

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РЕСПУБЛИКИ ТАДЖИКИСТАН
МЕЖГОСУДАРСТВЕННОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«РОССИЙСКО-ТАДЖИКСКИЙ (СЛАВЯНСКИЙ) УНИВЕРСИТЕТ»

Естественнонаучный факультет

наименование факультета

Кафедра химии и биологии

наименование кафедры

«УТВЕРЖДАЮ»

«УТВЕРЖДАЮ»

Зав. кафедрой «Химии и биологии»



Бердиев А.Э.

«28» августа 2024 г.

ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ

по учебной дисциплине

Кристаллохимия

Направление подготовки - 04.03.01 «Химия»

Профиль подготовки – «Общая химия»

Уровень подготовки - бакалавриат

Душанбе 2024 г.

**ПАСПОРТ
ФОНДА ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ**
по дисциплине: Кристаллохимия

№ п/ п	Контролируемые разделы, темы	Формируемые компетенции	Индикаторы достижения компетенции	Оценочные средства	
				Количество тестовых заданий/вопросов к зачету	Другие оценочные средства
					Вид
1.	История становления кристаллохимии, изучение изоморфизма и полиморфизма. Предмет и задачи кристаллохимии. Зависимость свойств вещества от состава и строения. Классификация кристаллов по размерам, симметрии и структуре. Атомная структура и кристаллическая решетка.	ПК-3. Способен применять основные естественнонаучные законы и закономерности развития химической науки при анализе полученных результатов	ПК-3.1 применять методы, средства и приемы применения логических операций для систематизации и прогнозирования химической информации; основные естественнонаучные законы и закономерности в области аналитической химии и химической экспертизы. ПК-3.2 объяснять использование логических операций для систематизации и прогнозирования химической информации; проводить анализ, мониторинг и экспертизу объектов различного класса. ПК-3.3 владение навыками применения логических операций (анализа, синтеза, сравнения, обобщения, доказательства) для систематизации и прогнозирования химической информации; навыками	15	Опрос. Защита реферата Доклад
2.	Элементарная ячейка, понятие характеристики. Ячейки примитивные и непримитивные. Неоднозначность выбора элементарной ячейки. Франкенгейм и Бравэ – основатели теории кристаллических решеток. Роль симметрии, прямых углов, объема при выборе ячейки. Правила выбора элементарной ячейки Бравэ			20	Опрос. Защита реферата Доклад
3.	Основные элементы кристаллической решетки: узлы, узловые ряды, узловые плоскостисетки. Их основные характеристики. Узлы решетки и их координаты-индексы. Вершины кристалла и узлы решетки. Узловые ряды – кристаллографические направления. Периоды-трансляции узловых рядов. Индексы кристаллографических направлений. Ребра кристалла и узловые ряды			20	Опрос. Защита реферата Доклад
4.	Узловые сетки – кристаллографические плоскости. Ориентация плоскостей. Закон целых чисел Гаюи, параметры Вейсса, индексы Миллера. Индексы плоскостей и граней. Межплоскостные расстояния, зависимость от параметров решетки и ориентации (индексов Миллера). Квадратичные формы: вывод для прямоугольных решеток – ромбической, тетрагональной, кубической. Общая квадратичная форма.			20	Опрос. Защита реферата Доклад
5.	Стереографическая проекция, правила построения. Поворотные и отражательные элементы симметрии в кристаллах. Построение проекции элементов симметрии. Вертикальное и поперечное положение осей, особенности положения симметричных точек на проекции. Сложные элементы симметрии: зеркально-поворотные и инверсионные оси.			15	Опрос. Защита реферата Доклад
6.	Взаимодействие (произведение) элементов симметрии: наглядно-графический способ (при помощи построения проекции), координатный метод, применение алгебры матричных преобразований. Законы взаимодействия элементов симметрии.			15	Опрос. Защита реферата Доклад

7.	Схема вывода 32 точечных групп (классов) симметрии. Основные классы: примитивный, центральный, аксиальный, планальный, план-аксиальный. Символы точечных групп симметрии: Грота, Шенфлиса, международные. Простые формы	использования законов и закономерностей химических наук для интерпретации результатов анализа, мониторинга и экспертизы объектов различного класса.	20	Опрос. Защита реферата Доклад
8.	Особенности взаимодействия пространственных элементов симметрии. Координатный способ вывода групп и дополнительная информация, получаемая этим методом. Правильные системы точек, системы общие и частные, кратность и симметрия позиций. Роль пространственной симметрии в структурном анализе.		15	
9.	Химическая связь в кристаллах: металлическая, ионная, ковалентная, ван-дер-ваальсова. Межатомные расстояния. Системы кристаллохимических радиусов: ионные, ковалентные, металлические, ван-дер-ваальсовы. Размеры атомов и ионов и Периодическая система элементов.		15	
Всего:			150	

ВОПРОСЫ ДЛЯ ПРОМЕЖУТОЧНОГО КОНТРОЛЯ ЗНАНИЙ ПО ДИСЦИПЛИНЕ (ДЛЯ ЗАЧЕТА – ПРОМЕЖУТОЧНАЯ АТТЕСТАЦИЯ)

1. Основные вехи истории кристаллохимии. Кристаллохимия среди других наук о веществе. Основные задачи кристаллохимии.
2. Симметрия, симметричная фигура, операция симметрии, элемент симметрии.
3. Конгруэнтное и энантиоморфное равенство. Элементы симметрии, связывающие конгруэнтно равные и энантиоморфные равные фигуры.
4. Элементы симметрии первого рода – поворотные оси симметрии. Их характеристики. Элементы симметрии второго рода – зеркальная плоскость, центр симметрии.
5. Основной закон симметрии кристаллов и его доказательство.
6. Сложные элементы симметрии. Их взаимосвязь и реализация в кристаллическом веществе.
7. Простые формы кристаллов, их характеристики.
8. Простые формы в конечных фигурах икосаэдрической симметрии.
9. Понятие «пространственная решетка», как элемента симметрии
10. Элементарная ячейка и основная ячейка, их отличия.
11. Вывод 14 типов ячеек Браве.
12. Трансляционные элементы симметрии.
13. Взаимодействие трансляционных и нетрансляционных элементов симметрии
14. Взаимодействие трансляционных элементов симметрии между собой
15. Принципы вычерчивания графиков пространственных групп симметрии типа $Pmm2$
16. Принципы вычерчивания графиков пространственных групп симметрии типа $Pmmm$
17. Правильные системы точек и их характеристики
18. Правильные системы точек и позиции Уайкоффа. Их отличия.
19. Интернациональные кристаллографические таблицы. Информация, получаемая из них.
20. Координационные числа и координационные многогранники, число формульных единиц.
21. Словесное описание кристаллической структуры.
22. Свойства атомов, важные для кристаллохимии: угловая форма орбиталей, орбитальные радиусы, потенциалы ионизации и сродство к электрону, орбитальные электроотрицательной, поляризуемость, кислотно-основные свойства.
23. Построение периодической системы элементов: принцип Паули, правило Гунда.

24. Потенциалы ионизации и сродство к электрону. Периодическая зависимость от порядкового номера Z . Химические свойства и классификация элементов: металлы, полуметаллы и неметаллы.
25. Понятие об электроотрицательности. Шкала электроотрицательности Полинга. Связь электроотрицательности с потенциалом ионизации и сродством к электрону (формула Малликена). Степень ионности связи и разность электроотрицательностей.
26. Поляризуемость атомов и ионов. Ее связь с размерами атомов и ионов. Слоистые структуры как результат поляризации анионов.
27. Эффективные радиусы ионов. Критерии вывода радиусов Ланде, Гольдшмидта, Полинга.
28. Зависимость ионного радиуса от заряда, координационного числа, спинового состояния.
29. Периодические зависимости ионных радиусов. Лантаноидное сжатие.
30. Атомные и ковалентные радиусы. Их периодические зависимости. Соотношение между атомными и ионными радиусами.
31. Распределение электронной плотности и «кристаллические» радиусы атомов. Сжатие аниона и расширение катиона в кристаллическом поле.
32. Эффективные заряды атомов в кристалле и методы их определения
33. Структурные особенности разных типов связи: ионной, ковалентной, металлической, ван-дер-ваальсовой
34. Ионная связь. Энергия решетки ионных кристаллов.
35. Цикл Борна-Габера. Формулы Борна-Майера и Борна-Ландэ
36. Энергия связи в кристаллах: энергия решетки, энергия атомизации. Потенциальная кривая химической связи
37. Переходные типы химической связи в кристаллах. Степень ионности химической связи и разность электроотрицательностей. Структуры кристаллов, переходные от ионных к ковалентным.
38. Переходные типы химической связи в кристаллах. Структуры, переходные между металлическими и ковалентными.
39. Металлическая связь. Радиусы Металлических атомов. Основные структуры металлов.
40. Остаточная (вандерваальсова) связь. Ван-дер-ваальсовы радиусы. Молекулярные кристаллы.
41. Диполь-дипольные взаимодействия. Поляризация аниона в низкосимметричных позициях структуры
42. Водородная связь. Строение кристаллогидратов. Структура льда. Конфигурационная энтропия льда.
43. 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.
44. Кислотно-основные свойства атомов и ионов.
45. Плотнейшие шаровые упаковки в кристаллах. Их типы и характеристики.
46. Пустоты в плотнейших упаковках. Их количество расположение в разных упаковках. Их роль в разнообразии кристаллических структур.
47. Кристаллические структуры, построенные на основе двухслойной плотнейшей упаковки.
48. Кристаллические структуры, построенные на основе трехслойной плотнейшей упаковки.
49. Структуры кристаллов с формулами типа $AХ$, построенные на основе плотнейшей упаковки и без нее. Примеры.
50. Структуры кристаллов с формулами типа $AХ_2$, построенные на основе плотнейшей упаковки и без нее. Примеры.
51. Полиэдрический метод изображения кристаллических структур, построенных на основе плотнейших упаковок и без них.
52. Использование обозначения Полинга при описании плотнейших упаковок.
53. Структуры SiC и CdI_2 . Явление политипии.
54. $NaCl$ -подобные структуры. Примеры.
55. Структуры полиморфных модификаций углерода.

56. Фуллерены, их геометрические особенности.

Критерии оценки:

Оценка «зачтено» выставляется обучающемуся, если: он знает основные определения, последователен в изложении материала, демонстрирует базовые знания дисциплины, владеет необходимыми умениями и навыками при выполнении практических заданий.

Оценка «не зачтено» выставляется обучающемуся, если: он не знает основных определений, непоследователен и сбивчив в изложении материала, не обладает определенной системой знаний по дисциплине, не в полной мере владеет необходимыми умениями и навыками при выполнении практических заданий.

Оценка не выставляется обучающемуся, если он не явился на зачет, отказался от его сдачи, не знает программный материал, не может решить практические задачи.

Перечень оценочных средств

№ п/п	Наименование оценочного средства	Характеристика оценочного средства	Представление оценочного средства в ФОС
1.	Устный опрос	Средства контроля как устный опрос преподавателя с обучающимся, на определенные темы, связанные с изучаемой дисциплиной. Задания к контрольным работам, текущие и рубежные тесты. Устный опрос. Контрольные работы, коммуникативные задачи для зачета	Вопросы по темам
2.	Защита реферата	Продукт самостоятельной работы студента, представляющий собой краткое изложение в письменном виде полученных результатов теоретического анализа определенной научной (учебно-исследовательской) темы, где автор раскрывает суть исследуемой проблемы, приводит различные точки зрения, а так же собственные взгляды на неё.	Тема рефератов
3.	Доклад	Средства проверки умений применять полученные знания для решения задач определенного типа по теме или разделу. Задания к контрольным работам, текущие и рубежные тесты. Устный опрос. Контрольные работы, коммуникативные задачи для зачета	Комплект Контрольных вопросов

МОУ ВО «Российско-Таджикский» (Славянский) университет»

Кафедра химии и биологии

УСТНЫЙ ОПРОС

По дисциплине Кристаллохимии

1. Закрытые и открытые операции симметрии. Основные виды. Матрицы преобразования координат. Графические и буквенно-цифровые обозначения. Сочетание операций симметрии друг с другом.
2. Пространственные группы симметрии. Определение. Распределение по кристаллическим системам. Обозначения. Информация в Международных таблицах. Кристаллографический класс. Определение. Примеры.
3. Трансляционная симметрия. Группа трансляций. Решетка Бравэ. Элементарная ячейка. Число формульных единиц в ячейке. Правильные системы точек. Частные и общие позиции. Симметрия позиции. Кратность позиции.
4. Основные понятия, используемые при описании симметрии кристаллов: Пространственная группа симметрии, кристаллографический класс, решетка Бравэ, группа Бравэ, кристаллическая система.
5. Влияние характера химической связи на структуру кристалла. Основные принципы описания кристаллических структур – ионных кристаллов, металлических кристаллов, ковалентных кристаллов, молекулярных кристаллов. Полиморфизм и политипизм.

6. Плотные упаковки в молекулярных, моноатомных, бинарных кристаллах. Структуры шпинелей и перовскитов.

7. Описание структур в координационных полиэдрах. Структуры силикатов.

8. Дифракция рентгеновского излучения кристаллами. Условия Лауэ. Уравнение Вульфа-Брэггов. Структурная амплитуда. Условия погасания. Дифракционные методы исследования структуры кристаллов. Основные варианты дифракционных методов. Виды излучения, используемого для дифракционного изучения структуры кристаллов.

9. Метод порошка. Основные принципы. Уравнение Вульфа-Брэггов. Факторы, определяющие интенсивность рефлексов на дифрактограмме. Фактор повторяемости рефлексов. Информация о структуре, которую дает метод порошка.

10. Индексы Миллера. Индексирование порошковых дифрактограмм (на примере кубической системы). Расчет параметров элементарной ячейки по рентгенографическим данным.

11. Точечные дефекты в кристаллах. Основные виды. Беспорядок по Френкелю и Шоттки. Обозначения дефектов по Креггеру и Винку. Равновесная концентрация тепловых точечных дефектов.

12. Точечные дефекты, обусловленные нестехиометрией кристаллов. Квазихимические равновесия. Обозначения дефектов по Креггеру и Винку. Влияние внешней атмосферы на концентрацию точечных дефектов.

13. Точечные дефекты, обусловленные присутствием примесных атомов. Влияние примеси на концентрацию точечных дефектов в кристаллах, склонных к не стехиометрии.

14. Электронное строение металлов, диэлектриков, собственных и примесных полупроводников. Связь электронных свойств окислов с их не стехиометрией. Основные виды не стехиометрии в оксидах металлов.

15. Диффузия в твердых телах. Основные механизмы диффузии. Выражения для коэффициента диффузии в кристаллах. Энергия активации диффузии. Диффузия в поле механических напряжений – эффект Горского.

16. Ионная проводимость в кристаллах. Влияние примесных атомов на ионную проводимость. Изотерма Коха-Вагнера. Параметры, которые можно получить из температурной зависимости ионной проводимости.

17. Дислокации. Определение. Контур и вектор Бюргерса. Краевые и винтовые дислокации. Энергия дислокации.

18. Дислокации. Основные виды движения дислокаций. Влияние дислокаций на механические свойства твердых тел.

19. Поверхность кристаллов. Чем определяется равновесная форма кристалла?

Критерии оценки:

Оценка «зачтено» выставляется обучающемуся, если: он знает основные определения, последователен в изложении материала, демонстрирует базовые знания дисциплины, владеет необходимыми умениями и навыками при выполнении практических заданий.

Оценка «не зачтено» выставляется обучающемуся, если: он не знает основных определений, непоследователен и сбивчив в изложении материала, не обладает определенной системой знаний по дисциплине, не в полной мере владеет необходимыми умениями и навыками при выполнении практических заданий.

Оценка не выставляется обучающемуся, если он не явился на зачет, отказался от его сдачи, не знает программный материал, не может решить практические задачи.

МОУ ВО «Российско-Таджикский» (Славянский) университет»

Кафедра химии и биологии

КОНТРОЛЬНАЯ РАБОТА ТИПА Б

по дисциплине по дисциплине **Кристаллохимия**

Контрольные вопросы: для текущего контроля знаний по дисциплине

Типовое задание по анализу структурных типов (контрольная работа № 1)

- 1) Название структурного типа.
- 2) Сингония.
- 3) Тип решетки Бравэ.

- 4) Число формульных единиц в элементарной ячейке.
- 5) Координационные числа и координационные многогранники.
- 6) Наличие и тип плотнейшей упаковки.
- 7) Заселенность пустот.
- 8) Координаты базисных атомов.

Для анализа обучающимся предлагается 2–3 структурных типа, работа выполняется на компьютерах лаборатории РСА кафедры ХТТ с использованием шариковых моделей структурных типов.

2. Типовое задание по анализу симметрии и формы кристаллических многогранников (контрольная работа № 2)

- 1) Сингония.
- 2) Группа (формула) симметрии.
- 3) Стереографическая проекция элементов симметрии.
- 4) Гномостереографическая проекция граней.
- 5) Число и название простых форм.

3. Типовые вопросы по теории симметрии и основам геометрического строения кристаллов

1. Понятие о пространственной симметрии
2. Основные пространственные элементы симметрии: плоскости скользящего отражения, винтовые оси.
3. Особенности взаимодействия пространственных элементов симметрии,
4. координатный способ вывода групп симметрии.
5. Правильные системы точек, общие и частные системы.
6. Кратность правильных систем точек, роль правильных систем в структурном анализе.
7. Химическая связь в кристаллах, координационное число.
8. Системы атомных и ионных радиусов.
9. Концепция плотнейших упаковок атомов и ионов, основные типы упаковок: двухслойная и трехслойная.
10. Основные типы пустот и принципы расчета их заселенности.
11. Понятие о твердых растворах, основные типы растворов: замещения,
12. внедрения, вычитания.
13. Основные фазовые диаграммы с твердыми растворами.
14. Пределы растворимости, закон Вегарда.
15. Дефекты кристаллической структуры, точечные и протяженные дефекты.

4. Типовые вопросы к защите по лабораторным работам

1. Основные типы решеток, решетки Бравэ.
2. Примитивные и центрированные решетки.
3. Кристаллическая решетка и индексы Миллера.
4. Квадратичные формы ортогональных сингоний.
5. Принципы индентирования высокосимметричных кристаллов.
6. Расчет параметров решетки по межплоскостным расстояниям.
7. Элементарные принципы дифракции.
8. Условия дифракции по Лауэ.
9. Метод вращения.
10. Формула Вульфа-Брэгга и «отражательная» дифракция.
11. Рентгенофазовый анализ.
12. Основные причины погасаний дифракционных рефлексов.
13. Зависимость структурного фактора от координат и индексов Миллера.

Критерии оценки выполнения самостоятельной работы

Оценка «зачтено» выставляется обучающемуся, если: он знает основные определения, последователен в изложении материала, демонстрирует базовые знания дисциплины, владеет необходимыми умениями и навыками при выполнении практических заданий.

Оценка «не зачтено» выставляется обучающемуся, если: он не знает основных определений, непоследователен и сбивчив в изложении материала, не обладает определенной системой знаний по

дисциплине, не в полной мере владеет необходимыми умениями и навыками при выполнении практических заданий.

Оценка не выставляется обучающемуся, если он не явился на зачет, отказался от его сдачи, не знает программный материал, не может решить практические задачи.

МОУ ВО «Российско-Таджикский» (Славянский) университет»

Кафедра химии и биологии

ТЕМЫ РЕФЕРАТОВ

1. Кристаллическая структура и способы её моделирования.
2. Спектроскопические методы исследования внутреннего строения кристаллов.
3. Скалярные, векторные и тензорные свойства минералов.
4. Механические и тепловые свойства кристаллов
5. Оптические, электрические и магнитные свойства кристаллов.
6. Кристаллохимия органических соединений.
7. Кристаллы с частичной неупорядоченностью
8. Доменные кристаллы.
9. Жидкокристаллические полимеры.
10. Возникновение и рост кристаллов.
11. Ориентационная кристаллизация из раствора.
12. Зональное и секторальное строение кристаллов.
13. Дефекты в кристаллах.
14. Структура реальных кристаллов, частично упорядоченных и аморфных тел.
15. Кристаллические структуры аллотропных модификаций различных элементов.

Критерии оценки:

Оценка «зачтено» выставляется обучающемуся, если: он знает основные определения, последователен в изложении материала, демонстрирует базовые знания дисциплины, владеет необходимыми умениями и навыками при выполнении практических заданий.

Оценка «не зачтено» выставляется обучающемуся, если: он не знает основных определений, непоследователен и сбивчив в изложении материала, не обладает определенной системой знаний по дисциплине, не в полной мере владеет необходимыми умениями и навыками при выполнении практических заданий.

Оценка не выставляется обучающемуся, если он не явился на зачет, отказался от его сдачи, не знает программный материал, не может решить практические задачи.

Составитель: Алихонова С.Дж.