

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования
«Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н.Ельцина»

УТВЕРЖДАЮ
Проректор по учебной работе

С.Т. Князев




**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
КРИСТАЛЛОГРАФИЯ И РЕНТГЕНОГРАФИЯ**

Рекомендована учебно-методическим советом физико-технологического института
для направлений подготовки и специальностей:

Код ОП	Направление/ Специальность	Направленность (профиль) программы магистратуры/ специализации	Номер учебного плана	Код дисциплины по учебному плану
18.05.02/02.01	Химическая технология материалов современной энергетики	Химическая технология материалов современной энергетики	№ 5073	Б1.43.2

Екатеринбург, 2018

Рабочая программа дисциплины составлена авторами:

№	ФИО	Ученая степень, ученое звание	Должность	Кафедра	Подпись
1	Леонидов И.И.	к.х.н.	Доцент	Материаловедение в строительстве	

Рабочая программа одобрена на заседании кафедр (учебно-методических советов):

№	Наименование кафедры (УМС)	Дата заседания	Номер протокола	ФИО зав. кафедрой (предс. УМС)	Подпись
1	Редких металлов и наноматериалов (выпускающая кафедра)	20.09.18	№3	Рычков В.Н.	
	Материаловедение в строительстве (читающая кафедра)	28.09.18	№7	Капустин Ф. Л.	

Согласовано:

Начальник отдела проектирования образовательных программ и организации учебного процесса


Р.Х Токарева

Председатель учебно-методического совета
Физико-технологического института
Протокол № 2 от 12.10.2018


С.В. Никифоров



1 ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА ДИСЦИПЛИНЫ

Аналитическая химия

Рабочая программа дисциплины составлена в соответствии с Федеральными государственными образовательными стандартами высшего образования

Код направления/ специальности	Название направления/ специальности	Реквизиты приказа Министерства образования и науки Российской Федерации об утверждении и вводе в действие ФГОС ВО	
		Дата	Номер приказа
18.05.02	Химическая технология материалов современной энергетики	17.10.2016 г.	1291

1.1. Требования к результатам освоения дисциплины

Изучение дисциплины направлено на формирование компетенций:

- Способностью представить современную картину мира на основе целостной системы естественнонаучных и математических знаний, ориентироваться в ценностях бытия, жизни, культуры (ОК-1).
- Способностью использовать математические, естественнонаучные и инженерные знания для решения задач своей профессиональной деятельности (ОПК-1).
- Способностью профессионально использовать современное технологическое и аналитическое оборудование, способностью к проведению научного исследования и анализу полученных при его проведении результатов (ОПК-2).
- Способностью представлять результаты исследования в формах отчетов, рефератов, публикаций и публичных обсуждений, способность формулировать практические рекомендации по использованию результатов научных исследований (ПК-12).
- Способность использовать знания о строении вещества, природе химической связи в различных классах химических соединений для понимания свойств материалов и механизма химических процессов (ПКД-1).

1.2. Содержание результатов обучения

В результате освоения дисциплины студент должен:

знать основные особенности и закономерности строения простых веществ и наиболее важных и технологически перспективных минералов и неорганических соединений; основные элементы теории дифракции и практические этапы рентгеноструктурного анализа; задачи современной кристаллографии; терминологию и аппарат теории симметрии молекул, кристаллов и кристаллических структур и способы их описания;

уметь разбираться в кристаллохимических данных, применять на практике знания о связи кристаллической структуры с физико-химическими свойствами для направленного синтеза, предсказания и понимания свойств новых веществ и материалов;

владеть основными понятиями общей кристаллохимии (типы химических связей атомов и отвечающие им кристаллохимические радиусы, структурные единицы кристалла, способы упаковки этих единиц и критерии устойчивости структуры, основные структурные типы и структурообразующие факторы, структурная классификация полиморфных переходов, видов изоморфизма, твердых растворов и нестехиометрических соединений); методами

описания структуры, навыками их практического использования, современными компьютерными технологиями сбора, обработки, хранения и передачи информации, в том числе программные пакеты, предназначенные для первичной обработки экспериментального массива, качественного и количественного анализа дифракционных данных, индентирования кристаллической решетки, определения параметров элементарной ячейки, проведения уточнения кристаллических структур методом полнопрофильного анализа

1.3. Место дисциплины в структуре образовательной программы

1. Пререквизиты	Б1.12 - Физика
2. Кореквизиты	
3. Постреквизиты	Б1.16 - Физическая и коллоидная химия Б1.24 - Общая химическая технология Б1.30 - Физико-химические основы технологии редких элементов Б1.39 - УИРС

1.4. Объем (трудоемкость) дисциплины

Очная форма обучения

№ п/п	Виды учебной работы	Объем дисциплины		Распределение объема дисциплины по семестрам (час.)
		Всего часов	В т.ч. контактная работа (час.)	4
1.	Аудиторные занятия	51	51	51
2.	Лекции	34	34	34
3.	Практические занятия	-	-	-
4.	Лабораторные работы	17	17	17
5.	Самостоятельная работа студентов, включая все виды текущей	39	7,65	39
6.	Промежуточная аттестация	18	2,33	Экзамен, 18
7.	Общий объем по учебному плану, час.	108	60,98	108
8.	Общий объем по учебному плану, з.е.	3		3

1.5. Краткое описание (аннотация) дисциплины

Дисциплина «Кристаллография и рентгенография» формирует базовые знания по теоретическому описанию симметрии и пространственного строения кристаллических структур и молекул, рентгеноструктурному анализу и спектроскопическим методам исследований кристаллов. Рассматриваются основные понятия, принципы и категории кристаллохимии, дается интерпретация взаимосвязи кристаллического строения минералов и неорганических соединений и ряда их морфологических признаков и физико-химических свойств. На лекциях разбираются наиболее важные и распространенные точечные и пространственные группы симметрии, типы структур, важнейшие структурные особенности неорганических соединений.

На лабораторных занятиях студенты решают типовые задачи по теории симметрии кристаллов, правильным системам точек, связи симметрии кристаллов с их составом и свойствами, плотнейшим упаковкам, учатся самостоятельно определять по имеющимся моделям молекул и структур их симметрию и мотивы упаковок.

2 СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Код раздела, темы	Раздел, тема дисциплины	Содержание
P1	Кристаллография	
P1.T1.	<i>Введение в кристаллографию</i>	<p>Кристаллография и развитие науки о кристаллическом веществе. Краткие сведения по истории кристаллографии. Современные направления в изучении кристаллических структур. Симметрия кристаллов. Симметрия пространственных объектов. Пространственная решетка и ее элементы: узел (точка), ряд узлов, плоская сетка. Ретикулярная плотность. Связь элементов кристалла (вершины, ребра, грани). Элементарная ячейка и ее параметры.</p> <p>Преобразования симметрии I и II рода. Элементы симметрии конечных фигур. Закон симметрии. Теоремы сложения элементов симметрии. Точечные группы (виды) симметрии. Категории и сингонии. Распределение минералов по видам симметрии как следствие геологической эволюции. Симметрично равные и единичные направления. Полярные направления.</p>
P1.T2.	<i>Простые формы кристаллов</i>	<p>Морфология кристаллов. Простые формы. Частные и общие формы. Разновидности простых форм. Энантиоморфизм. Гониометрический метод изучения морфологии кристаллов. Закон постоянства граничных углов. Стереографическое проектирование.</p> <p>Индицирование граней кристаллов. Кристаллографические системы координат. Индексы граней Вейсса и Миллера. Закон рациональности параметров и морфологическое индицирование граней. Символы направлений. Закон зон Вейсса. Вывод возможных граней кристалла (метод развития зон). Соотношение между символами граней и ребер. Индицирование методами сложения и перекрестного умножения индексов.</p>
P1.T3.	<i>Образование и реальное строение кристаллов</i>	<p>Среды кристаллизации. Простейшие диаграммы состояния. Мера отклонения от равновесия (пересыщение). Способы создания пересыщения. Кристаллизация из разных сред в основных типах геологических процессов и в кристаллизационных технологиях. Зарождение кристаллов. Устойчивость пересыщенного состояния, метастабильная область. Барьер зарождения. Скорость зарождения и дисперсность кристаллических горных пород и материалов. Стеклование и структуры вулканических пород. Гетерогенное зарождение и эпитакия.</p> <p>Рост кристаллов. Морфология и структура кристаллов, правило Браве. Рост при высоких температурах, нормальный механизм роста, некристаллографические формы кристаллов. Искажение внешней симметрии кристаллов, принцип Кюри, ложные простые формы. Механизмы послойного роста кристаллов – двумерное зарождение и дислокационный рост. Связь</p>

		морфологии природных кристаллов с условиями минералообразования, типоморфизм и поисковая кристалломорфология. Захват примесей, секториальность и зональность. Геометрическая классификация дефектов кристаллов. Точечные дефекты – виды и происхождение. Дислокации и пластичность кристаллов. Блочность, расщепление и сферолиты. Двойники – симметрия, морфология и механизмы образования.
P2.	Кристаллохимия	
P2.T1.	<i>Симметрия кристаллических структур</i>	Симметрия кристаллических структур. Трансляционные решетки Браве. Винтовые оси и плоскости скользящего отражения. Понятие о пространственных (Федоровских) группах симметрии. Вывод и проецирование пространственных групп. Правильные системы точек (ПСТ). Кратность, симметрия и координаты ПСТ. Распределение атомов в структуре минералов по ПСТ.
P2.T2.	<i>Принципы построения кристаллических структур</i>	Типы химической связи. Правила Полинга. Координационные числа и координационные полиэдры. Плотнейшие упаковки в кристаллических структурах. Геометрические пределы устойчивости ионных структур, морфотропия. Систематика структурных типов кристаллов. Классификация, гетеродесмических кристаллов на примере силикатов: структурные мотивы с изолированными кремнекислородными тетраэдрами, со сдвоенными тетраэдрами; кольцевые, цепочечные, слоистые и каркасные структуры.
P2.T3.	<i>Основные категории кристаллохимии</i>	Термодинамическая устойчивость кристаллических структур. Полиморфизм. Структурные типы полиморфных превращений. Метастабильные модификации. Твердые растворы, изоморфизм. Ограниченный изоморфизм, распад твердых растворов. Типы изоморфизма. Правила изоморфизма. Одномерный, двумерный и блоковый изоморфизм. Значение изоморфизма в материаловедении. Технологическое использование изоморфизма.
P3.	Кристаллофизика и физические методы исследования кристаллов	
P3.T1.	<i>Физическая кристаллография</i>	Предельные группы симметрии. Основной закон кристаллофизики. Связь между симметрией воздействующего поля, симметрией кристалла и симметрией явления (свойства). Принцип суперпозиции П. Кюри. Физические свойства кристаллов в связи с их составом и симметрией. Плотность и методы ее определения. Минералогическая шкала твердости Ф. Мооса. Измерение твердости по Виккерсу. Пирозлектричество и сегнетоэлектричество. Пьезоэлектричество. Магнитные свойства – магнитная восприимчивость, диамагнетизм, парамагнетизм, ферромагнетизм, ферримагнетизм и антиферромагнетизм. Теплопроводность и тепловое расширение. Двойное лучепреломление света и поляризация света кристаллами.
P3.T2.	<i>Дифракция рентгеновских лучей. Рентгенофазовый анализ</i>	Дифракция рентгеновских лучей кристаллами (природа и свойства рентгеновских лучей; источники рентгеновского излучения; спектры рентгеновского излучения; поглощение и рассеяние рентгеновских лучей веществом). Уравнения Лауэ. Уравнение Вульфа-Брэгга. Способы получения и регистрации дифракционных картин. Метод Дебая-Шеррера, понятие о рентгенофазовом анализе. Симметрия дифракционной картины, закон Фриделя, систематические погасания рефлексов. Метод Лауэ (полихроматический). Методы вращения и качания. Метод Вайсенберга. Метод фотографирования обратной решетки.

		<p>Прямая и обратная решетка. Основные свойства обратной решетки. Метод порошка. Современные методы съемки порошкограмм: порошковые дифрактометры, фокусирующие камеры. Геометрия съемки с параллельным пучком. Современная рентгеновская дифракционная аппаратура (θ-2θ и θ-θ дифрактометры). Виды фокусировки. Фокусировка по Брэггу-Брентано. Монохроматизация излучения. Способы формирования параллельного пучка. Способы регистрации рентгеновского излучения. Позиционно-чувствительные детекторы. Высоко- и низкотемпературная рентгенография. Автоматизация эксперимента. Форматы экспериментальных данных. Пакеты прикладных программ. Подготовка поликристаллического образца. Понятие текстуры. Выбор условий съемки и проведение эксперимента.</p> <p>Определение симметрии кристалла, параметров решетки и числа формульных единиц в ячейке, рентгеновской плотности. Интенсивность рентгеновского дифракционного отражения и ее составляющие (структурный фактор; фактор атомного рассеяния; аномальное рассеяние и др.). Формула электронной плотности (ряд Фурье). Фазовая проблема. Понятие о способах расшифровки кристаллических структур. Уточнение структуры, критерии достоверности структурной модели. Сравнительная характеристика дифракционных методов структурного анализа. Справочная литература, базы структурных и дифракционных данных (ICDD PDF-2/PDF-4, ICSD, CCDC, COD), системы поиска, работа с базами данных. Первичная обработка экспериментальных данных. Определение положения линий дифракционного спектра. Программы первичной обработки. Качественный анализ. Метод Финка. Метод Ханавальта. Чувствительность качественного анализа. Штрих-диаграммы. Методы количественного анализа. Метод внутреннего стандарта. Метод внешнего эталона. Метод гомологических пар. Программы для проведения качественного и количественного фазового анализа. Определение межплоскостных расстояний. Прецизионное определение параметров элементарной ячейки. Оценка качества дифракционного спектра. Систематические и случайные погрешности. Съемка с эталоном. Методы индирования дифрактограмм. Законы погасания рефлексов. Число линий на дифрактограмме. Графическое и аналитическое индирование. Программы автоиндирования.</p>
Р3.Т3.	<i>Рентгеноструктурный анализ</i>	<p>Определение структурных факторов из интенсивностей дифракционных максимумов. Методы определения координат атомов в кристалле. Уточнение структурных параметров (основные положения и формулы). Критерии качества уточнения структуры. Возможности и ограничения метода. Исходные инструментальные и структурные данные. Методы оценки стартовых величин. Профильный анализ. Характеристики дифракционного пика на рентгенограмме. Функции профиля, полуширина, асимметрия. Метод фундаментальных параметров. Проблемы разделения пиков. Программы уточнения кристаллической структуры вещества по методу Ритвельда. Анализ электронной плотности. Бесструктурное уточнение. Программы визуализации кристаллической структуры. Анализ микроструктурных эффектов: размеры областей когерентного рассеяния (ОКР) и микронапряжений в кристаллах. Малоугловое рассеяние. Функция радиального распределения.</p>

		Нanomатериалы. Исследование текстуры. Несоразмерные и модулированные структуры. Расшифровка новых структур.
--	--	---

3 РАСПРЕДЕЛЕНИЕ УЧЕБНОГО ВРЕМЕНИ

3.1. Распределение для изучаемой дисциплины аудиторной нагрузки и контрольных мероприятий по разделам для очной формы обучения

Очная форма обучения

Семестр: 4

Объем дисциплины (зач.ед.): 3

Код раздела, темы	Раздел дисциплины	Аудиторные занятия (час.)				Самостоятельная работа: виды, количество и объемы мероприятий												Подготовка к промежуточной аттестации по дисциплине (час.)			
		Всего аудиторной работы (час.)	Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	Всего (час.)	Подготовка к аудиторным занятиям (час.)	Выполнение самостоятельных внеаудиторных работ (колич.)										Всего (час.)	Зачет	Экзамен	
P1	Кристаллография	30	18	10	8	12	4	2	2	2	6	1	6	1	2	1	2	1	0	18	
P2	Кристаллохимия	22	16	12	4	6	4	2	2	2	4	2	4	2	4	2	2	1	0	18	
P3	Кристаллофизика и физические методы исследования кристаллов	38	17	12	5	21	3	2	1	18	1	18	1	18	1	18	1	18	0	18	
	Всего (час), без учета промежуточной аттестации:	90	51	34	17	39	11	6	5	24	6	6	24	18	4	4	0	0	0	18	
	Всего по дисциплине (час.):	108	51			57													0	18	

В т.ч. промежуточная аттестация

4 ОРГАНИЗАЦИЯ ПРАКТИЧЕСКИХ ЗАНЯТИЙ, САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ И АТТЕСТАЦИИ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

4.1.Лабораторный практикум

Код раздела, темы	Номер работы	Наименование работы	Время на выполнение работы (час.)
P1	1	Простые и комбинационные формы кристаллов низшей и средней категорий	2
P1	2	Простые и комбинационные формы кристаллов средней и высшей категорий	2
P1	3	Физические свойства минералов	2
P1	5	Индицирование дифрактограмм	2
P2	6	Рентгенофазовый анализ	2
P2	7	Определение параметров элементарной ячейки	2
P3	8	Работа с Международными кристаллографическими таблицами и Банком данных кристаллических структур неорганических соединений (ICSD)	2
P3	4	Элементы симметрии бесконечных структур. Пространственные группы. Правильные системы точек	1
P3	9	Метод Ритвельда	2
Всего:			17

4.2.Практические занятия

не предусмотрено

4.3.Самостоятельная работа студентов

4.3.1. *Примерный перечень тем домашних работ*

Целью выполнения домашней работы является изучение студентами прикладных аспектов кристаллографии. Темы домашних работы: «Метод кристаллографического индицирования», «Вычисление рентгенометрической плотности кристаллов». Объем домашней работы составляет 1–3 страниц формата А4 машинописного текста. Задание для работы выдается преподавателем

4.3.2. *Примерный перечень тем графических работ*

не предусмотрено

4.3.3. *Примерный перечень тем рефератов (эссе, творческих работ)*

не предусмотрено

4.3.4. *Примерная тематика индивидуальных или групповых проектов*

не предусмотрено

4.3.5. *Примерный перечень тем расчетных работ (программных продуктов)*

не предусмотрено

4.3.6. *Примерный перечень тем расчетно-графических работ*

Цель работы заключается в ознакомлении с методами аналитического индицирования порошковых рентгенограмм кубической сингонии; определении индексов отражающих плоскостей кристаллов и типа решетки Браве, расчете параметров элементарной ячейки.

неделе. Тема работы «Определение индексов отражающих плоскостей и расчет параметров элементарной ячейки». Объем работы составляет 7–8 страниц формата А4 (текст и графический материал).

1.1.6. Примерная тематика курсового проекта (работы) (индивидуального или группового)
не предусмотрено

1.1.7. Примерный перечень тем контрольных работ

Контрольная работа № 1 проводится по разделу 1 «Кристаллография» по теме «Определение простых и комбинированных форм кристаллов, их элементов симметрии, выбор системы координат и определение символов граней и простых форм».

Контрольная работа № 2 проводится по разделам 2 «Кристаллохимия» и 3 «Физические методы исследования кристаллов» по теме «Работа с Международными кристаллографическими таблицами и Банком данных кристаллических структур неорганических соединений (ICSD)».

1.1.8. Примерная тематика коллоквиумов

не предусмотрено

1.1.9. Перевод иноязычной литературы

не предусмотрено

5 СООТНОШЕНИЕ РАЗДЕЛОВ ДИСЦИПЛИНЫ И ПРИМЕНЯЕМЫХ МЕТОДОВ И ТЕХНОЛОГИЙ ОБУЧЕНИЯ

Код раздела, темы дисциплины	Активные методы обучения					Дистанционные образовательные технологии и электронное обучение						
	Проектная работа	Кейс-анализ	Деловые игры	Проблемное обучение	Командная работа	Другие (указать, какие)	Сетевые учебные курсы	Виртуальные практикумы и тренажеры	Вебинары и видеоконференции	Асинхронные web-конференции и семинары	Совместная работа и разработка контента	Другие (указать, какие)
P1 – P3				*	*							

6 ПРОЦЕДУРЫ КОНТРОЛЯ В РАМКАХ БАЛЛЬНО-РЕЙТИНГОВОЙ СИСТЕМЫ

6.1.Процедуры текущей и промежуточной аттестации по дисциплине

1.Лекции: коэффициент значимости совокупных результатов лекционных занятий – к лек. = 0,5		
Текущая аттестация на лекциях (<i>перечислить возможные контрольно-оценочные мероприятия во время лекций, в том числе, связанные с самостоятельной работой студентов – СРС</i>)	Сроки – семестр, учебная неделя	Максимальная оценка в баллах
<i>Текущая работа на лекциях, участие в блиц-тестировании на лекциях</i>	4с, нед.1-8	40
<i>СРС Домашняя работа</i>	4с, нед. 6-12	20
<i>СРС Контрольная работа № 2 «Работа с Международными кристаллографическими таблицами и Банком данных кристаллических структур неорганических соединений (ICSD)»</i>	4с., нед. 17	40
Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по лекциям – к тек. лек. = 0,4		
Промежуточная аттестация по лекциям - экзамен.		
Весовой коэффициент значимости результатов промежуточной аттестации по лекциям – к пром. лек.=0,6		
2. Практические/семинарские занятия: коэффициент значимости совокупных результатов практических/семинарских занятий – к прак. =0 не предусмотрено		
Текущая аттестация на практических/семинарских занятиях (<i>перечислить возможные контрольно-оценочные мероприятия во время практических/семинарских занятий, в том числе, связанные с самостоятельной работой студентов – СРС</i>)	Сроки – семестр, учебная неделя	Максимальная оценка в баллах
Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по практическим/семинарским занятиям– к тек.прак.=0		
Промежуточная аттестация по практическим/семинарским занятиям – не предусмотрена		
Весовой коэффициент значимости результатов промежуточной аттестации по практическим/семинарским занятиям– к пром.прак. = 0		
3. Лабораторные занятия: коэффициент значимости совокупных результатов лабораторных занятий – к лаб. =0,5		
Текущая аттестация на лабораторных занятиях (<i>перечислить возможные контрольно-оценочные мероприятия во время лабораторных занятий, в том числе, связанные с самостоятельной работой студентов – СРС</i>)	Сроки – семестр, учебная неделя	Максимальная оценка в баллах
<i>Лабораторные работы</i>	4с, нед. 9-18	30
<i>СРС Расчетно-графическая работа</i>	4с, нед. 12-16	30
<i>СРС Контрольная работа №1 «Описание кристаллов низшей, средней и высшей категорий»</i>	4с, нед. 15	40
Весовой коэффициент значимости результатов текущей аттестации по лабораторным занятиям – к тек.лаб.= 1,0		
Промежуточная аттестация по лабораторным занятиям – не предусмотрено		
Весовой коэффициент значимости результатов промежуточной аттестации по лабораторным занятиям– к пром.лаб. =0,0		

7. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

7.1.Рекомендуемая литература

7.1.1. Основная литература

1. Егоров-Тисменко Ю.К. Кристаллография и кристаллохимия: учебник для вузов. – М.: КДУ, 2010. – 588 с. (100 экз.).
2. Фетисов Г.В. Синхротронное излучение. Методы исследования структуры веществ. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2007, – 672 с. ISBN 978-5-9221-0805-8 .— <URL:http://e.lanbook.com/books/element.php?pl1_cid=25&pl1_id=2152>.
3. Бетехтин А.Г. Курс минералогии. Учебное пособие. М.: КДУ, 2007. 721 с. - ISBN 978-5-4475-1943-8 .— <URL:<http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=255761>>.

7.1.2. Дополнительная литература

1. Вегман Е.Ф., Руфанов Ю.Г., Федорченко И.Н. Кристаллография, минералогия и рентгенография. М.: Металлургия, 1990. 263 с. (23 экз)
2. Миркин Л.И. Справочник по рентгеноструктурному анализу поликристаллов. – М.: Физматгиз, 1961. – 863 с. <URL:<http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=447940>>.
3. Уманский Я.С., Скаков Ю.А., Иванов А.Н., Расторгуев Л.Н. Кристаллография, рентгенография и электронная микроскопия. – М.: Металлургия, 1982. – 632 с. (93 экз)
4. 2. Попов Г.М., Шафрановский И.И. Кристаллография. М.: Высшая школа, 2004. 352 с. (29 экз).
5. Шаскольская М.П. Кристаллография. – М.: Высшая школа, 1984. – 376 с. (52 экз).
6. Вегман Е.Ф., Руфанов Ю.Г., Федорченко И.Н. Кристаллография, минералогия и рентгенография. М.: Металлургия, 1990. 263 с. (23 экз).
7. Миркин, Л. И. Справочник по рентгеноструктурному анализу поликристаллов / Л.И. Миркин .— Москва : Государственное издательство физико-математической литературы, 1961 .— 862 с. — URL:<http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=447940>>.

7.2. Методические разработки

1. Логинов, В.Н. Кристаллография и минералогия: методические указания / В.Н. Логинов, О.И. Корженко. – Екатеринбург: УГТУ-УПИ, 2004. Ч. 1. 31 с.
2. Логинов, В.Н. Кристаллография и минералогия: методические указания / В.Н. Логинов. – Екатеринбург: УГТУ-УПИ, 2006. Ч. 2. 45 с.

7.3. Программное обеспечение

PowderCell – программа для манипулирования кристаллическими структурами и вычисления профильных и структурных параметров дифрактограмм. Целью программы является генерация начальных структурных моделей для их последующего использования в процедурах уточнения, например, в методе Ритвельда (http://www.ccp14.ac.uk/ccp/web-mirrors/powdcell/a_v/v_1/powder/e_cell.html).

Powder 4 – программа для преобразования дифракционных данных, просмотра, обработки дифрактограмм; интерфейс для методов индирования, уточнения параметров ячейки, проверки пространственной группы и др. (<http://www.ccp14.ac.uk/ccp/web-mirrors/ndragoe/html/software.html#powder4>).

VESTA – программа для построения кристаллических структур. Свободное кросс-платформенное программное обеспечение (<http://jp-minerals.org/vesta/en/>).

Программы полнопрофильного анализа:

FullProf в свободном доступе (<https://www.ill.eu/sites/fullprof/php/downloads.html>)

GSAS/EXPGUI (<https://subversion.xray.aps.anl.gov/trac/EXPGUI>) и GSAS-II (<https://subversion.xray.aps.anl.gov/trac/pyGSAS>) в свободном доступе.

7.4. Базы данных, информационно-справочные и поисковые системы

COD: Open-access database <http://www.crystallography.net/cod/>

BCS: Bilbao Crystallographic Server of crystallographic symmetry information <http://www.cryst.ehu.es/#retrievaltop>

AMCSD: American Mineralogist Crystal Structure Database: <http://rruff.info/AMS/amcsd.php>

Солодовников С. Ф. Основы кристаллохимии: Учебн. Пособие. – Новосибирск: Ново-сиб. гос. ун-т, 2012. – 223 с. / <http://icchair.niic.nsc.ru>

Солодовников С.Ф. Словарь основных терминов структурной кристаллографии и кристаллохимии. – Новосибирск: ИНХ СО РАН, 2013. – 153 с. / <http://icchair.niic.nsc.ru>

Электронный научный архив УрФУ – <http://elar.urfu.ru/>

7.5. Электронные образовательные ресурсы

1. Капустин, Ф. Л. Геометрическая кристаллография / Капустин Ф.Л. 2013 . в корпоративной сети УрФУ . <URL:http://study.urfu.ru/view/Aid_view.aspx?AidId=11672>.

2. Бараз, В. Р. Кристаллография и дефекты кристаллического строения / Бараз В.Р. УМК . 2007 . . в корпоративной сети УрФУ .

<URL:http://study.urfu.ru/view/Aid_view.aspx?AidId=2570>.

7.6. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

Выполнить все лабораторные работы, систематически отчитываться по всем контрольным мероприятиям.

8. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ТЕКУЩЕЙ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

8.1. КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ КОНТРОЛЬНО-ОЦЕНОЧНЫХ МЕРОПРИЯТИЙ ТЕКУЩЕЙ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ПО ДИСЦИПЛИНЕ В РАМКАХ БРС

В рамках БРС применяются утвержденные на кафедре критерии оценивания достижений студентов по каждому контрольно-оценочному мероприятию. Система критериев оценивания, как и при проведении промежуточной аттестации по модулю, опирается на три уровня освоения компонентов компетенций: пороговый, повышенный, высокий.

Компоненты компетенций	Признаки уровня освоения компонентов компетенций		
	пороговый	повышенный	высокий
Знания	Студент демонстрирует знание-знакомство, знание-копию: узнает объекты, явления и понятия, находит в них различия, проявляет знание источников получения информации, может осуществлять самостоятельно репродуктивные действия над знаниями путем самостоятельного воспроизведения и применения информации.	Студент демонстрирует аналитические знания: уверенно воспроизводит и понимает полученные знания, относит их к той или иной классификационной группе, самостоятельно систематизирует их, устанавливает взаимосвязи между ними, продуктивно применяет в знакомых ситуациях.	Студент может самостоятельно извлекать новые знания из окружающего мира, творчески их использовать для принятия решений в новых и нестандартных ситуациях.
Умения	Студент умеет корректно выполнять предписанные действия по инструкции, алгоритму в известной ситуации, самостоятельно выполняет действия по решению типовых задач, требующих выбора из числа известных методов, в предсказуемо изменяющейся ситуации	Студент умеет самостоятельно выполнять действия (приемы, операции) по решению нестандартных задач, требующих выбора на основе комбинации известных методов, в непредсказуемо изменяющейся ситуации	Студент умеет самостоятельно выполнять действия, связанные с решением исследовательских задач, демонстрирует творческое использование умений (технологий)
Личностные качества	Студент имеет низкую мотивацию учебной деятельности, проявляет безразличное, безответственное отношение к учебе, порученному делу	Студент имеет выраженную мотивацию учебной деятельности, демонстрирует позитивное отношение к обучению и будущей трудовой деятельности, проявляет активность.	Студент имеет развитую мотивацию учебной и трудовой деятельности, проявляет настойчивость и увлеченность, трудолюбие, самостоятельность, творческий подход.

Оценивание производится в соответствии с утвержденными на заседании кафедры критериями оценок и шкалой соответствия баллов системы оценивания БРС, предусмотренной Уставом УрФУ:

80 – 100 баллов выставляются студенту, глубоко и прочно усвоившему программный материал, излагающему его последовательно, исчерпывающе, грамотно и логически стройно. Задача решена и студент правильно обосновывает принятое решение, а также отвечает на дополнительные вопросы преподавателя.

60 – 79 баллов выставляются студенту, твердо и прочно знающему программный материал и по существу излагающему его. Даны правильные ответы на теоретические вопросы, задача решена, а в ответах на билет и на дополнительные вопросы студент не допускает существенных неточностей.

40 – 59 баллов выставляется студенту, который знает большую часть программного материала, но допускает неточности, недостаточно правильные формулировки. При решении задачи испытывает затруднения. Данное количество баллов может быть поставлено студенту и в том случае, если на два теоретических вопроса даны достаточно полные ответы без существенных неточностей, однако задача не решена, и с помощью наводящих вопросов преподавателя студент с задачей не справился.

Менее 40 баллов выставляются студенту, который отвечает лишь на один из трех вопросов. При ответе на дополнительные вопросы преподавателей выясняется, что студент не знает значительной части программного материала, допускает существенные неточности, задача не решена.

При обнаружении списывания выставляется 0 баллов.

8.2. КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ ПРИ ИСПОЛЬЗОВАНИИ НЕЗАВИСИМОГО ТЕСТОВОГО КОНТРОЛЯ

При проведении независимого тестового контроля как формы промежуточной аттестации Дисциплина и ее аналоги, по которым возможно тестирование, отсутствуют на сайте ФЭПО <http://fepo.i-exam.ru>.

Дисциплина и ее аналоги, по которым возможно тестирование, отсутствуют на сайте Интернет-тренажеры <http://training.i-exam.ru>.

Дисциплина и ее аналоги, по которым возможно тестирование, отсутствуют на портале СМУДС УрФУ.

В связи с отсутствием Дисциплины и ее аналогов, по которым возможно тестирование, на сайтах ФЭПО, Интернет-тренажеры и портале СМУДС УрФУ, тестирование в рамках НТК не проводится.

8.3. ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ТЕКУЩЕЙ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

8.3.1. Примерные задания для проведения мини-контрольных в рамках учебных занятий
не предусмотрено

8.3.2. Примерные контрольные задачи в рамках учебных занятий
не предусмотрено

8.3.3. Примерные контрольные кейсы
не предусмотрено

8.3.4. Перечень примерных вопросов для экзамена

1. Общие свойства кристаллического вещества (однородность, анизотропия, симметрия кристаллического пространства).
2. Пространственная решетка и ее элементы: узел, ряд, плоская сетка, ячейка.
3. Элементы симметрии в многогранниках.

4. Классификация кристаллов, классы, сингонии и категории.
5. Выводы 32 классов симметрии.
6. Виды простых форм.
7. Простые формы кристаллов в классах низшей категории.
8. Простые формы кристаллов в классах средней категории.
9. Простые формы кристаллов в классах высшей категории.
10. Обозначение кристаллографических классов: символы Браве, международная символика (обозначения Германа-Могена), обозначения А. Шенфлиса.
11. Кристаллографические проекции.
12. Единичные и симметрично-равные направления в кристаллах.
13. Закон постоянства двугранных углов Стено.
14. Закон рациональности двойных отношений параметров Гаюи.
15. Теорема о возможных осях симметрии. Закон симметрии.
16. Способ Вейсса для расчета символов граней и ребер по известным символам.
17. Законы зон или поясов Вейсса.
18. Теоремы сложений элементов симметрии.
19. Теорема косинусов Вульфа для расчета символов граней.
20. Среды кристаллизации. Простейшие диаграммы состояния.
21. Мера отклонения от равновесия (пересыщение). Способы создания пересыщения.
22. Кристаллизация из разных сред в основных типах геологических процессов и в кристаллизационных технологиях.
23. Зарождение кристаллов. Устойчивость пересыщенного состояния, метастабильная область. Барьер зарождения.
24. Скорость зарождения и дисперсность кристаллических горных пород и материалов.
25. Рост кристаллов. Морфология и структура кристаллов, правило Браве.
26. Рост при высоких температурах, нормальный механизм роста, некристаллографические формы кристаллов.
27. Искажение внешней симметрии кристаллов, принцип Кюри, ложные простые формы.
28. Механизмы послынного роста кристаллов – двумерное зарождение и дислокационный рост.
29. Связь морфологии природных кристаллов с условиями минералообразования, типоморфизм и поисковая кристалломорфология.
30. Захват примесей, секториальность и зональность.
31. Геометрическая классификация дефектов кристаллов.
32. Точечные дефекты – виды и происхождение.
33. Дислокации и пластичность кристаллов.
34. Дифракция рентгеновских лучей в кристалле, уравнение Брэгга-Вульфа.
35. Типы решеток О. Браве, параметры их элементарных ячеек.
36. Кристаллическая структура как система пространственных решеток.
37. Элементы симметрии бесконечных структур: трансляции, плоскости скользящего отражения, винтовые оси.
38. Пространственные группы Е.С. Федорова.
39. Идентификация кристаллов по рентгенограмме.
40. Элементарная ячейка кристаллической решетки, число химических формульных единиц в элементарной ячейке.
41. Плотность кристаллов и методы ее определения. Рентгенометрическая плотность кристаллических веществ.
42. Закономерности изменений атомных и ионных радиусов в периодической таблице Д.И. Менделеева.
43. Атомные и ионные радиусы.

44. Полиморфизм и виды полиморфных модификаций.
45. Значение изоморфизма и морфотропии в материаловедении.
46. Классификация гетеродесмических кристаллов на примере силикатов (структуры с изолированными кремнекислородными тетраэдрами, со сдвоенными тетраэдрами, кольцевые, цепочечные, слоистые и каркасные структуры).
47. Два типа плотнейших упаковок равновеликих атомов. Октаэдрические и тетраэдрические пустоты.
48. Плотнейшие упаковки смешанного характера, политипия.
49. Основной принцип кристаллохимии.
50. Координационные числа и устойчивость кристаллических структур.
51. Координационные многогранники Полинга, способы моделирования кристаллических структур.
52. Правила Л. Полинга, определяющие общие закономерности строения кристаллов.
53. Основные типы кристаллических структур.
54. Методы определения твердости в кристаллах, минералогическая шкала твердости Ф. Мооса.
55. Кристаллохимическая систематика минералов.
56. Предельные группы симметрии Кюри.
57. Связь симметрии кристалла и физических свойств полей. Закон Кюри и Шубникова.
58. Скалярные, векторные, тензорные свойства кристаллов.
59. Пирозлектрические свойства кристаллов.
60. Тепловое расширение и теплопроводность кристаллов.
61. Пьезоэлектрические свойства кристаллов.
62. Диэлектрические свойства кристаллов.
63. Выражение интегральной интенсивности дифракционного максимума для поликристалла. Объясните природу каждого вклада.
64. Основные способы получения дифракционной картины в рентгенографии.
65. Методы индицирования дифрактограмм.
66. Задачи и методы качественного фазового анализа. Базы данных.
67. Методы количественного рентгенофазового анализа.
68. Полнопрофильный анализ по методу Ритвельда. Основные принципы. Общий алгоритм уточнения.

8.3.6. Ресурсы АПИМ УрФУ, СКУД УрФУ для проведения тестового контроля в рамках текущей и промежуточной аттестации

не используются

8.3.7. Ресурсы ФЭПО для проведения независимого тестового контроля

не используются

8.3.8. Интернет-тренажеры

не используются

8.3.9. Примерные задания в составе домашней работы

Целью выполнения домашней работы является изучение студентами прикладных аспектов кристаллографии. Темы домашних работы: «Метод кристаллографического индицирования», «Вычисление рентгенометрической плотности кристаллов». Объем домашней работы составляет 1–3 страниц формата А4 машинописного текста. Задание для работы выдается преподавателем

8.3.10 Примерные задания в составе контрольной работы

Контрольная работа № 1 проводится по разделу 1 «Кристаллография» по теме «Определение простых и комбинированных форм кристаллов, их элементов симметрии, выбор системы координат и определение символов граней и простых форм».

Контрольная работа № 2 проводится по разделам 2 «Кристаллохимия» и 3 «Физические методы

и комбинированных форм кристаллов, их элементов симметрии, выбор системы координат и определение символов граней и простых форм».

Контрольная работа № 2 проводится по разделам 2 «Кристаллохимия» и 3 «Физические методы исследования кристаллов» по теме «Работа с Международными кристаллографическими таблицами и Банком данных кристаллических структур неорганических соединений (ICSD)».

8.3.11 Примерные задания в составе расчетно-графической работы

Цель работы заключается в ознакомлении с методами аналитического индицирования порошковых рентгенограмм кубической сингонии; определении индексов отражающих плоскостей кристаллов и типа решетки Браве, расчете параметров элементарной ячейки. Задание на выполнение расчетно-графической работы выдается преподавателем на 10 неделе. Тема работы «Определение индексов отражающих плоскостей и расчет параметров элементарной ячейки». Объем работы составляет 7–8 страниц формата А4 (текст и графический материал).

Примерное задание:

- получить данные для построения дифрактограммы флюорита;
- построить в любом графическом редакторе и провести расчет дифрактограммы, получив спектр $d_{\text{эксп}}$ используя формулу Вульфа-Брэгга;
- провести индицирование линий рентгенограммы;
- провести сравнение полученных результатов, построив теоретическую дифрактограмму (использовать данные программы PowderCell).

9. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

9.1. Сведения об оснащённости дисциплины специализированным и лабораторным оборудованием

Учебные занятия по дисциплине проводятся в лекционной аудитории, оборудованной мультимедийной техникой для проведения презентаций учебного материала, специализированной учебной лабораторией МТ-306.

Лабораторные работы выполняются в специализированных аудиториях, оснащенных современным испытательным оборудованием и программным обеспечением, в соответствии с тематикой изучаемого материала, число рабочих мест достаточное для проведения лабораторных работ. Учебные лаборатории кафедры Материаловедение в строительстве оснащены поляризационными микроскопами марки МП, твердомерами ПМТ-3, наборами минералов шкалы Мооса, реактивами, необходимые для диагностики минералов. Для практических занятий применяются следующие демонстрационные материалы:

- набор моделей кристаллов: низшей категории (50 разновидностей); средней категории (80 разновидностей); высшей категории (70 разновидностей); коллекционные наборы минералов и раздаточный материал к ним для самостоятельного определения: самородных минералов и сульфидов; оксидов и гидроксидов; солей кислородных кислот; силикатов;
- набор структур кристаллов (30 разновидностей);
- плакаты форм кристаллов;
- таблицы простых форм кристаллов;
- таблица 32 видов симметрии;
- таблица установки кристаллов.

Лабораторные занятия, посвященные уточнению параметров элементарной ячейки поликристаллов, работе с Международными кристаллографическими таблицами и Банком данных кристаллических структур неорганических соединений (ICSD) проводятся в компьютерном классе.

