

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
Федеральное государственное автономное учреждение  
высшего профессионального образования  
"Казанский (Приволжский) федеральный университет"  
Институт геологии и нефтегазовых технологий



**УТВЕРЖДАЮ**

Проректор  
по образовательной деятельности КФУ  
Проф. Минзарипов Р.Г.

\_\_\_\_\_ 20\_\_ г.

**Программа дисциплины**  
Кристаллохимия БЗ.В.8

Направление подготовки: 020700.62 - Геология

Профиль подготовки: Геохимия

Квалификация выпускника: бакалавр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

**Автор(ы):**

Бахтин А.И. , Лопатин О.Н. , Николаев А.Г.

**Рецензент(ы):**

Сунгатуллин Р.Х.

**СОГЛАСОВАНО:**

Заведующий(ая) кафедрой: Морозов В. П.

Протокол заседания кафедры No \_\_\_\_ от " \_\_\_\_ " \_\_\_\_\_ 201\_\_ г

Учебно-методическая комиссия Института геологии и нефтегазовых технологий:

Протокол заседания УМК No \_\_\_\_ от " \_\_\_\_ " \_\_\_\_\_ 201\_\_ г

Регистрационный No

Казань  
2013

## Содержание

1. Цели освоения дисциплины
2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы
3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля
4. Структура и содержание дисциплины/ модуля
5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения
6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов
7. Литература
8. Интернет-ресурсы
9. Материально-техническое обеспечение дисциплины/модуля согласно утвержденному учебному плану

Программу дисциплины разработал(а)(и) профессор, д.н. (профессор) Бахтин А.И. Кафедра минералогии и литологии Институт геологии и нефтегазовых технологий , Anatoly.Bakhtin@kpfu.ru ; доцент, д.н. (доцент) Лопатин О.Н. Кафедра минералогии и литологии Институт геологии и нефтегазовых технологий , Oleg.Lopatin@kpfu.ru ; инженер 1 категории Николаев А.Г. Кафедра минералогии и литологии Институт геологии и нефтегазовых технологий , Anatolij.Nikolaev@kpfu.ru

### 1. Цели освоения дисциплины

Целям освоения дисциплины (модуля) Б3.В.8 Кристаллохимия является краткое изложение науки о вещественном составе земной коры, являющейся базисом для изучения минералогии, петрографии, геохимии, курса полезных ископаемых, литологии. Раскрытие кристаллической сущности минералов и вытекающих из этого особенностей физических свойств, условий образования и поведения в земной коре, путей поисков полезных ископаемых и создания синтетических материалов с нужными физическими свойствами.

### 2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы высшего профессионального образования

Данная учебная дисциплина включена в раздел " Б3.В.8 Профессиональный" основной образовательной программы 020700.62 Геология и относится к вариативной части. Осваивается на 4 курсе, 8 семестр.

Программа курса Б3.В.8 Кристаллохимия является вариативной частью профессионального цикла дисциплин. Предназначена для студентов 4-го курса (8 семестр). Обучает студентов практическим навыкам работы с кристаллами, овладение приемами грамотного описания внешней формы и внутреннего (атомного) строения кристаллов, необходимых для правильной интерпретации результатов самостоятельной научной работы и понимания специальной литературы; знакомство с методами исследования кристаллического вещества.

### 3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля

В результате освоения дисциплины формируются следующие компетенции:

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ПК-15 (профессиональные компетенции)	способен использовать профильно-специализированные знания в области геологии, геофизики, геохимии, гидрогеологии и инженерной геологии, геологии и геохимии горючих ископаемых, экологической геологии для решения научных и практических задач.
ПК-16 (профессиональные компетенции)	способен использовать профильно-специализированные знания фундаментальных разделов физики, химии, экологии для освоения теоретических основ геологии, геофизики, геохимии, экологической геологии
ПК-2 (профессиональные компетенции)	способен использовать в профессиональной деятельности базовые знания естественных наук, математики, информатики, геологических наук
ПК-6 (профессиональные компетенции)	способен использовать информацию из различных источников для решения профессиональных и социальных задач

Шифр компетенции	Расшифровка приобретаемой компетенции
ПК-9 (профессиональные компетенции)	готов применять на практике базовые общепрофессиональные знания теории и методов полевых геологических, геофизических, геохимических, гидрогеологических, нефтегазовых и эколого-геологических исследований при решении научно-производственных задач

В результате освоения дисциплины студент:

1. должен знать:

важнейшие проблемы кристаллохимии, состав, структуру и свойства кристаллов, парагенетические ассоциации и генезис кристаллов, методы исследования.

2. должен уметь:

определять кристаллы и слагаемые ими минеральные ассоциации, а также делать суждения об их генезисе и практическом использовании для целей поиска месторождений минерального сырья.

3. должен владеть:

знаниями кристаллохимии, основами поиска и разведки месторождений полезных ископаемых и вопросах комплексного использования минерального сырья.

Определять кристаллы и слагаемые ими минеральные ассоциации, а также делать суждения об их генезисе и практическом использовании для целей поиска месторождений минерального сырья.

#### 4. Структура и содержание дисциплины/ модуля

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетных(ые) единиц(ы) 108 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины зачет в 8 семестре.

Суммарно по дисциплине можно получить 100 баллов, из них текущая работа оценивается в 50 баллов, итоговая форма контроля - в 50 баллов. Минимальное количество для допуска к зачету 28 баллов.

86 баллов и более - "отлично" (отл.);

71-85 баллов - "хорошо" (хор.);

55-70 баллов - "удовлетворительно" (удов.);

54 балла и менее - "неудовлетворительно" (неуд.).

#### 4.1 Структура и содержание аудиторной работы по дисциплине/ модулю

##### Тематический план дисциплины/модуля

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
1.	Тема 1. Основные этапы становления и развития науки о кристаллах. Современные кристаллографические области знаний.	8	1-3	2	0	4	устный опрос

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
2.	Тема 2. Понятие символ грани кристалла, способы его определения. Параметры грани. Индексы Вейса и Миллера. Четвертый индекс в кристаллах гексагональной сингонии.	8	3-5	2	0	4	устный опрос
3.	Тема 3. Понятие простая форма кристаллов, ее характеристики. Плоскостная симметрия граней. Расчет числа граней простой формы на основе величины симметрии грани. Понятия облик и габитус кристалла	8	5-7	2	0	4	устный опрос
4.	Тема 4. Кристаллогенезис - возникновение, рост и разрушение кристаллов. Образование кристаллов в природе. Причины и условия образования кристаллов. Механизмы роста и зарождения кристаллов.	8	7-9	2	0	4	устный опрос
5.	Тема 5. Предмет кристаллохимии. Законы кристаллографии и основные свойства кристаллов (анизотропия, симметрия, плоскогранность) в свете решетчатого строения кристаллов.	8	9-10	2	0	4	устный опрос

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
6.	Тема 6. Общие представления о 230 пространственных (федоровских) группах симметрии, принципы их вывода. Правильные системы точек, их характеристики. Принципы вычерчивания графиков пространственных групп симметрии.	8	10-12	2	0	4	устный опрос
7.	Тема 7. Краткие сведения о морфотропии, полиморфизме, политипии, изоморфизме. Роль диагональных рядов Гольдшмидта-Ферсмана в изоморфных замещениях атомов.	8	12-13	2	0	4	устный опрос
8.	Тема 8. Физические свойства кристаллов. Скалярные, векторные и тензорные физические свойства кристаллов, их симметрия. Предельные группы симметрии - группы Кюри. Принцип Неймана. Связь физических свойств кристаллов с их структурой.	8	13-15	2	0	4	устный опрос

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
9.	Тема 9. Использование теории плотнейших упаковок шаров одинакового размера при описании симметрии построенных на их основе кристаллических структур. Симметрия двухслойной (гексагональной) плотнейшей упаковки. Правильные системы точек, характеризующие позиции атомов (шаров плотнейшей упаковки) и центры тяжести пустот.	8	15-16	2	0	4	устный опрос
	Тема . Итоговая форма контроля	8		0	0	0	зачет
	Итого			18	0	36	

#### 4.2 Содержание дисциплины

**Тема 1. Основные этапы становления и развития науки о кристаллах. Современные кристаллографические области знаний.**

**лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Основные этапы становления и развития науки о кристаллах.

**лабораторная работа (4 часа(ов)):**

Современные кристаллографические области знаний.

**Тема 2. Понятие символ грани кристалла, способы его определения. Параметры грани. Индексы Вейса и Миллера. Четвертый индекс в кристаллах гексагональной сингонии.**

**лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Понятие символ грани кристалла, способы его определения. Параметры грани.

**лабораторная работа (4 часа(ов)):**

Индексы Вейса и Миллера. Четвертый индекс в кристаллах гексагональной сингонии.

**Тема 3. Понятие простая форма кристаллов, ее характеристики. Плоскостная симметрия граней. Расчет числа граней простой формы на основе величины симметрии грани. Понятия облик и габитус кристалла**

**лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Понятие простая форма кристаллов, ее характеристики. Плоскостная симметрия граней.

**лабораторная работа (4 часа(ов)):**

Расчет числа граней простой формы на основе величины симметрии грани. Понятия облик и габитус кристалла

**Тема 4. Кристаллогенезис - возникновение, рост и разрушение кристаллов. Образование кристаллов в природе. Причины и условия образования кристаллов. Механизмы роста и зарождения кристаллов.**

**лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Кристаллогенезис - возникновение, рост и разрушение кристаллов. Образование кристаллов в природе.

**лабораторная работа (4 часа(ов)):**

Причины и условия образования кристаллов. Механизмы роста и зарождения кристаллов.

**Тема 5. Предмет кристаллохимии. Законы кристаллографии и основные свойства кристаллов (анизотропия, симметрия, плоскогранность) в свете решетчатого строения кристаллов.**

**лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Предмет кристаллохимии. Законы кристаллографии и основные свойства кристаллов.

**лабораторная работа (4 часа(ов)):**

Анизотропия, симметрия, плоскогранность в свете решетчатого строения кристаллов.

**Тема 6. Общие представления о 230 пространственных (федоровских) группах симметрии, принципы их вывода. Правильные системы точек, их характеристики. Принципы вычерчивания графиков пространственных групп симметрии.**

**лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Общие представления о 230 пространственных (федоровских) группах симметрии, принципы их вывода.

**лабораторная работа (4 часа(ов)):**

Правильные системы точек, их характеристики. Принципы вычерчивания графиков пространственных групп симметрии.

**Тема 7. Краткие сведения о морфотропии, полиморфизме, политипии, изоморфизме. Роль диагональных рядов Гольдшмидта-Ферсмана в изоморфных замещениях атомов.**

**лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Краткие сведения о морфотропии, полиморфизме, политипии, изоморфизме.

**лабораторная работа (4 часа(ов)):**

Роль диагональных рядов Гольдшмидта-Ферсмана в изоморфных замещениях атомов.

**Тема 8. Физические свойства кристаллов. Скалярные, векторные и тензорные физические свойства кристаллов, их симметрия. Предельные группы симметрии - группы Кюри. Принцип Неймана. Связь физических свойств кристаллов с их структурой.**

**лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Физические свойства кристаллов. Скалярные, векторные и тензорные физические свойства кристаллов, их симметрия. Предельные группы симметрии - группы Кюри.

**лабораторная работа (4 часа(ов)):**

Принцип Неймана. Связь физических свойств кристаллов с их структурой.

**Тема 9. Использование теории плотнейших упаковок шаров одинакового размера при описании симметрии построенных на их основе кристаллических структур. Симметрия двухслойной (гексагональной) плотнейшей упаковки. Правильные системы точек, характеризующие позиции атомов (шаров плотнейшей упаковки) и центры тяжести пустот.**

**лекционное занятие (2 часа(ов)):**

Использование теории плотнейших упаковок шаров одинакового размера при описании симметрии построенных на их основе кристаллических структур.

**лабораторная работа (4 часа(ов)):**

Симметрия двухслойной (гексагональной) плотнейшей упаковки. Правильные системы точек, характеризующие позиции атомов (шаров плотнейшей упаковки) и центры тяжести пустот.



### 4.3 Структура и содержание самостоятельной работы дисциплины (модуля)

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
1.	Тема 1. Основные этапы становления и развития науки о кристаллах. Современные кристаллографические области знаний.	8	1-3	подготовка к устному опросу	6	устный опрос
2.	Тема 2. Понятие символ грани кристалла, способы его определения. Параметры грани. Индексы Вейса и Миллера. Четвертый индекс в кристаллах гексагональной сингонии.	8	3-5	подготовка к устному опросу	6	устный опрос
3.	Тема 3. Понятие простая форма кристаллов, ее характеристики. Плоскостная симметрия граней. Расчет числа граней простой формы на основе величины симметрии грани. Понятия облик и габитус кристалла	8	5-7	подготовка к устному опросу	6	устный опрос
4.	Тема 4. Кристаллогенезис - возникновение, рост и разрушение кристаллов. Образование кристаллов в природе. Причины и условия образования кристаллов. Механизмы роста и зарождения кристаллов.	8	7-9	подготовка к устному опросу	6	устный опрос

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
5.	Тема 5. Предмет кристаллохимии. Законы кристаллографии и основные свойства кристаллов (анизотропия, симметрия, плоскогранность) в свете решетчатого строения кристаллов.	8	9-10	подготовка к устному опросу	6	устный опрос
6.	Тема 6. Общие представления о 230 пространственных (федоровских) группах симметрии, принципы их вывода. Правильные системы точек, их характеристики. Принципы вычерчивания графиков пространственных групп симметрии.	8	10-12	подготовка к устному опросу	6	устный опрос
7.	Тема 7. Краткие сведения о морфотропии, полиморфизме, политипии, изоморфизме. Роль диагональных рядов Гольдшмидта-Ферсмана в изоморфных замещениях атомов.	8	12-13	подготовка к устному опросу	6	устный опрос
8.	Тема 8. Физические свойства кристаллов. Скалярные, векторные и тензорные физические свойства кристаллов, их симметрия. Предельные группы симметрии - группы Кюри. Принцип Неймана. Связь физических свойств кристаллов с их структурой.	8	13-15	подготовка к устному опросу	6	устный опрос

N	Раздел Дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды самостоятельной работы студентов	Трудоемкость (в часах)	Формы контроля самостоятельной работы
9.	Тема 9. Использование теории плотнейших упаковок шаров одинакового размера при описании симметрии построенных на их основе кристаллических структур. Симметрия двухслойной (гексагональной) плотнейшей упаковки. Правильные системы точек, характеризующие позиции атомов (шаров плотнейшей упаковки) и центры тяжести пустот.	8	15-16	подготовка к устному опросу	6	устный опрос
	Итого				54	

#### 5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения

1. Компьютерные презентации лекций
2. Лекционное изложение основывается на разборе конкретных ситуаций.
3. Самостоятельная работа с коллекциями кристаллов и моделями структур
4. Компьютерный класс с выходом в Интернет

#### 6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов

##### Тема 1. Основные этапы становления и развития науки о кристаллах. Современные кристаллографические области знаний.

устный опрос , примерные вопросы:

Основные этапы становления и развития науки о кристаллах. Современные кристаллографические области знаний.

##### Тема 2. Понятие символ грани кристалла, способы его определения. Параметры грани. Индексы Вейса и Миллера. Четвертый индекс в кристаллах гексагональной сингонии.

устный опрос , примерные вопросы:

Понятие символ грани кристалла, способы его определения. Параметры грани. Индексы Вейса и Миллера. Четвертый индекс в кристаллах гексагональной сингонии.

##### Тема 3. Понятие простая форма кристаллов, ее характеристики. Плоскостная симметрия граней. Расчет числа граней простой формы на основе величины симметрии грани. Понятия облик и габитус кристалла

устный опрос , примерные вопросы:

Понятие простая форма кристаллов, ее характеристики. Плоскостная симметрия граней. Расчет числа граней простой формы на основе величины симметрии грани. Понятия облик и габитус кристалла

**Тема 4. Кристаллогенезис - возникновение, рост и разрушение кристаллов. Образование кристаллов в природе. Причины и условия образования кристаллов. Механизмы роста и зарождения кристаллов.**

устный опрос , примерные вопросы:

Кристаллогенезис - возникновение, рост и разрушение кристаллов. Образование кристаллов в природе. Причины и условия образования кристаллов. Механизмы роста и зарождения кристаллов.

**Тема 5. Предмет кристаллохимии. Законы кристаллографии и основные свойства кристаллов (анизотропия, симметрия, плоскогранность) в свете решетчатого строения кристаллов.**

устный опрос , примерные вопросы:

Предмет кристаллохимии. Законы кристаллографии и основные свойства кристаллов (анизотропия, симметрия, плоскогранность) в свете решетчатого строения кристаллов.

**Тема 6. Общие представления о 230 пространственных (федоровских) группах симметрии, принципы их вывода. Правильные системы точек, их характеристики. Принципы вычерчивания графиков пространственных групп симметрии.**

устный опрос , примерные вопросы:

Общие представления о 230 пространственных (федоровских) группах симметрии, принципы их вывода. Правильные системы точек, их характеристики. Принципы вычерчивания графиков пространственных групп симметрии.

**Тема 7. Краткие сведения о морфотропии, полиморфизме, политипии, изоморфизме. Роль диагональных рядов Гольдшмидта-Ферсмана в изоморфных замещениях атомов.**

устный опрос , примерные вопросы:

Краткие сведения о морфотропии, полиморфизме, политипии, изоморфизме. Роль диагональных рядов Гольдшмидта-Ферсмана в изоморфных замещениях атомов.

**Тема 8. Физические свойства кристаллов. Скалярные, векторные и тензорные физические свойства кристаллов, их симметрия. Предельные группы симметрии - группы Кюри. Принцип Неймана. Связь физических свойств кристаллов с их структурой.**

устный опрос , примерные вопросы:

Физические свойства кристаллов. Скалярные, векторные и тензорные физические свойства кристаллов, их симметрия. Предельные группы симметрии - группы Кюри. Принцип Неймана. Связь физических свойств кристаллов с их структурой.

**Тема 9. Использование теории плотнейших упаковок шаров одинакового размера при описании симметрии построенных на их основе кристаллических структур. Симметрия двухслойной (гексагональной) плотнейшей упаковки. Правильные системы точек, характеризующие позиции атомов (шаров плотнейшей упаковки) и центры тяжести пустот.**

устный опрос , примерные вопросы:

Использование теории плотнейших упаковок шаров одинакового размера при описании симметрии построенных на их основе кристаллических структур. Симметрия двухслойной (гексагональной) плотнейшей упаковки. Правильные системы точек, характеризующие позиции атомов (шаров плотнейшей упаковки) и центры тяжести пустот.

**Тема . Итоговая форма контроля**

Примерные вопросы к зачету:

Вопросы к контрольным работам.

1. Известные кристаллографы.
2. Области практического применения кристаллохимии.

3. Описание простых форм кристаллов.
4. Принципы названий простых форм кристаллов.
5. Виды обликов кристаллов.
6. Типы неоднородностей в процессе роста кристаллов.
7. В каких условиях проходит кристаллогенезис.
8. Формы нахождения кристаллов в природе.
9. Анизотропия и методы регистрации.
10. Симметрия кристаллов.
11. Примеры вывода федоровских групп.
12. Столик Федорова.
13. Условия проявления морфотропии.
14. Методы изучения политипии.
15. Методы изучения изоморфизма.
16. Проявление в природных минеральных агрегатах диагональных рядов.
17. Методы исследования физических свойств кристаллов.
18. Методы синтеза кристаллов.
19. Формы неоднородности в кристаллах - узлы, двойники.
20. Использование физических свойств кристаллических веществ в промышленности.
21. Виды плотнейших упаковок.
22. Зависимость и позиции атомов от химического состава вещества

#### Вопросы к зачету

1. Предмет и задачи кристаллохимии. Кристаллохимия как часть химии и как метод исследования химических веществ. Обобщенная кристаллохимия.
2. Кристаллическая структура и способы ее моделирования (статические и динамические, дискретные и континуальные модели).
3. Основные этапы истории рентгеноструктурного анализа и кристаллохимии.
4. Типы межатомных взаимодействий в кристаллах. Энергия связей. Гомо- и гетеродесмические структуры. Характер структуры. Примеры.
5. Структурные типы. Изоструктурность. Описание простейших кристаллических структур.
6. Изоморфизм. Структура твердых растворов.
7. Полиморфизм, политипия, морфотропия. Монотропные и энантиотропные полиморфные переходы.
8. Плотнейшие шаровые упаковки (ПШУ) и плотные шаровые кладки (ПШК). Описание кристаллических структур простых веществ в терминах ПШУ и ПШК.
9. Пустоты в ПШУ и ПШК. Описание кристаллических структур бинарных и тройных соединений в терминах ПШУ и ПШК. Примеры.
10. Кристаллические структуры металлов.
11. Структуры простых веществ-неметаллов VIII, VII и VI групп периодической системы.
12. Структуры простых веществ-неметаллов V, IV и III групп периодической системы.
13. Кристаллические структуры интерметаллических соединений.
14. Кристаллические структуры бинарных соединений AX, описываемые в терминах ПШУ и ПШК (анионные упаковки и кладки).
15. Общая характеристика кристаллических структур бинарных соединений AX и XY. Примеры структур различного характера. [Кластеры.]
16. Общая характеристика тернарных кристаллических структур.
17. Структурный тип перовскита. Перовскитоподобные структуры. Сегнетоэлектрики и их кристаллические структуры.
18. Структурный тип шпинели. Нормальная и обращенная шпинель. Ферриты и их свойства.

19. Кристаллические структуры силикатов. Их классификация. Алумосиликаты и силикаты алюминия.
20. Зависимость свойств силикатов от их структуры. Цеолиты.
21. Общая характеристика молекулярных кристаллов. Ковалентные и ван-дер-ваальсовы радиусы. Коэффициент плотности упаковки молекулярных кристаллов. Теория плотной упаковки молекул. Опорные межмолекулярные контакты.
22. Молекулярное координационное число. Примеры органических кристаллов с различными координационными числами.
23. Специфические межмолекулярные контакты. Контакты галоген-галоген, металл-кислород и металл-металл. Контакты бензольных циклов.
24. Межмолекулярные водородные связи. Их геометрические характеристики. Примеры структур с Н-связями различного типа.
25. Н-ассоциаты в органических кристаллах и их описание с помощью графов. Кооперативные водородные связи.
26. Структурные классы молекулярных кристаллов. Моно- и полисистемные структуры. Типы моносистемных кристаллов. Распределение органических кристаллов по структурным классам.
27. Собственная симметрия молекулы и симметрия ее позиции в кристалле. Правило центросимметричности. Псевдосимметричные подсистемы в молекулярных кристаллах. Типичные молекулярные агломераты в органических кристаллах.
28. Полисистемные молекулярные кристаллы. Контактная конформерия. Гиперсимметрия (сверхсимметрия).
29. Метод симметрии потенциальных функций.
30. Расчет энергии межмолекулярного взаимодействия в атом-атомном приближении. Энергия молекулярного кристалла как функция структурных параметров.
31. Структурные подклассы и анизотропия свойств.
32. Тепловые колебания атомов и молекул в кристаллах. Тензоры, описывающие колебания жестких молекул.
33. Конденсированные фазы с дальним порядком. Кристаллы и квазикристаллы. Несоразмерные структуры. Мезофазы. Корреляционная длина. Ближний порядок
34. Жидкие кристаллы. Мезоморфизм. Нематические, холестерические и смектические мезофазы. Типы дискотических жидких кристаллов.
35. Структурная интерпретация понятий химического соединения и химического вещества.
36. Значение рентгеноструктурного анализа и кристаллохимии для химии и молекулярной биологии. Базы структурных данных.
37. Основы рентгенографии кристаллов. Уравнения Лауэ. Три метода получения дифракционной картины и их использование. Автоматические дифрактометры.
38. Метод порошка в рентгенографии. Индексы серий узловых сеток. Межплоскостные расстояния. Уравнение Брэгга-Вульфа. Рентгенофазовый анализ.
39. Интенсивность дифракционных лучей и структурная амплитуда. Формула электронной плотности. Проблема начальных фаз и пути ее решения. Фактор расходимости.
40. Последовательные приближения при изучении распределения электронной плотности. Уточнение кристаллической структуры. Тепловые (температурные) параметры.
41. Прецизионный рентгеноструктурный анализ. Топологический анализ электронной плотности (по Бейдеру).
42. Сравнение дифракционных методов изучения кристаллической структуры (рентгенография, нейтронография, электронография).

СРС включает следующие виды работ:

- изучение теоретического лекционного материала;
- проработка теоретического материала (конспекты лекций, основная и дополнительная литература);

- подготовка к коллоквиумам и контрольным работам по теоретическому лекционному материалу (список вопросов приведен выше)
- определение симметрии кристаллов по моделям

### **7.1. Основная литература:**

1. Зоркий П.М. Симметрия молекул и кристаллических структур, МГУ, 1986. (фонд кафедры)
2. Зоркий П.М., Н.Н.Афоница. Симметрия молекул и кристаллов, МГУ, 1979. (фонд кафедры)
3. Порай-Кошиц М.А. Основы структурного анализа химических соединений, М., Высшая школа, 1989.
4. Бокий Г.Б. Кристаллохимия, М., Наука, 1971.
5. Вест А. Химия твердого тела, М., Мир, 1988; т.1, гл. 7, 8.
6. Кребс Г. Основы кристаллохимии неорганических соединений, М., Мир, 1971. (фонд кафедры)
7. Егоров-Тисменко Ю.К. Кристаллография и кристаллохимия: учебник для студентов вузов, обучающихся по спец "Геология" / Ю.К. Егоров-Тисменко - Москва: КДУ, 2005. - 587 .

### **7.2. Дополнительная литература:**

1. Загальская Ю.Г., Литвинская Г.П. Геометрическая микрокристаллография, МГУ, 1976..
2. Китайгородский А.И. Молекулярные кристаллы, М., Наука, 1971 г., гл. 1 и 2.
3. Пенкаля Т. Очерки кристаллохимии, Л., Химия, 1974.
4. Вайнштейн Б.К. (ред.). Современная кристаллография, т.2, гл. 1, 2, М., Наука, 1979.
5. Киперт Д. Неорганическая стереохимия, М., Мир, 1985.
6. Дашевский В.Г. Конформации органических молекул, М., Наука, 1975.

### **7.3. Интернет-ресурсы:**

Кристаллохимия - <http://www.chemnet.ru/>

Кристаллохимия - <http://www.chem.msu.su/rus/weldept.html>

<http://web.ru/db/msg.html?mid=1171592&uri=part00.htm>

Кристаллохимия - <http://www.xumuk.ru/encyklopedia/2201.html>

Кристаллохимия - <http://ru.wikipedia.org/wiki/Кристаллохимия>

Мультимедийная обучающая программа Кристаллохимическая классификация минералов  
О.Н.Лопатин, Е.М.Нуриева, И.Г.Леонтьева - <http://www.ksu.ru/nilkto/mmedia.htm#p2>

## **8. Материально-техническое обеспечение дисциплины/модуля согласно утвержденному учебному плану**

Освоение дисциплины "Кристаллохимия" предполагает использование следующего материально-технического обеспечения:

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО и учебным планом по направлению 020700.62 "Геология" и профилю подготовки Геохимия .

Автор(ы):

Бахтин А.И. \_\_\_\_\_

Лопатин О.Н. \_\_\_\_\_

Николаев А.Г. \_\_\_\_\_

"\_\_" \_\_\_\_\_ 201\_\_ г.

Рецензент(ы):

Сунгатуллин Р.Х. \_\_\_\_\_

"\_\_" \_\_\_\_\_ 201\_\_ г.



Лист согласования

<b>N</b>	<b>ФИО</b>	<b>Согласование</b>
1	Морозов В. П.	Согласовано
2	Шевелев А. И.	Согласовано
3	Чижанова Е. А.	Согласовано с замечаниями Прошу указать сколько экз. учебников. имеющих пометку "фонд кафедры" имеется в наличии. без этих сведений оценить обеспеченность дисциплины затруднительно.
4	Соколова Е. А.	
5	Тимофеева О. А.	