МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ГЕОТЕХНОЛОГИЧЕСКИЙ ЦЕНТР ДАЛЬНЕВОСТОЧНОГО ОТДЕЛЕНИЯ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК (НИГТЦ ДВО РАН)

УТВЕРЖДАЮ
Директор НИГТЦ ДВО РАН

_____ Р.И. Пашкевич

«10» апреля 2023 г.

ПРОГРАММА
ВСТУПИТЕЛЬНОГО ИСПЫТАНИЯ ПО СПЕЦИАЛЬНОСТИ

Направление подготовки 05.06.01 Науки о земле

Научная специальность 1.6.4 «Минералогия, кристаллография. Геохимия, геохимические методы поисков полезных ископаемых»

Петропавловск-Камчатский, 2023

Программа составлена в соответствии с Федеральными государственными требованиями к структуре программ подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре, утвержденных приказом Министерства науки и высшего образования Российской Федерации №951 от 20.10.2021 г., по направлению 05.06.01 Науки о земле, научной специальности 1.6.4 «Минералогия, кристаллография. Геохимия, геохимические методы поисков полезных ископаемых».

Автор: к.т.н. Иодис В.А.

Программа обсуждена и одобрена на Ученом совете НИГТЦ ДВО РАН протокол №1 от 06.04.2023г.

1. Общие указания.

Вступительные испытания по научной специальности 1.6.4 «Минералогия, кристаллография. Геохимия, геохимические методы поисков полезных ископаемых».

охватывают стандартные разделы университетских курсов данной специальности. Вопросы и структура экзаменационных билетов приведены ниже. Настоящая программа охватывает основные разделы научной специальности 1.6.4 «Минералогия, кристаллография. Геохимия, геохимические методы поисков полезных ископаемых».

2. Порядок проведения вступительных испытаний.

Вступительное испытание проводится в форме экзамена на основе билетов. В каждом экзаменационном билете по 2 вопроса. Экзамен проходит в письменной форме. Подготовка к ответу составляет 1 академический час (45 минут) без перерыва с момента раздачи билетов. Задания оцениваются по пятибалльной системе в зависимости от полноты и правильности ответов.

3. Критерии оценивания.

Оценка поступающему за письменную работу выставляется в соответствии со следующими критериями.

Отлично. Поступающий обнаружил знания, отличающиеся глубиной и содержательностью, умением дать полный исчерпывающий ответ, как на основные вопросы билета, так и на дополнительные, умение свободно выполнять задания, усвоил взаимосвязь основных понятий в их значении для приобретаемой профессии, свободно владеет научными понятиями; логично и доказательно раскрывает проблему, предложенную в билете; ответ не содержит фактических ошибок и характеризуется полнотой, уверенностью.

Хорошо. Знания, продемонстрированные поступающим имеют достаточный содержательный уровень, однако отличаются слабой структурированностью; обнаружил знание вопросов, раскрыто содержание билета, но имеются неточности при ответе на дополнительные вопросы, в ответе имеют место несущественные фактические ошибки, которые поступающий способен исправить самостоятельно, благодаря наводящему вопросу.

Удовлетворительно. Ответ отличаются поверхностностью и малой содержательностью, имеются неточности при ответе на основные вопросы билета. Поступающий обнаружил знание основ специальности, но нарушена логика изложения, отсутствует осмысленность представляемого материала; не может обосновать закономерности и принципы, объяснить факты; отсутствуют представления о межпредметных связях, но при этом знаком с основной литературой, рекомендованной данной программой, обладает необходимыми знаниями для их устранения под руководством преподавателя.

Неудовлетворительно. Поступающий обнаружил значительные пробелы в знаниях основ выбранной специальности, на большую часть дополнительных вопросов по содержанию экзамена поступающий затрудняется дать ответ или не дает верных ответов.

4. Разделы дисциплины, вопросы программы вступительного экзамена в аспирантуру по научной специальности 1.6.4 «Минералогия, кристаллография. Геохимия, геохимические методы поисков полезных ископаемых».

Предмет кристаллохимии. Цель и задачи науки. Исторические этапы ее развития. Принципы выделения кристаллохимии как науки об атомном строении кристаллов из наук о твердом веществе. Связь кристаллохимии с родственными науками. Центральная проблема кристаллохимии –

предсказание структуры кристалла для заданного химического состава. Причины ограниченности числа неорганических соединений и особенно минеральных видов. Неравномерность распределения минералов и неорганических соединений по классам симметрии и пространственным группам.

Структурная кристаллография. Закрытые операции симметрии, их обозначение. Аналитическая запись операции симметрии. Взаимодействие операций симметрии. Основы теории групп. Генераторы группы, определяющие соотношения, подгруппы. Правильные системы точек. Точечные группы симметрии (ТГС), их классификация и представление в виде подгрупп. Единичные и полярные направления. Полярность и хиральность молекул и кристаллов. Соотношение между точечной симметрией кристалла и симметрией его физических свойств. Принцип Неймана. Принцип Кюри и его применение.

Кристаллическая решетка, ее взаимодействие с ТГС. Федоровские группы, группа трансляций. Сингонии, соподчинение сингоний. Решетки и ячейки Браве. Голоэдрические ТГС. Гомоморфизм пространственных и точечных групп. Принципы вывода пространственных групп симметрии (ПГС), их классификация, обозначение и представление. Выбор начала координат. Геометрия решетки. Прямые и плоскости решетки. Уравнения прямой и плоскости решетки. Индексы Вейсса. Свойства плоскостей. Индексы Миллера. Основные теоремы решетчатой кристаллографии. Обратная решетка. Преобразование координат точек и индексов узловых плоскостей кристаллического пространства при изменении базиса кристаллографической системы координат.

Структурные методы анализа. Основы теории дифракции. Формула Брэгга-Вульфа. Белое и характеристическое излучение. Способы регистрации дифракционных лучей, основные виды рентгенограмм кристаллов. Классы дифракционной симметрии, систематические погасания рефлексов.

Определение симметрии кристалла, параметров решетки и числа формульных единиц в ячейке.

Интенсивность рентгеновского дифракционного отражения. Структурный фактор. Фактор атомного рассеяния, аномальное рассеяние. Формула электронной плотности (ряд Фурье). Применение обратной решетки для описания дифракции волн на кристаллической решетке. Фазовая проблема. Понятие о способах расшифровки кристаллических структур. Уточнение структуры, её числовые параметры и критерии достоверности структурной модели. Основные практические этапы рентгеноструктурного анализа, представление результатов. Современные дифракционные методы структурного анализа. Спектроскопические методы исследования.

Общая и описательная кристаллохимия. Типы химических связей в кристалле, их основные характеристики. Энергия связи в ионном кристалле, постоянная Маделунга. Ковалентная связь, гибридизация атомных орбиталей. Гомеополярная и гетерополярная связи. Донорно-акцепторная связь. Электроотрицательность. Металлическая связь. Ван-дер-ваальсовая (остаточная) связь. Водородная связь. Обобщенные функции потенциальной энергии химической связи. Эффективные радиусы атомов и ионов.

Способы представления кристаллических структур. Принципы плотнейшей упаковки, табулирование структурных типов неорганических веществ и их производных, использование полиэдров Полинга-Белова и Вороного-Дирехле, параллелоэдры и сфеноиды Федорова. Пустоты в плотнейших упаковках и мотивы их заселения. Основные структурные типы на основе координационных полиэдров катионов. Анионоцентрированные полиэдры и соответствующие структурные типы. Связь между координационными числами катионов и анионов в нормально-валентных структурах. Вторичные структурные единицы и структуры каркасных силикатов, в частности, цеолитов.

Основные категории кристаллохимии. Химический состав и структура кристаллов. Основные категории кристаллохимии – морфотропия, полиморфизм и изоморфизм. Связи между категориями кристаллохимии, переходы между ними. Закономерности морфотропии и их кристаллохимическая природа. Основной закон кристаллохимии Гольдшмидта. Критерии устойчивости структурного типа. Правила Полинга для ионных кристаллов. Правила устойчивости структурных типов ковалентных и существенно ковалентных кристаллов. Правило октета. Правило Юма-Розери. Структурная гомология. Гомологические ряды. Производные и вырожденные структуры. Фазы вычитания и внедрения.

Полиморфизм как общее свойство кристаллических структур. Правило ступеней Оствальда. Классификация полиморфизма. Полиморфные переходы первого и второго рода. Структурные аспекты явления полиморфизма. Политипия. Отличие политипии от полиморфизма. Способы описания политипных структур.

Изоморфизм и изоструктурность. Изодиморфизм. Классификация изоморфизма, его соотношение с твердыми растворами. Классические правила изоморфизма Гольдшмидта-Ферсмана. Изоморфизм как функция температуры и давления. Ряды Вернадского. Распад изоморфных смесей при понижении температуры и повышении давления. Нестехиометрические соединения.

Вопросы экзамена.

1. Принципы выделения кристаллохимии как науки об атомном строении кристаллов из наук о твердом веществе. Связь кристаллохимии с родственными науками.

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. Закрытые операции симметрии, их обозначение. Аналитическая запись операции симметрии. Взаимодействие операций симметрии.

5. Основы теории групп. Генераторы группы, определяющие соотношения, подгруппы. Правильные системы точек.

6. Точечные группы симметрии (ТГС), их классификация и представление в виде подгрупп.

7. Единичные и полярные направления. Полярность и хиральность молекул и кристаллов.

8. Соотношение между точечной симметрией кристалла и симметрией его физических свойств. Принцип Неймана. Принцип Кюри и его применение.

9. Кристаллическая решетка, ее взаимодействие с ТГС. Федоровские группы, группа трансляций.

10. Сингонии, соподчинение сингоний. Решетки и ячейки Браве. Голоэдрические ТГС.

11. Гомоморфизм пространственных и точечных групп.

12. Принципы вывода пространственных групп симметрии (ПГС), их классификация, обозначение и представление. Выбор начала координат.

13. Геометрия решетки. Прямые и плоскости решетки. Уравнения прямой и плоскости решетки. Индексы Вейсса. Свойства плоскостей.

14. Индексы Миллера. Основные теоремы решетчатой кристаллографии.

15. Обратная решетка.

16. Преобразование координат точек и индексов узловых плоскостей кристаллического пространства при изменении базиса кристаллографической системы координат.

17. Основы теории дифракции. Формула Брэгга-Вульфа. Белое и характеристическое излучение.

18. Способы регистрации дифракционных лучей, основные виды рентгенограмм кристаллов.

19. Классы дифракционной симметрии, систематические погасания рефлексов.

20. Определение симметрии кристалла, параметров решетки и числа формульных единиц в ячейке.

21. Интенсивность рентгеновского дифракционного отражения. Структурный фактор. Фактор атомного рассеяния, аномальное рассеяние. Формула электронной плотности (ряд Фурье).

22. Применение обратной решетки для описания дифракции волн на кристаллической решетке.

23. Фазовая проблема. Понятие о способах расшифровки кристаллических структур. Уточнение структуры, её числовые параметры и критерии достоверности структурной модели.

24. Основные практические этапы рентгеноструктурного анализа, представление результатов.

25. Современные дифракционные методы структурного анализа.

26. Спектроскопические методы исследования.

27. Типы химических связей в кристалле, их основные характеристики.

28. Энергия связи в ионном кристалле, постоянная Маделунга.

29. Ковалентная связь, гибридизация атомных орбиталей. Гомеополярная и гетерополярная связи. Донорно-акцепторная связь. Электроотрицательность.

30. Металлическая связь. Ван-дер-ваальсовая (остаточная) связь. Водородная связь.

31. Обобщенные функции потенциальной энергии химической связи.

32. Эффективные радиусы атомов и ионов.

33. Способы представления кристаллических структур. Принципы плотнейшей упаковки, табулирование структурных типов неорганических

веществ и их производных, использование полиэдров Полинга-Белова и Вороного-Дирехле, параллелоэдры и сфеноиды Федорова.

34. Пустоты в плотнейших упаковках и мотивы их заселения. Основные структурные типы на основе координационных полиэдров катионов.

35. Анионоцентрированные полиэдры и соответствующие структурные типы. Связь между координационными числами катионов и анионов в нормально-валентных структурах.

36. Вторичные структурные единицы и структуры каркасных силикатов, в частности, цеолитов.

37. Химический состав и структура кристаллов. Основные категории кристаллохимии – морфотропия, полиморфизм и изоморфизм. Связи между категориями кристаллохимии, переходы между ними.

38. Закономерности морфотропии и их кристаллохимическая природа. Основной закон кристаллохимии Гольдшмидта. Критерии устойчивости структурного типа. Правила Полинга для ионных кристаллов.

39. Правила устойчивости структурных типов ковалентных и существенно ковалентных кристаллов. Правило октета. Правило Юм-Розери.

40. Структурная гомология. Гомологические ряды. Производные и вырожденные структуры. Фазы вычитания и внедрения.

41. Полиморфизм как общее свойство кристаллических структур. Правило ступеней Оствальда. Классификация полиморфизма.

42. Полиморфные переходы первого и второго рода. Структурные аспекты явления полиморфизма.

43. Политипия. Отличие политипии от полиморфизма. Способы описания политипных структур.

44. Изоморфизм и изоструктурность. Изодиморфизм. Классификация изоморфизма, его соотношение с твердыми растворами.

45. Классические правила изоморфизма Гольдшмидта-Ферсмана.

46. Изоморфизм как функция температуры и давления. Ряды Вернадского.

47. Распад изоморфных смесей при понижении температуры и повышении давления.

48. Нестехиометрические соединения.

5. Учебно-методическое обеспечение и информационное обеспечение программы вступительного экзамена в аспирантуру по научной специальности 1.6.4 «Минералогия, кристаллография. Геохимия, геохимические методы поисков полезных ископаемых».

1. International Tables for Crystallography. Vol. A: Space-group Symmetry / Ed. Th. Hahn. Dordrecht (Holland): D. Reidel Publishing Company, 1983.
2. High-temperature and high-pressure crystal chemistry /Eds. R.M. Hazen & R.T. Downs. Rev. Miner. Geochem. V. 41, MSA, 2000.
3. Белов Н. В. Структура ионных кристаллов и металлических фаз. М.: Изд-во АН СССР, 1947.
4. Бокий Г.Б. Кристаллохимия. М., Наука, 1973.
5. Бокий Г. Б., Порай-Кошиц М. А. Рентгеноструктурный анализ. Т. I (2-е изд.). М.: Изд-во МГУ, 1964.
6. Вест А. Химия твердого тела. Теория и приложения: В 2-х т. М.: Мир, 1988.
7. Пенкаля Т. Очерки кристаллохимии. Л., Химия, 1974.
8. Пущаровский Д. Ю. Рентгенография минералов. М.: ЗАО «Геоинформмарк», 2000.
9. Пущаровский Д. Ю. Структура и свойства кристаллов. М.: Изд-во МГУ, 1982.
10. Руководство по рентгеновскому исследованию минералов / Под ред. В. А. Франк-Каменецкого. Л.: Недра, 1975.

11. Современная кристаллография, в 4-х т. / Под ред. Б. К. Вайнштейна. М., Наука, 1979.

12. Солодовников С.Ф. Основы кристаллохимии (учебное пособие). Новосибирск: изд-во НГУ. 2012.

13. Урусов В.С., Еремин Н.Н. «Кристаллохимия. Краткий курс» М., Изд-во МГУ, 2010.

14. Чупрунов Е.В., Хохлов А.Ф., Фаддеев М.А. Кристаллография. М., Изд. физ.-мат. лит-ры, 2000.