

Правительство Российской Федерации
Санкт-Петербургский государственный университет
Геологический факультет

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА
УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ**

**Кристаллохимия высоких температур и давлений
High- pressure and temperature crystallochemistry**

Язык(и) обучения _____ *русский* _____

Трудоёмкость _____ 2 _____ зачётных единиц

Регистрационный номер
рабочей программы:

<small>код года утверждения</small>	/	<small>код факультета или иного структурного подразделения</small>	/	<small>порядковый номер или шифр</small>
---	---	--	---	--

Санкт-Петербург
2012

Раздел 1. Характеристики, структура и содержание учебных занятий

1.1. Цели и задачи учебных занятий

Потребность в курсе "Кристаллохимия высоких температур и давлений" определяется тем, что в наши дни основным направлением прогресса в области знаний о кристаллическом веществе является смещение интересов человечества с атмосферных условий на высокие температуры и давления. По этой причине данный курс направлен именно на понимание процессов, протекающих в глубинных оболочках нашей планеты и на ее поверхности в условиях вулканизма, а также в высокотемпературных научных и производственных установках. Курс является обязательным для магистрантов кафедры кристаллографии и дается во II семестре магистратуры.

1.2. Требования к подготовленности обучающегося к освоению содержания учебных занятий (пререквизиты)

Для успешного освоения дисциплины студент должен иметь предварительную подготовку по математике, химии и физике, а также по минералогии, кристаллографии,

1.3. Перечень формируемых компетенций (результаты обучения)

В процессе изучения курса у слушателей должны быть сформированы компетенции:

- способен моделировать поведение кристаллических веществ в природных и технологических системах при изменении физико-химических параметров;
- готов проводить работы по получению при различных температурах веществ и материалов с полезными свойствами.
- способен использовать полученные знания в своей профессиональной деятельности.

1.4. Знания, умения, навыки, осваиваемые обучающимся

- знать основные принципы преобразования кристаллических веществ при изменении температуры, давления и химического состава;
- уметь экспериментально получать информацию о таких термодинамических характеристиках вещества, как температура плавления или распада, температура

1.5. Перечень и объём активных и интерактивных форм учебных занятий

Лекции - 10 час., семинары - 20 час.

1.6. Организация учебных занятий

Трудоёмкость, объёмы учебной работы и наполняемость групп обучающихся

Код модуля в составе дисциплины, практики и т.п.	Аудиторная учебная работа обучающихся								Самостоятельная работа						Объём активных и интерактивных форм учебных занятий	Трудоёмкость
	лекции	семинары	консультации	практические занятия	лабораторные работы	контрольные работы	коллоквиумы	текущий контроль	промежуточная аттестация	под руководством преподавателя	в присутствии преподавателя	в т.ч. с использованием методических	текущий контроль	промежуточная аттестация		
<i>по формам обучения</i>																
	10	20							2	14		16		25	20	2
	<small>студентов</small>	<small>студентов</small>	<small>студентов</small>	<small>студентов</small>	<small>студентов</small>	<small>студентов</small>	<small>студентов</small>	<small>студентов</small>	<small>студентов</small>	<small>студентов</small>	<small>студентов</small>	<small>студентов</small>	<small>студентов</small>	<small>студентов</small>	<small>студентов</small>	<small>студентов</small>
ИТОГО:	10	20							2	14		16		25	20	2

Виды, формы и сроки
текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации

Код модуля в составе дисциплины, практики и т.п.	Промежуточная аттестация		Текущий контроль	
	Виды	Сроки	Формы	Сроки
<i>очная форма обучения</i>				
Модули не предусмотрены	экзамен	с 15 мая	две контрольные работы	5 и 10 недели семестра

1.7. Структура и содержание учебных занятий

1. Динамическая кристаллохимия. Лекции - 7 час., семинары - 8 час.

Тема 1. Введение. Роль температуры и давления в технологических и геологических процессах. Тепловое движение атомов и молекул, формы движения, интенсивность, термические и барические преобразования веществ, коэффициенты термического расширения и сжимаемости. Методы экспериментальных исследований кристаллических веществ при переменных термодинамических параметрах.

Тема 2. Кристаллохимия высоких температур.

Первый принцип термических деформаций (скалярность воздействия температуры): формулировка принципа, корреляции структурночувствительных свойств с кристаллической структурой и между собой. Второй принцип термических деформаций (прочностной аспект), среднее термическое расширение координационного полиэдра кислородных соединений как функция полинговской прочности связи, среднее термическое расширение кислородных соединений с треугольными и тетраэдрическими комплексами, анизотропия термического расширения кристаллических веществ, обусловленная анизометричностью их строения. Третий принцип термических деформаций (симметричный аспект): повышение симметрии кристаллов с ростом температуры – обобщенная концепция, преобладание перестройки структуры при деформациях и превращениях кристаллов, сдвиговые деформации косоугольных (моноклинных и триклинных) кристаллов, резкая анизотропия деформаций, обусловленная сдвигами; разделение термических деформаций на компоненты; частое проявление отрицательного линейного термического расширения моноклинными и триклинными кристаллами – следствие сдвиговых деформаций; шарниры как обобщение сдвигов. Температурная зависимость изоморфных замещений: расширение пределов замещений с температурой, исключения, геотермометры.

Тема 3. Начала кристаллохимии высоких давлений.

Принцип 1. Принцип Ле-Шателье.

Принцип 2. Средняя величина сжимаемости координационного полиэдра кислородных соединений как функция полинговской прочности связи.

Принцип 3. Сжимаемость кристаллической структуры вещества в целом.

Тема 4. Сопоставительная кристаллохимия.

Подобие деформаций кристаллического вещества, происходящих вследствие скалярного (псевдоскалярного) воздействия различного рода. Антиподобие термических и барических деформаций, условия проявления, примеры. Подобие термических и химических деформаций, условия проявления, ограничения, примеры. Количественное сопоставление деформаций различной природы. Барические эквиваленты термических деформаций α/β , определение, диапазон значений. Термические эквиваленты химических деформаций. Оценка количества изоморфной примеси, стабилизирующей высокотемпературную полиморфную модификацию при комнатной температуре.

Тема 5. Кристаллохимия некоторых природных высокотемпературных процессов.

Влияние суточных и сезонных колебаний температуры на протекание низкотемпературных фазовых переходов на земной поверхности: неорганические минералы - лед, бура; органические минералы - парафины. Физическое выветривание горных пород за счет различного нагревания темно- и светлоокрашенных минеральных зерен на солнце, оценка прироста объема. Термическое разуплотнение горных пород: консолидация изначально пористых горных пород под действием сил литостатического сжатия, глубина консолидации, разуплотнение пород в условиях метаморфизма вследствие резкой анизотропии теплового расширения и сжимаемости минералов и их фазовых переходов, циркуляция флюидов по межзеренным микротрещинам, метасоматическое рудоотложение. О соотношении теплового расширения и сжимаемости земных оболочек: сведения о минеральном составе различных зон Земли, средние значения градиента температуры в Земле, выделение в первом приближении охлаждаемой и термостатированной зон Земли, градиенты давления в Земле, оценка значений α/β минералов на различных глубинах, изменение соотношения теплового расширения и сжимаемости минералов и земных оболочек с глубиной

Фазовые переходы и сейсмические раздели в различных зонах Земли.

Кристаллохимия минералов и процессов вулканических эксгаляций.

Изменение симметрии минералов с глубиной в Земле; средний индекс симметрии минералов на поверхности планеты и вблизи ядра.

2. Кристаллохимический подход к решению физико-химических задач . Лекции – 3 час., семинары – 12 час.

Тема 1. Понятия, терминология, задачи физикохимии. Методы исследования in situ и закалки. Принципы построения фазовых диаграмм бинарных систем по данным терморентгенографии.

Тема 2. Изучение фазовых равновесий «твердое тело – твердое тело». Образование и/или распад химических соединений. Растворимость в твердом состоянии (гомогенизация и распад твердых растворов). Бинодальная кривая распада твердых растворов, построенная по исследованию одного образца. Полиморфные переходы. Аппроксимация температурной зависимости параметров решетки (полиномы, экспонента). Фазовые переходы 1- и 2-го рода. Изосимметричные переходы. Переходы «порядок – беспорядок».

Тема 3. Исследование фазовых равновесий «твердое тело – жидкая фаза». Диагностические признаки плавления. Двойные системы с эвтектикой. Двойные системы с перитектикой. Двойные системы с твердыми растворами.

Тема 4. Исследование тройных систем с твердыми растворами. Построение изотермических сечений с использованием параметров кристаллической решетки. Изменение параметров решетки в одно-, двух- и трехфазных областях.

Тема 5. Исследование фазовых превращений с участием газовой фазы. Превращения со скачкообразным изменением хим. состава (дегидратация, разложение и т.п.). Превращения с непрерывным изменением хим. состава (потеря или приобретение массы).

Раздел 2. Обеспечение учебных занятий

2.1. Методическое обеспечение

2.1.1. Методическое обеспечение аудиторной работы

Модели кристаллических структур. Компьютеры, программы к ним.

2.1.2. Методическое обеспечение самостоятельной работы

Модели кристаллических структур. Компьютеры, программы к ним.

2.1.3. Методика проведения текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации и критерии оценивания

Краткий опрос перед каждой лекцией. Контрольные вычисления на компьютерах.

2.1.4. Методические материалы для проведения текущего контроля

успеваемости и промежуточной аттестации (контрольно-измерительные материалы)

2.1.4.1. Модели кристаллических структур. Вычислительные программы.

2.1.4.2. Перечень примерных контрольных вопросов и заданий для самостоятельной работы по всем разделам программы:

Динамическая кристаллохимия

- Почему динамическая кристаллохимия получила такое название?
- Назовите основное (присущее любой области температур)
- Основное кристаллохимическое явление кристаллохимии высоких давлений.
- Что преобладает на разных глубинах Земли: термическое расширение или
- На какой глубине можно провести условную границу между охлаждаемой
- При каком давлении происходит консолидация изначально пористых
- На глубине 12 км обнаружены процессы метасоматоза. Согласуется ли это
- Какая порода: базальт или мрамор - сильнее разогревается на солнце?
- Что такое динамическая или сопоставительная кристаллохимия?
- Как меняется симметрия минералов с глубиной в Земле? Почему?

Кристаллохимический подход к решению физико-химических задач

- Фазовые переходы: Какие фазовые переходы относятся к переходам I и II рода? Какие термодинамические характеристики меняются скачкообразно при фазовых переходах I рода? Какие термодинамические характеристики меняются скачкообразно при фазовых переходах II рода? Какие переходы называются изосимметричными, к какому роду они относятся ?
- Как построить бинодальную кривую распада твердых растворов по терморентгеновскому исследованию одного образца?
- Привести диагностические терморентгеновские признаки образования и/или разложения химического соединения. Какая температура считается температура образования и/или разложения ?
- Привести диагностические терморентгеновские признаки плавления системы с перитектикой. Какая температура считается температура перитектики, как определяется состав перитектики?

- Привести диагностические терморентгеновские признаки плавления системы с эвтектикой. Какая температура считается температурой эвтектики, как определяется состав эвтектики.
- Привести диагностические терморентгеновские признаки плавления системы с твердыми растворами. Изменяется ли температурная зависимость параметров кристаллической решетки при плавлении тв. растворов.
- Твердые растворы: Как меняется состав и количество фаз в одно- и двухфазных областях двойной системы? Как меняется состав и количество фаз в одно-, двух- и трехфазных областях тройной системы?

2.1.4.3. Примерный перечень вопросов к экзамену по всем разделам учебной дисциплины

Динамическая кристаллохимия

- 1. Динамическая кристаллохимия (кристаллохимия высоких температур и
- 2. Термическое расширение кристаллических веществ: классические
- 3. Термическое расширение кристаллических веществ: симметричный
- 4. Отрицательное линейное термическое расширение кристаллов:
- 5. Принципы кристаллохимии высоких давлений: I – принцип Ле-Шателье,
- 6. Глубина консолидации горных пород в земной коре под действием
- 7. Подобие деформаций кристаллической структуры минералов вследствие
- 8. Количественное сопоставление структурных деформаций различного
- 9. Оценка соотношения теплового расширения и литостатического сжатия
- 10. Кристаллохимическая природа основных сейсмических разделов в
- 11. Симметрия минералов различных земных оболочек, индекс Доливо-
- 12. Повышение симметрии кристаллических веществ при росте

Интерпретация кристаллохимических данных с точки зрения фазовых диаграмм

- Фазовые равновесия «твердое тело – твердое тело»: Полиморфные переходы. Классификация полиморфных переходов. Исследование температурной зависимости параметров решетки.
- Фазовые равновесия «твердое тело – твердое тело»: Растворимость в твердом состоянии (гомогенизация и распад твердых растворов).
- Фазовые равновесия «твердое тело – твердое тело»: Полиморфные переходы смещения и близкие ко II роду.
- Фазовые равновесия «твердое тело – твердое тело»: Переходы типа «порядок–беспорядок» («order–disorder»)
- Фазовые равновесия «твердое тело – жидкая фаза»: Диагностические признаки плавления, линия ликвидуса.
- Фазовые равновесия «твердое тело – жидкая фаза»: Система с твердыми растворами. Бинодальная кривая. Линия солидуса.

- Фазовые равновесия «твердое тело – жидкая фаза»: Система с эвтектикой.
- Фазовые равновесия «твердое тело – жидкая фаза»: Система с перитикой.
- Фазовые равновесия «твердое тело – жидкая фаза»: Система с твердыми растворами.
- Фазовые равновесия «твердое тело – газовая фаза»: Превращения со скачкообразным или непрерывным изменением химического состава.
- Исследование тройных систем с твердыми растворами: 1-, 2х- и 3х-фазные области; изменение фазового состава и параметров кр. решетки фаз в этих областях; интерпретация данных с точки зрения фазовых диаграмм.

2.2. Кадровое обеспечение

2.2.1. Требования к образованию и (или) квалификации штатных преподавателей и иных лиц, допущенных к преподаванию дисциплины
Преподаватели с высшим специальным образованием (специальность - кристаллография)

2.2.2. Требования к обеспеченности учебно-вспомогательным и (или) иным персоналом

Учебно-вспомогательный персонал должен обладать навыками организации работы с коллекцией моделей кристаллических структур.

2.2.3. Методические материалы для оценки обучающимися содержания и качества учебного процесса

Модели кристаллических структур.

2.3. Материально-техническое обеспечение

2.3.1. Требования к аудиториям (помещениям, местам) для проведения занятий

Стандартная аудитория, оснащенная аппаратурой для проектирования презент

2.3.2. Требования к аудиторному оборудованию, в том числе к неспециализированному компьютерному оборудованию и программному обеспечению общего пользования

Не требуется

2.3.3. Требования к специализированному оборудованию

Компьютеры

2.3.4. Требования к специализированному программному обеспечению

Комплекс вычислительных программ

2.3.5. Требования к перечню и объёму расходных материалов

2 пачки бумаги формата А4 для проведения контрольных работ и экзамена

2.4. Информационное обеспечение

2.4.1. Список обязательной литературы

1. Бубнова Р.С., Кржижановская М.Г., Филатов С.К. Практическое руководство по терморентгенографии поликристаллов. Часть I. Осуществление эксперимента и интерпретация полученных данных. Учебное пособие. СПб.: С.-Петербург. гос. ун-т, 2011. 70 с.
2. Бубнова Р.С., Филатов С.К. Высокотемпературная кристаллохимия боратов и боросиликатов. 2008. СПб: Наука. 760 с.

3. Филатов С.К. Высокотемпературная кристаллохимия. Л.: Недра, 1990.

4. Котельникова Е.Н., Филатов С.К. Кристаллохимия парафинов. СПб: Изд-во журнала Нева. 2002.

5. Hazen R.M., Finger L.W. Comparative crystal chemistry. London e.a. 1982.

6. Пущаровский Д.Ю. Рентгенография минералов. М.: ЗАО «Геоинформатика». 2000.

2.4.2. Список дополнительной литературы

1. Рингвуд А.Е. Состав и петрология мантии Земли. М.: Недра, 1981.

2. Шафрановский И.И. История кристаллографии XIX века. Л.: Наука, 1980.

4. Filatov S.K., Hazen R.M. High-temperature and high-pressure crystal chemistry.

2.4.3. Перечень иных информационных источников

Не требуется

Раздел 3. Процедура разработки и утверждения рабочей программы

Разработчик(и) рабочей программы

Фамилия, имя, отчество	Учёная степень	Учёное звание	Должность	Контактная информация (служебный адрес электронной почты, служебный телефон)
Филатов С.К., Бубнова Р.С.	д.г-м наук, д. х.н.	проф., -	профессора	filatov.stanislav@gmail.com

В соответствии с порядком организации внутренней и внешней экспертизы образовательных программ проведена двухуровневая экспертиза:

первый уровень (оценка качества содержания рабочей программы и применяемых педагогических технологий)		
Наименование кафедры	Дата заседания	№ протокола
кристаллографии	10.05.2012	№5
минералогии	04.05.2012	№6
второй уровень (соответствие целям подготовки и учебному плану образовательной программы)		
Экспертиза второго уровня выполнена в порядке, установленном приказом		
<i>должностное лицо</i>	<i>дата приказа</i>	<i>№ приказа</i>
Уполномоченный орган (должностное лицо)	Дата принятия решения	№ документа

Иные документы об оценке качества рабочей программы

Документ об оценке качества	Дата документа	№ документа

Утверждение рабочей программы

Уполномоченный орган (должностное лицо)	Дата принятия решения	№ документа

Внесение изменений в рабочую программу

Уполномоченный орган (должностное лицо)	Дата принятия решения	№ документа