

МИНИСТЕРСТВО ПРОСВЕЩЕНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

ФЕДЕРАЛЬНОЕ
ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ЛУГАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ПЕДАГОГИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»
(ФГБОУ ВО «ЛГПУ»)

Факультет естественных наук
Кафедра химии и биохимии

УТВЕРЖДАЮ

Врио декана факультета
естественных наук

М.В. Воронов

« 07 » декабря 20 23 г.



Приложение к рабочей программе учебной дисциплины

ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ

для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации
обучающихся по дисциплине

Кристаллохимия

По направлению подготовки 04.03.01 Химия

Профиль подготовки Медицинская и фармацевтическая химия

Квалификация выпускника бакалавр

Форма обучения очная

Курс 4

Разработчик

доцент кафедры химии и биохимии
ФГБОУ ВО «ЛГПУ»

Тихий А.А.

Заведующий кафедрой

химии и биохимии

 В.Д. Дяченко

Протокол

от « 07 » декабря 20 23 г. № 6

Луганск, 20 23

1. ПАСПОРТ ФОНДА ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ

1.1. Область применения

Фонд оценочных средств (ФОС) – неотъемлемая часть рабочей программы дисциплины «Кристаллохимия» и предназначен для контроля и оценки образовательных достижений студентов, освоивших программу дисциплины.

1.2. Цели и задачи фонда оценочных средств

Цель ФОС – установить соответствие уровня подготовки обучающегося требованиям ФГОС ВО бакалавриат по направлению подготовки 04.03.01 «Химия» (Медицинская и фармацевтическая химия), утвержденным приказом Министерства науки и высшего образования Российской Федерации от 17 июля 2017 г. № 671 (с изменениями и дополнениями).

1.3. Перечень компетенций, формируемых в процессе освоения основной образовательной программы

Процесс освоения дисциплины направлен на овладение следующими компетенциями:

Код по ФГОС ВО	Индикатор достижения
Универсальные	
Общепрофессиональные	
ОПК-1 ОПК-2	ОПК-1.1 ОПК-1.2 ОПК-1.3 ОПК-2.1 ОПК-2.2 ОПК-2.3 ОПК-2.4
Профессиональные	

1.4. Этапы формирования компетенций и средства оценивания уровня их сформированности

Этапы формирования компетенций	Компетенции	Контрольно-оценочные средства / способ оценивания
Тема 1. Введение. Предмет и задачи кристаллохимии.	ОПК-1,	Устный опрос, выполнение

Кристаллохимия как часть химии и кристаллографии.	ОПК-2	лабораторной работы, выполнение самостоятельной работы, контрольная работа
Тема 2. Симметрия кристаллов. Закрытые операции и элементы симметрии. Теоремы о сочетаниях закрытых элементов симметрии. Кристаллографические точечные группы симметрии.	ОПК-1, ОПК-2	Устный опрос, выполнение лабораторной работы, выполнение самостоятельной работы, контрольная работа
Тема 3. Сингонии. Элементарная ячейка. Кристаллическая решетка. Решетки Браве. Открытые операции и элементы симметрии. Пространственные группы симметрии.	ОПК-1, ОПК-2	Устный опрос, выполнение лабораторной работы, выполнение самостоятельной работы, контрольная работа
Тема 4. Основные понятия кристаллохимии. Структурные типы. Изоточечность, изоструктурность, изотипность. Полиэдрический метод изображения структур. Семейства кристаллических структур. Кристаллоструктурные характеристики атомов и химических связей. Общая теория межатомных взаимодействий.	ОПК-1, ОПК-2	Устный опрос, выполнение лабораторной работы, выполнение самостоятельной работы, контрольная работа
Тема 5. Основы рентгеноструктурного анализа. Дифракция рентгеновских лучей. Основные методы рентгенографии. Основы рентгенофазового анализа. Основные этапы анализа структуры кристалла. Кембриджская база кристаллоструктурных данных о строении органических, металлоорганических и координационных соединений.	ОПК-1, ОПК-2	Устный опрос, выполнение лабораторной работы, выполнение самостоятельной работы, контрольная работа
Тема 6. Описание и систематика кристаллических структур.	ОПК-1,	Устный опрос, выполнение

Структуры простых веществ. Координация атомов. Типы изоморфизма. Твердые растворы. Типы полиморфизма.	ОПК-2	лабораторной работы, выполнение самостоятельной работы, контрольная работа
Тема 7. Структуры бинарных соединений. Сплавы. Роль типа химической связи. Связь строения и магнитных свойств соединений, кристаллизующихся по типу шпинели. Островные структуры солей кислородсодержащих кислот. Структуры фосфатов и силикатов. Основные факторы, влияющие на структуру кристаллов.	ОПК-1, ОПК-2	Устный опрос, выполнение лабораторной работы, выполнение самостоятельной работы, контрольная работа
Тема 8. Органическая кристаллохимия. Стереохимия органических молекул. Соотношение собственной симметрии молекулы и симметрии позиции. Теория плотной упаковки молекул. Молекулярное координационное число. Межмолекулярные водородные связи. Строение реальных кристаллов. Важнейшие типы дефектов. Точечные дефекты. Дислокации.	ОПК-1, ОПК-2	Устный опрос, выполнение лабораторной работы, выполнение самостоятельной работы, контрольная работа
КСР	ОПК-1, ОПК-2	Зачёт
Промежуточная аттестация	ОПК-1, ОПК-2	Зачёт

1.5. Описание показателей формирования компетенций

Код компетенции	Планируемые результаты обучения (показатели)
ОПК-1	Знает: фундаментальные понятия, терминологию и символику кристаллохимии; систематику кристаллических

ОПК-2	<p>структур важнейших классов простых и сложных неорганических и органических соединений; суть основных методов кристаллохимического анализа.</p> <p>Умеет: использовать первичную кристаллоструктурную информацию для определения основных особенностей строения кристаллических веществ; решать задачи по кристаллохимии; осуществлять поиск необходимой кристаллоструктурной информации.</p> <p>Владеет навыками: использования в познавательной и профессиональной деятельности базовых знаний в области неорганической химии; использования полученных навыков работы для решения профессиональных и социальных задач.</p>
-------	---

1.6. Критерии оценивания компетенций на разных этапах их формирования

Система оценивания учебных достижений студентов очной формы обучения

Вид текущей учебной работы	Количество баллов
1 семестр	
Ответы на практических занятиях	50
КСР	10
Зачетная работа	40
Итого за семестр:	100

Накопительная система оценивания по 100-балльной шкале

Четырехбалльная система оценивания экзамена	100-балльная шкала	Буквенная шкала, соответствующая 100-балльной шкале	Система оценивания зачета
Отлично	90–100	А – отлично – теоретическое содержание курса освоено полностью, без пробелов; необходимые практические навыки работы с освоенным материалом сформированы; все предусмотренные программой обучения учебные задания выполнены, качество их выполнения оценено числом баллов, близким к максимальному	
Хорошо	83–89	В – очень хорошо – теоретическое содержание курса освоено полностью, без пробелов; необходимые практические навыки работы с освоенным материалом в основном	

		сформированы; все предусмотренные программой обучения учебные задания выполнены, качество выполнения большинства из них оценено числом баллов, близким к максимальному	Зачтено
Хорошо	75–82	С – хорошо – теоретическое содержание курса освоено полностью; некоторые практические навыки работы с освоенным материалом сформированы недостаточно; все предусмотренные программой обучения учебные задания выполнены, качество выполнения ни одного из них не оценено минимальным числом баллов, некоторые виды заданий выполнены с ошибками	
Удовлетворительно	63–74	D – удовлетворительно – теоретическое содержание дисциплины освоено частично, но пробелы не носят существенного характера; необходимые практические навыки работы с освоенным материалом в основном сформированы; большинство предусмотренных программой обучения учебных заданий выполнено, некоторые из выполненных заданий, содержат ошибки	
Удовлетворительно	50–62	E – посредственно – теоретическое содержание курса освоено частично; некоторые практические навыки работы не сформированы, многие предусмотренные программой обучения учебные задания не выполнены либо качество выполнения некоторых из них оценено числом баллов, близким к минимальному	
Неудовлетворительно	21–49	FX – неудовлетворительно – теоретическое содержание курса освоено частично; необходимые практические навыки работы не сформированы; большинство предусмотренных программой обучения учебных заданий не выполнено либо качество их выполнения оценено числом баллов, близким к минимальному; при дополнительной самостоятельной работе над материалом курса возможно повышение качества выполнения учебных заданий	Не зачтено
Неудовлетворительно	0–20	F – неудовлетворительно – теоретическое содержание курса не освоено; необходимые практические навыки работы не сформированы; все выполненные учебные задания содержат грубые ошибки, дополнительная самостоятельная работа над материалом курса не приведет к какому-либо значимому повышению качества выполнения учебных заданий	

2. Контрольно-оценочные средства

2.1 Оценочные средства текущего контроля (типовые)

Вопросы для устного опроса

- 1) Дайте определение кристаллохимии.
- 2) Дайте определение элементарной ячейки.
- 3) Что такое закрытая операция симметрии?
- 4) Что называют правильной системой точек?
- 5) В каких случаях молекула и хиральна, и полярна?
- 6) Что такое голоэдрическая точечная группа?
- 7) Что такое симморфная пространственная группа?
- 8) Что такое систематические погасания?
- 9) Можно ли определить структуру на I этапе рентгеноструктурного анализа?
- 10) Что такое структурный фактор?
- 11) Что такое R -фактор?
- 12) Каково минимальное число уточняемых атомных параметров структуры?
- 13) Каковы основные стереохимические характеристики?
- 14) Приведите примеры разупорядоченных структур.
- 15) Что можно сказать о структуре, где ион NH_4^+ имеет максимальную симметрию?
- 16) Что такое поляризуемость?
- 17) Что называется мотивом структуры?
- 18) Как изменится структурный мотив α -Fe при его деформации: вдоль оси 3-го порядка?
- 19) Что такое структурообразующие факторы?
- 20) Каковы критерии устойчивости структур?
- 21) Что такое гетеровалентный изоморфизм?
- 22) Что такое бертоллид?
- 23) NH_4F образует твердые растворы с H_2O , KF , NH_4Cl , NH_4CN . К каким типам твердых растворов они относятся?
- 24) Дайте определение морфотропии.
- 25) Что такое дисторсионный полиморфный переход?
- 26) Укажите виды родственности между СТ NaCl , ZnS (сфалерит и вюрцит), NiAs , CaF_2 .

Задачи для письменной самостоятельной контрольной работы:

Образец заданий к контрольной работе.

Задача 1. Найти матрицу преобразования осей тетрагональной F -ячейки к стандартной ячейке Браве.

Задача 2. Как изменяется симметрия n -динитробензола в зависимости от поворотов нитрогрупп?

Задача 3. К каким сингониям относятся кристаллы, имеющие данный набор старших элементов симметрии: а) C_6 , б) S_4 , в) $\sigma + C_2 + i$, г) $3S_4$, д) $2\sigma + C_2$, е) S_2 .

Задача 4. Найти положение и тип (поворотная или винтовая) двойной оси $\parallel z$, получающейся при взаимодействии осей $21 \parallel x$ и y , проходящих соответственно через точки $(0, 1/4, 0)$ и $(0, 0, 1/4)$.

Задача 5. Определить кратность правильных систем точек по симметрии их позиции в следующих пространственных группах: а) $C2/c (\bar{1})$, б) $Pban (222)$.

Задача 6. Если в элементарной ячейке присутствует атом $X (0,1; 0,2; 0,3)$, а симметрия кристалла $Pcc2$, то атомы с какими координатами будут ему кристаллографически эквивалентны:

а) $0,1; 0,3; 0,8$; б) $0,1; 0,8; 0,8$; в) $0,9; 0,8; 0,3$;

г) $0,9; 0,8; 0,8$; д) $0,9; 0,2; 0,8$; е) $0,1; 0,3; 0,3$.

Задача 7. Плоскость скользящего отражения a , проходящая через начало координат ромбической элементарной ячейки перпендикулярно трансляции c , преобразует точку с координатами (xyz) в точку с координатами: а) $1/2\bar{x}, y, \bar{z}$; б) $1/2 + x, y, \bar{z}$; в) $1/2\bar{x}, \bar{y}, z$; г) $1/2 + x, \bar{y}, z$; д) $1/2\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}$; е) $1/2 + x, \bar{y}, \bar{z}$.

Задача 8. Определить формулу двойного оксида циркония и скандия, если он имеет структуру типа флюорита с вакансиями в $1/7$ позиций атомов кислорода.

Задача 9. В структуре соединения $A_mB_nO_p$ атомы кислорода окружают атомы A по тетраэдру, а атомы B – по октаэдру. Определить тип формулы, если в ближайшей координационной сфере атомов кислорода – один атом A и три атома B .

Задача 10. Найти все варианты записи символа пр. гр. $Cmca$ в зависимости от наименования осей координат.

Задача 11. Какие структурные мотивы у кристаллов: цинка, азота, кварца, $BaSO_4$, ДНК?

Задача 12. Сколько особых и единичных направлений в следующих ТГС: а) m ; б) mmm ; в) $\bar{4}2m$; г) $3m$; д) $6/mmm$; е) 432 ?

Задача 13. Определить формулу оксофторида калия и титана, если в его структуре атомы кислорода и часть атомов калия образуют единую кубическую плотнейшую упаковку с соотношением катионов и анионов AX_3 , в которой ионы Ti^{4+} и вторая часть атомов K занимают по $1/6$ октаэдрических пустот.

Задача 14. Определить число координатных параметров в структуре $[\text{Ru}(\text{NH}_3)_5\text{NO}_2]\text{Cl}\cdot\text{H}_2\text{O}$ (пр. гр. $Cmc2_1$, $Z = 4$), если рутений имеет октаэдрическую координацию, а число базисных атомов минимально.

Задача 15. В структуре арсената кобальта катионы Co^{2+} и As^{5+} имеют октаэдрическую координацию, а все атомы кислорода – одинаковое окружение. Определить формулу соединения и координацию кислорода, если в структуре соблюдается второе правило Полинга.

Задача 16. Двойной нитрид лития и алюминия имеет структуру анти-флюорита. Найти формулу соединения.

Оценочные средства для промежуточной аттестации (зачет)

1. Предмет и задачи кристаллохимии.
2. Кристаллохимия как часть химии и кристаллографии.
3. Основные вехи истории кристаллохимии.
4. Симметрия кристаллов.
5. Закрытые операции и элементы симметрии.
6. Теоремы о сочетаниях закрытых элементов симметрии.
7. Кристаллографические точечные группы симметрии.
8. Сингонии.
9. Закон постоянства двугранных углов. История открытия. Методы применения.
10. Элементарная ячейка.
11. Кристаллическая решетка. Решетки Браве.
12. Кристаллографические системы координат.
13. Открытые операции и элементы симметрии.
14. Пространственные группы симметрии.
15. Символика точечных групп.
16. Основные понятия кристаллохимии. Структурные типы. Изоточечность, изоструктурность, изотипность.
17. Полиэдрический метод изображения структур.
18. Форма кристаллических многогранников. Понятие простой, общей и частной форм.
19. Семейства кристаллических структур.
20. Симметричная статистика минералов и неорганических соединений.
21. Межплоскостные расстояния для различных сингоний.
22. Кристаллоструктурные характеристики атомов и химических связей. Общая теория межатомных взаимодействий.
23. Основы рентгеноструктурного анализа. Дифракция рентгеновских лучей.
24. Основные методы рентгенографии.
25. Условия Брэгга-Вульфа.
26. Метод Лауэ.
27. Основы рентгенофазового анализа.

28. Структурные амплитуды.
29. Электронная плотность.
30. От чего зависит интенсивность рефлексов на дифрактограмме?
31. Период идентичности.
32. Атомный фактор.
33. Основные этапы анализа структуры кристалла.
34. Рентгенофазовый анализ.
35. Кембриджская база кристаллоструктурных данных о строении органических, металлоорганических и координационных соединений.
36. Описание и систематика кристаллических структур.
37. Структуры простых веществ. Координация атомов.
38. Число формульных единиц и рентгеновская плотность.
39. Типы изоморфизма.
40. Эмпирические правила изоморфизма.
41. Структура меди, α -Fe и Mg. Их аналоги.
42. Твердые растворы.
43. Типы полиморфизма.
44. Факторы, определяющие структуру кристаллов.
45. Правило Гольдшмидта.
46. Эффективные радиусы ионов. Определение ионных и атомных радиусов. Металлические радиусы.
47. Ковалентные радиусы. Ван-дер-ваальсовы радиусы. Система «тетраэдрических радиусов».
48. Поляризация ионов и влияние ее на структуру. Коэффициент деформируемости.
49. Структуры бинарных соединений.
50. Структура ZnS вюртцита. Структурный тип никелина NiAs. Двухэтажные структуры.
51. Простейшие структуры типа A_2X . Структуры типа CaF_2 .
52. Структурный тип нитрида бора. Слоистые структуры типа AX_2 как следствие поляризации.
53. Структура типа рутила – TiO_2 . Структура ThO_2 .
54. Структура алмаза и графита. Слоистые структуры.
55. Структура кристалла и структурный тип. Структура NaCl и бензола. Структурный тип цинкита.
56. Координационное число. Классификация структур по координационным числам.
57. Структурный тип кристобалита.
58. Структурный тип кристаллического CO_2 . Структурный тип пирита. Молекулярные структуры.
59. Сплавы.
60. Роль типа химической связи.
61. Энергия кристаллической решётки.
62. Физические свойства кристаллов.

- 63.Связь строения и магнитных свойств соединений, кристаллизующихся по типу шпинели.
- 64.Островные структуры солей кислородсодержащих кислот.
- 65.Структуры фосфатов и силикатов.
- 66.Основные факторы, влияющие на структуру кристаллов.
- 67.Органическая кристаллохимия. Стереохимия органических молекул. Соотношение собственной симметрии молекулы и симметрии позиции.
- 68.Теория плотной упаковки молекул. Молекулярное координационное число. Межмолекулярные водородные связи.
- 69.Строение реальных кристаллов. Важнейшие типы дефектов.
- 70.Точечные дефекты. Дислокации.