владение структурной систематикой неорганическ их кристаллов, современным и программами визуализации кристаллическ их структур, методическим и приемами кристаллохим ического прогноза, способами описания кристаллическ их структур, как в стандартном, так и в анионоцентри рованном представлени и
---	-----------------------	--	---	--

Автор программы: чл.-корр. РАН Еремин Н.Н.