

«УТВЕРЖДАЮ»
Декан геологического факультета МГУ
академик Д.Ю. Пущаровский
«2» сентября 2015 года



Рабочая программа дисциплины (модуля)

1. Код и наименование дисциплины (модуля) **Избранные главы теоретической кристаллохимии**
2. Уровень высшего образования – подготовка научно-педагогических кадров в аспирантуре.
3. **Направление подготовки 05.06.01 Науки о Земле. Направленность программы «Минералогия, кристаллография».**
4. Место дисциплины (модуля) в структуре **относится к вариативной части ООП не обязательная для освоения**
5. Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников)

Формируемые компетенции (код компетенции)	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)
УК-1 Способность к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях	З1 (УК-1) Знать основные методы научно-исследовательской деятельности. У1 (УК-1) Уметь выделять и систематизировать основные идеи в научных текстах; критически оценивать любую поступающую информацию, вне зависимости от источника; избегать

	<p>автоматического применения стандартных формул и приемов при решении задач.</p> <p>В1(УК-1) Владеть навыками сбора, обработки, анализа и систематизации информации по теме исследования; навыками выбора методов и средств решения задач исследования</p>
<p>ОПК-1 способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в области минералогии и кристаллографии с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий</p>	<p>З1 (ОПК-1) ЗНАТЬ: цели и задачи научных исследований по направлению деятельности, базовые принципы и методы их организации; основные источники научной информации и требования к представлению информационных материалов</p> <p>У1 (ОПК--1) УМЕТЬ: составлять общий план работы по заданной теме, предлагать методы исследования и способы обработки результатов, проводить исследования по согласованному с руководителем плану, представлять полученные результаты</p> <p>В1(ОПК--1) ВЛАДЕТЬ: систематическими знаниями по направлению деятельности; углубленными знаниями по выбранной направленности подготовки, базовыми навыками проведения научно-исследовательских работ по предложенной теме</p>
<p>ПК1 Владение методологией теоретических и экспериментальных исследований в области минералогии и кристаллографии</p>	<p>З1(ПК-1) ЗНАТЬ: методологию теоретических и экспериментальных исследований в области минералогии и кристаллографии</p> <p>Код У1(ПК-1) УМЕТЬ: пользоваться результатами современных теоретических и экспериментальных исследований в области минералогии и кристаллографии</p> <p>Код В1(ПК-1) ВЛАДЕТЬ: современными методами теоретических и экспериментальных исследований в области минералогии и кристаллографии</p>
<p>ПК2 Владение современными методами научных исследований в области минералогии и кристаллографии, в том числе с использованием новейших информационно-коммуникационных технологий</p>	<p>З-1(ПК2) ЗНАТЬ: новейшие информационно-коммуникационных технологии в области минералогии и кристаллографии</p> <p>У-1(ПК-2) УМЕТЬ: пользоваться новейшими информационно-коммуникационных технологиями в области минералогии и кристаллографии</p> <p>В-1(ПК-2) ВЛАДЕТЬ: современными методами научных исследований в области минералогии и кристаллографии, в том числе с использованием новейших информационно-</p>

	коммуникационных технологий
ПК4 способность выдвигать и обосновывать новые гипотезы в области минералогии и кристаллографии.	З-1(ПК4) ЗНАТЬ: современные дискуссионные темы в области минералогии и кристаллографии У-1(ПК-4) УМЕТЬ: выдвигать и обосновывать новые гипотезы в области минералогии и кристаллографии В-1(ПК-4) ВЛАДЕТЬ: методическими навыками проведения дискуссий по обсуждению новых гипотез в области минералогии и кристаллографии
ПК5 способность обобщать и использовать результаты исследований для выявления новых явлений, закономерностей, законов и теоретических положений в области минералогии и кристаллографии.	З-1(ПК-5) ЗНАТЬ: новые явления, закономерности и теоретические положения в области минералогии и кристаллографии У-1(ПК-5) УМЕТЬ: обобщать и использовать результаты исследований для выявления новых явлений, закономерностей, законов и теоретических положений в области своей научной специальности В-1(ПК-5) ВЛАДЕТЬ: навыками выдвижения новых теоретических положений в области минералогии и кристаллографии
ПК6 способность обобщать и использовать результаты научных исследований в области минералогии и кристаллографии для решения практических задач хозяйственной деятельности.	З-1(ПК-6) ЗНАТЬ: практические направления применения результатов своей научной деятельности У-1(ПК-6) УМЕТЬ: обобщать и использовать результаты научных исследований для решения практических задач В-1(ПК-6) ВЛАДЕТЬ: приемами решения задач прикладного характера на основании результатов своей научной деятельности

Оценочные средства для промежуточной аттестации по дисциплине приведены в Приложении.

6. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества академических или астрономических часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся:

Объем дисциплины (модуля) составляет 6 зачетных единиц, всего 216 часов, из которых 24 часа составляет контактная работа аспиранта с преподавателем (20 часов занятия семинарского типа (семинары, научно-практические занятия, лабораторные работы и т.п.), 4 часа мероприятия текущего контроля успеваемости), 192 часа составляет самостоятельная работа аспиранта.

7. Входные требования для освоения дисциплины (модуля), предварительные условия **Не требуются**

8. Образовательные технологии (отметить, если применяется электронное обучение и дистанционные технологии). Дисциплина реализуется с использованием электронного обучения и дистанционных технологий кафедры кристаллографии и кристаллохимии, в том числе баз данных кристаллических структур American Mineralogist, MINCRYST и электронных тестов, доступных в режиме удаленного пользователя.

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

Краткая аннотация. Теоретическая кристаллохимия в 21-ом веке, наука об атомном строении кристаллов. Основные понятия и законы современной кристаллохимии. Предсказание структуры кристалла для заданного химического состава. Методы предсказания и уточнения пробной структуры. Неравномерность распределения минералов и неорганических соединений по классам симметрии и пространственным группам. Принцип минимальной диссимметризации. Структурный тип кристаллов и родственные понятия в концепции кристаллохимии. Изотипизм и изоструктурность. Структурный класс. Изотипизм и пространственные группы симметрии. Радиусы ионов и атомов. Принципы их вывода и соотношения между ними. Современные представления о переменных радиусов ионов. Минералогически вероятные структуры. Метод валентности связи. Решение систем линейных уравнений для отыскания значений валентности связей. Программа BONDVAL. Применение правил минимальной дисторсии при сравнении топологических моделей структур. Теорема Шубникова и правила заселения точечных конфигураций. Методы уточнения топологических моделей. Методы DLS, VLS, DVLS. Связь свойств кристаллов с характеристиками химических связей. Основы уточнения кристаллических структур и свойств кристаллов методами минимизации энергии межатомного взаимодействия в различных приближениях.

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины (модуля), форма промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)	Всего (часы)	В том числе								
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы из них					Самостоятельная работа обучающегося, часы из них			
		Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа	Групповые консультации	Индивидуальные консультации	Учебные занятия, направленные на проведение текущего контроля успеваемости коллоквиумы, практические контрольные занятия и др)*	Всего	Выполнение домашних заданий	Подготовка рефератов и т.п..	Всего
Тема 1. Причины ограниченности числа неорганических соединений и особенно минеральных видов. Неравномерность распределения минералов и неорганических соединений по классам симметрии и пространственным группам. Принцип минимальной диссимметризации.	18		2				2		16	16
Тема 2. Анионоцентрированные полиэдры	18		2				2		16	16

и соответствующие структурные типы. Связь между координационными числами катионов и анионов в нормально-валентных структурах.										
Тема 3. Структурный тип кристаллов и родственные понятия и концепции кристаллохимии. Изотипизм и изоструктурность. Структурный класс. Изотипизм и пространственные группы симметрии. Структурные деформации и псевдосимметрия. Принцип толерантности и структурные дескрипторы.	18		2				2		16	16
Тема 4. Представления о структурной гомологии кристаллов. Производные и вырожденные структуры. Упорядочение атомов и сверхструктуры. Основные структурные прототипы (NaCl-MgO-PbS, сфалерит, флюорит и др.) и их гомологические ряды. Понятие о полисоматических сериях минералов и неорганических веществ.	18		2				2		16	16
Тема 5. Радиусы ионов и атомов. Принципы их вывода и соотношения между ними. Зависимость величин радиусов от валентности, координационных чисел и спинового состояния переходных элементов. Современные представления о переменных радиусах ионов.	18		2				2		16	16
Практическое контрольное занятие	18					2*	2		16	16

(интерактив), подготовка и сдача реферата по темам 1-5										
Тема 6. Современная трактовка правил Грима-Зоммерфельда, правила Пирсона, Партэ и др. для кристаллов с неполновалентными элементами (неподеленными парами электронов).	18		2				2		16	16
Тема 7. «Закон» четности координационных чисел (КЧ). Простые и составные КЧ и соответствующие координационные полиэдры. Теоремы дисторсии координационных полиэдров. Геометрический и аналитический выводы теоремы дисторсии. Экспериментальная проверка теорем дисторсии.	18		2				2		16	16
Тема 8. Правила строения ионных кристаллов. Критерий Магнуса-Гольдшмидта и его ограничения. Понятия о втором, третьем и четвертом правилах Полинга. Современное понимание общего значения пятого правила Полинга (правила экономичности).	18		2				2		16	16
Тема 9. Взаимодействие программ визуализаторов и кристаллографических баз данных. Форматы обмена данными между приложениями. Основные базы данных - ICSD (Findit), American Mineralogist Crystal structure database, Минкрисст. Особенности работы в них.	18		2				2		16	16

Тема 10. Иерархия современных методов кристалло-химического прогноза. Возможные методы уточнения пробной структуры кристалла. Компьютерное моделирование структур и свойств кристаллов. Программы DLS, BondVal, GULP, Metadise, QE- особенности и границы применимости.	18		2				2		16	16
Практическое контрольное занятие (интерактив) подготовка и сдача реферата по темам 6-10						2*	2		16	16
Промежуточная аттестация проходит в виде балльно-рейтинговой системы оценивания дистанционных интерактивов и рефератов по темам 1-10										
Итого	216	-	20	-	-	4	24	-	192	192

*Текущий контроль успеваемости реализован в рамках подготовки и устной сдачи рефератов по завершённым темам. Предусмотрены интерактивные дистанционные тесты по темам 1-5 (контрольное занятие №1) и 6-10 (контрольное занятие №2).

10. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы аспирантов по дисциплине (модулю).

- Основная и дополнительная учебная литература:
 - 1) Урусов В.С. Теоретическая кристаллохимия. М., МГУ, 1987
 - 2) Урусов В.С., Еремин Н.Н. «Кристаллохимия. Краткий курс» М., Изд-во МГУ, 2010, 258 стр.
 - 3) Бокий Г.Б. Кристаллохимия. М., Наука, 1973.
 - 4) Белов Н.В. Очерки по структурной минералогии. М., Недра, 1976.
 - 5) Ворошилов Ю.В. Павлишин В.И. «Основы кристаллографии и кристаллохимии. Рентгенография кристаллов» Киев, КНТ, 2011. 568 стр.
 - 6) Урусов В.С. Еремин Н.Н. Атомистическое моделирование кристаллических структур минералов их дефектов и твердых растворов. М, ГЕОС, 2011.
 - 7) Урусов В.С., Дубровинский Л.С. Конструирование вероятных кристаллических структур минералов. МГУ, 1990 г.

11. Ресурсное обеспечение:

- компьютерный класс с выходом в интернет
- Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»
<http://cryst.geol.msu.ru/courses/atcrchem/> - официальная страница курса;
<http://database.iem.ac.ru/mincryst/> - база данных кристаллических структур МИНКРИСТ;
<http://www.shapesoftware.com/> - программное обеспечение для визуализации кристаллов и кристаллических структур;
<http://rruff.geo.arizona.edu/AMS/amcsd.php> - база данных кристаллических структур American Mineralogist.
- Перечень используемых информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса, включая программное обеспечение, информационные справочные системы (при необходимости): баз данных кристаллических структур American Mineralogist, MINCRYST и электронных тесты, доступные в режиме удаленного пользователя.
- Описание материально-технической базы. Для проведения занятий: интерактивных лекций-визуализаций, презентаций рефератов на семинарах – используется LCD проектор. Для самостоятельной работы аспирантов используется компьютерный класс с выходом в Интернет, коллекция кристаллических структур кафедры кристаллографии и кристаллохимии, доступная через учебный кабинет кафедры, доступ с базам данным по кристаллохимии и структурным данным, программное обеспечение для решения задач кристаллохимических задач, библиотека геологического факультета МГУ. Для интерактивной самоподготовки используется компьютер с выходом в Интернет.

12. Язык преподавания – русский.

13. Преподаватель – профессор, доктор химических наук, доцент Еремин Николай Николаевич (neremin@geol.msu.ru)

Приложение

Оценочные средства для промежуточной аттестации по дисциплине (модулю) Избранные главы теоретической кристаллохимии на основе карт компетенций выпускников

Планируемые результаты	Критерии и показатели оценивания результата обучения	Оценочные средства
------------------------	--	--------------------

обучения	менее 15 баллов по БРС	от 15 до 39 баллов по БРС	от 40 до 59 баллов по БРС	или от 60 до 79 баллов по БРС	80 и более баллов по БРС	
<p>ЗНАТЬ: методы критического анализа и оценки современных научных достижений, а также методы генерирования новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях</p> <p>Код З1(УК-1)</p>	Отсутствие знаний	Фрагментарные знания методов критического анализа и оценки современных научных достижений, а также методов генерирования новых идей при решении исследовательских и практических задач	Общие, но не структурированные знания методов критического анализа и оценки современных научных достижений, а также методов генерирования новых идей при решении исследовательских и практических задач	Сформированные, но содержащие отдельные пробелы знания основных методов критического анализа и оценки современных научных достижений, а также методов генерирования новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе междисциплинарных	Сформированные систематические знания методов критического анализа и оценки современных научных достижений, а также методов генерирования новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе междисциплинарных	Баллы определяются на основе количественных оценок ПК

<p>УМЕТЬ: анализировать альтернативные варианты решения исследовательских и практических задач и оценивать потенциальные выигрыши/проигрыши реализации этих вариантов Код У1 (УК-1)</p>	<p>Отсутствие умений</p>	<p>Частично освоенное умение анализировать альтернативные варианты решения исследовательских и практических задач и оценивать потенциальные выигрыши/проигрыши реализации этих вариантов</p>	<p>В целом успешно, но не систематически осуществляемые анализ альтернативных вариантов решения исследовательских и практических задач и оценка потенциальных выигрышей/проигрышей реализации этих вариантов</p>	<p>В целом успешно, но содержащие отдельные пробелы анализ альтернативных вариантов решения исследовательских задач и оценка потенциальных выигрышей/проигрышей реализации этих вариантов</p>	<p>Сформированное умение анализировать альтернативные варианты решения исследовательских и практических задач и оценивать потенциальные выигрыши/проигрыши реализации этих вариантов</p>	<p>Баллы определяются на основе количественных оценок ПК</p>
<p>ВЛАДЕТЬ: навыками анализа методологических проблем, возникающих при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях Код В1 (УК-1)</p>	<p>Отсутствие навыков</p>	<p>Фрагментарное применение навыков анализа методологических проблем, возникающих при решении исследовательских и практических задач</p>	<p>В целом успешное, но не систематическое применение навыков анализа методологических проблем, возникающих при решении исследовательских и практических задач</p>	<p>В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы применение навыков анализа методологических проблем, возникающих при решении исследовательских и практических задач</p>	<p>Успешное и систематическое применение навыков анализа методологических проблем, возникающих при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях</p>	<p>Баллы определяются на основе количественных оценок ПК</p>
<p>ЗНАТЬ: цели и задачи научных исследований по направлению деятельности,</p>	<p>Отсутствие знаний</p>	<p>Фрагментарные представления о современных способах использования</p>	<p>В целом успешные, но не систематические представления о современных</p>	<p>В целом успешные, но содержащие отдельные пробелы, представления о современных</p>	<p>Сформированные представления о современных способах использования</p>	<p>Баллы определяются на основе количественных оценок ПК</p>

<p>базовые принципы и методы их организации; основные источники научной информации и требования к представлению информационных материалов Код З1 (ОПК-1)</p>		<p>информационно-коммуникационных технологий в выбранной сфере деятельности</p>	<p>способах использования информационно-коммуникационных технологий в выбранной сфере деятельности</p>	<p>способах использования информационно-коммуникационных технологий в выбранной сфере деятельности</p>	<p>информационно-коммуникационных технологий в выбранной сфере деятельности</p>	
<p>УМЕТЬ: составлять общий план работы по заданной теме, предлагать методы исследования и способы обработки результатов, проводить исследования по согласованному с руководителем плану, представлять полученные результаты Код У1(ОПК-1)</p>	<p>Отсутствие умений</p>	<p>Фрагментарное использование умения выбирать и использовать экспериментальные и расчетно-теоретические методы для решения научной задачи</p>	<p>В целом успешное, но не систематическое использование умения выбирать и использовать экспериментальные и расчетно-теоретические методы для решения научной задачи</p>	<p>В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы использование умения выбирать и использовать экспериментальные и расчетно-теоретические методы для решения научной задачи</p>	<p>Сформированное умение выбирать и использовать экспериментальные и расчетно-теоретические методы для решения научной задачи</p>	<p>Баллы определяются на основе количественных оценок ПК</p>
<p>ВЛАДЕТЬ: систематическими знаниями по направлению</p>	<p>Отсутствие навыков</p>	<p>Фрагментарное применение навыков поиска и</p>	<p>В целом успешное, но не систематическое</p>	<p>В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы</p>	<p>Успешное и систематическое применение</p>	<p>Баллы определяются на основе количественных</p>

<p>деятельности; углубленными знаниями по выбранной направленности подготовки, базовыми навыками проведения научно-исследовательских работ по предложенной теме Код В1(ОПК-1)</p>		критического анализа научной и технической информации	применение навыков поиска и критического анализа научной и технической информации	применение навыков поиска и критического анализа научной и технической информации	навыков поиска и критического анализа научной и технической информации	ых оценок ПК
<p>Знание методологии теоретических и экспериментальных исследований в области минералогии и кристаллографии Код З1(ПК-1)</p>	0 баллов	1 балл	2-3 балла	4-5 баллов	6-7 баллов	Индивидуальная защита реферата (по количеству тем) с анализом современной зарубежной литературы
<p>Уметь пользоваться результатами современных теоретических и экспериментальных исследований в области минералогии и кристаллографии</p>	0 баллов	1 балл	2-3 балла	4-5 баллов	6-7 баллов	Индивидуальные собеседования (по количеству тем)

Код У1(ПК-1)						
Владеть современными методами теоретических и экспериментальных исследований в области минералогии и кристаллографии Код В1(ПК-1)	0 баллов	1 балл	2-3 балла	4-5 баллов	6-7 баллов	Индивидуальная защита реферата (по количеству тем) с демонстрацией практических навыков
Знание новейших информационно-коммуникационных технологий в области минералогии и кристаллографии Код З-1(ПК2)	0 баллов	1 балл	2-3 балла	4-5 баллов	6-7 баллов	Индивидуальная защита реферата (по количеству тем) с анализом современной зарубежной литературы
Уметь пользоваться новейшими информационно-коммуникационными технологиями в области минералогии и кристаллографии Код У-1(ПК-2)	0 баллов	1 балл	2-3 балла	4-5 баллов	6-7 баллов	Индивидуальные собеседования (по количеству тем)

<p>Владеть современными методами научных исследований в области минералогии и кристаллографии, в том числе с использованием новейших информационно-коммуникационных технологий Код В-1(ПК-2)</p>	0 баллов	1 балл	2-3 балла	4-5 баллов	6-7 баллов	Индивидуальная защита реферата (по количеству тем) с демонстрацией практических навыков
<p>Знать современные дискуссионные темы в области минералогии и кристаллографии Код З-1(ПК4)</p>	0 баллов	1 балл	2-3 балла	4-5 баллов	6-7 баллов	Индивидуальная защита реферата (по количеству тем) с анализом современной зарубежной литературы
<p>Уметь выдвигать и обосновывать новые гипотезы в области минералогии и кристаллографии Код У-1(ПК-4)</p>	0 баллов	1 балл	2-3 балла	4-5 баллов	6-7 баллов	Индивидуальная защита реферата (по количеству тем)

<p>Владеть методическими навыками проведения дискуссий по обсуждению новых гипотез в области минералогии и кристаллографии Код В-1(ПК-4)</p>	0 баллов	1 балл	2-3 балла	4-5 баллов	6-7 баллов	Индивидуальная защита реферата (по количеству тем) с демонстрацией практических навыков
<p>Знать новые явления, закономерности и теоретические положения в области минералогии и кристаллографии Код З-1(ПК-5)</p>	0 баллов	1 балл	2-3 балла	4-5 баллов	6-7 баллов	Индивидуальная защита реферата (по количеству тем) с анализом современной зарубежной литературы
<p>Уметь обобщать и использовать результаты исследований для выявления новых явлений, закономерностей, законов и теоретических положений в области своей научной</p>	0 баллов	1 балл	2-3 балла	4-5 баллов	6-7 баллов	Индивидуальная защита реферата (по количеству тем)

специальности Код У-1(ПК-5)						
Владеть навыками выдвижения новых теоретических положений в области минералогии и кристаллографии Код В-1(ПК-5)	0 баллов	1 балл	2-3 балла	4-5 баллов	6-7 баллов	Индивидуальная защита реферата (по количеству тем) с демонстрацией практических навыков
Знать практические направления применения результатов своей научной деятельности Код З-1(ПК-6)	0 баллов	1 балл	2-3 балла	4-5 баллов	6-7 баллов	Индивидуальная защита реферата (по количеству тем) с анализом современной зарубежной литературы
Уметь обобщать и использовать результаты научных исследований для решения практических задач Код У-1(ПК-6)	0 баллов	1 балл	2-3 балла	4-5 баллов	6-7 баллов	Индивидуальная защита реферата (по количеству тем)
Владеть приемами	0 баллов	1 балл	2-3 балла	4-5 баллов	6-7 баллов	Индивидуальн

решения задач прикладного характера на основании результатов своей научной деятельности Код В-1(ПК-6)						ая защита реферата (по количеству тем) с демонстрацией практических навыков
---	--	--	--	--	--	---

Для оценивания результатов обучения в виде знаний используются следующие виды оценочных средств:

- реферативные работы;
- индивидуальное собеседование,
- доклады.

Для оценивания результатов обучения в виде умений и владений используются следующие виды оценочных средств

- реферативные контрольные задания по темам, включающих одну или несколько задач (вопросов) в виде краткой формулировки действий которые следует выполнить, или описание результата, который нужно получить.

Темы рефератов, тестов и типовых вопросов, необходимых для оценки результатов обучения:

1. Принципы выделения кристаллохимии как науки об атомном строении кристаллов из наук о твердом веществе.
2. Центральная проблема кристаллохимии – предсказание структуры кристалла для заданного химического состава.
3. Причины ограниченности числа неорганических соединений и особенно минеральных видов. Неравномерность распределения минералов и неорганических соединений по классам симметрии и пространственным группам.
4. Принцип минимальной диссимметризации.
5. Конструирование топологических моделей кристаллов. Принципы плотнейшей упаковки, табулирование структурных типов неорганических веществ и их производных, использование полиэдров Полинга-Белова и Вороного-Дирехле, параллелоэдры и сфеноиды Федорова.
6. Пустоты в плотнейших упаковках и мотивы их заселения. Основные структурные типы на основе координационных полиэдров катионов.
7. Связь между координационными числами катионов и анионов в нормально-валентных структурах.
8. Структурный тип кристаллов и родственные понятия и концепции кристаллохимии. Изотипизм и изоструктурность. Структурный класс.
9. Изотипизм и пространственные группы симметрии.
10. Структурные деформации и псевдосимметрия.

11. Принцип толерантности и структурные дескрипторы.
12. Основные структурные прототипы и их гомологические ряды.
13. Понятие о полисоматических сериях минералов и неорганических веществ
14. Радиусы ионов и атомов. Принципы их вывода и соотношения между ними. Зависимость величин радиусов от валентности, координационных чисел и спинового состояния переходных элементов.
15. Современные представления о переменных радиусов ионов.
16. Правила строения ионных кристаллов. Критерий Магнуса-Гольдшмидта и его ограничения.
17. Понятия о втором, третьем и четвертом правилах Полинга. Современное понимание общего значения пятого правила Полинга (правила экономичности).
18. Метод валентности связи. Правило сумм валентности связей, контуры связей. Решение систем линейных уравнений для отыскания значений валентности связей.
19. Программа BONDVAL и тестовые задачи.
20. «Закон» четности координационных чисел (КЧ). Простые и составные КЧ и соответствующие координационные полиэдры.
21. Теоремы дисторсии координационных полиэдров. Геометрический и аналитический выводы теоремы дисторсии. Экспериментальная проверка теорем дисторсии.
22. Конструирование вероятных кристаллических структур из тетраэдров $T^{n+}O_4$ на примере модификаций кремнезема.
23. Конструирование вероятных кристаллических структур из октаэдров $M^{n+}O_6$: случаи $M^{2+}O$, $M_2^{3+}O_3$, $M^{4+}O_2$, $M^{6+}O_3$.
24. Конструирование вероятных кристаллических структур из полиэдрических кластеров (тетраэдры и октаэдры).
25. Применение правил минимальной дисторсии при сравнении топологических моделей структур.
26. Методы уточнения топологических моделей. Методы DLS, VLS, DVLS.
27. Связь свойств кристаллов с характеристиками химических связей.
28. Основы уточнения кристаллических структур и свойств кристаллов методами минимизации энергии межатомного взаимодействия.

Методические материалы, определяющие процедуру оценивания результатов обучения

Методические материалы по темам 1-5 и 6-10 созданы автором с использованием Системы Дистанционного Обучения для автоматизации процесса проверки знаний и эффективного обучения <http://www.ispring.ru/> (в офф-лайн режиме).

Разработчик МГУ им. М.В. Ломоносова,
Геологический ф-т профессор



Еремин Н.Н.