

Бюджетное учреждение высшего образования
Ханты-Мансийского автономного округа-Югры
"Сургутский государственный университет"

УТВЕРЖДАЮ
Проректор по УМР

_____ Е.В. Коновалова

15 июня 2023 г., протокол УМС №5

Кристаллохимия

рабочая программа дисциплины (модуля)

Закреплена за кафедрой **Химии**

Учебный план s040501-АнХим-23-1 РПД.plx
04.05.01 ФУНДАМЕНТАЛЬНАЯ И ПРИКЛАДНАЯ ХИМИЯ

Квалификация **Химик. Преподаватель химии**

Форма обучения **очная**

Общая трудоемкость **5 ЗЕТ**

Часов по учебному плану 180
в том числе:
аудиторные занятия 68,3
самостоятельная работа 66,7
часов на контроль 45

Виды контроля в семестрах:
экзамены 7

Распределение часов дисциплины по семестрам

Семестр (<Курс>.<Семестр на курсе>)	7 (4.1)		Итого	
	уп	рп	уп	рп
Неделя	17 2/6			
Вид занятий	уп	рп	уп	рп
Лекции	32	32	32	32
Практические	32	32	32	32
Контактная работа	4,3	4,3	4,3	4,3
Итого ауд.	68,3	68,3	68,3	68,3
Контактная работа	68,3	68,3	68,3	68,3
Сам. работа	66,7	66,7	66,7	66,7
Часы на контроль	45	45	45	45
Итого	180	180	180	180

Программу составил(и):

к.х.н., доцент, Севастьянова Е.В.

Рабочая программа дисциплины

Кристаллохимия

разработана в соответствии с ФГОС:

Федеральный государственный образовательный стандарт высшего образования - специалитет по специальности 04.05.01
Фундаментальная и прикладная химия (приказ Минобрнауки России от 13.07.2017 г. № 652)

составлена на основании учебного плана:

04.05.01 ФУНДАМЕНТАЛЬНАЯ И ПРИКЛАДНАЯ ХИМИЯ

утвержденного учебно-методическим советом вуза от 15.06.2023 протокол № 5.

Рабочая программа одобрена на заседании кафедры

Химии

Зав. кафедрой канд.,биол.,наук, доцент Сутормин Олег Сергеевич

1. ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

1.1	Целью изучения дисциплины "Кристаллохимия" является формирование представлений о пространственной организации веществ в кристаллическом состоянии, применении теории симметрии применительно к описанию строения конечных и бесконечных объектов, знакомство с методами исследования кристаллической структуры веществ, а также приобретение навыков интерпретации кристаллохимической информации.
1.2	Задачи дисциплины:
1.3	- раскрыть роль симметрии и трехмерной периодичности при описании структуры кристаллических веществ;
1.4	- рассмотреть основные модели описания структуры кристаллов;
1.5	- сформировать современные представления о строении и многообразии кристаллических структур;
1.6	- ознакомить с основами дифракционных методов исследования кристаллической структуры веществ;
1.7	- ознакомить с фундаментальными понятиями и явлениями кристаллохимии;
1.8	- раскрыть взаимосвязь кристаллической структуры вещества с его свойствами.

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ООП

Цикл (раздел) ООП:	Б1.В
2.1	Требования к предварительной подготовке обучающегося:
2.1.1	Неорганическая химия
2.1.2	Информатика
2.2	Дисциплины и практики, для которых освоение данной дисциплины (модуля) необходимо как предшествующее:
2.2.1	Физические методы исследования
2.2.2	Производственная практика, научно-исследовательская работа
2.2.3	Подготовка к процедуре защиты и защита выпускной квалификационной работы

3. КОМПЕТЕНЦИИ ОБУЧАЮЩЕГОСЯ, ФОРМИРУЕМЫЕ В РЕЗУЛЬТАТЕ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)**ПК-1.1:** Составляет общий план исследования и детальные планы отдельных стадий**ПК-1.2:** Выбирает методы исследований для решения поставленных задач НИР химической направленности исходя из имеющихся материальных и временных ресурсов**ПК-1.3:** Осуществляет документальное сопровождение НИР**ПК-1.4:** Определяет возможные направления и перспективы развития, практическое применение полученных результатов на основе критического анализа результатов научных исследований

В результате освоения дисциплины обучающийся должен

3.1	Знать:
3.1.1	фундаментальные понятия, терминологию и символику кристаллографии и кристаллохимии;
3.1.2	важнейшие расчетно-теоретические модели используемые в химии для описания структуры кристаллов;
3.1.3	взаимосвязь структуры и свойств веществ;
3.1.4	систематику кристаллических структур важнейших классов простых и сложных неорганических и органических соединений;
3.1.5	основы методов рентгеноструктурного и рентгенофазового анализов.
3.2	Уметь:
3.2.1	описывать симметрию периодических объектов;
3.2.2	проводить простейшие кристаллографические расчеты;
3.2.3	анализировать и интерпретировать данные рентгенофазового анализа;
3.2.4	использовать первичную кристаллоструктурную информацию для определения основных особенностей строения кристаллических веществ и их свойств.
3.3	Владеть:
3.3.1	навыками использования полученных знаний и умений для интерпретации структуры и прогноза свойств материалов;
3.3.2	современными компьютерными технологиями, применяемыми при получении и обработке результатов научных экспериментов

4. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Код занятия	Наименование разделов и тем /вид занятия/	Семестр / Курс	Часов	Компетенции	Литература	Примечание
-------------	---	----------------	-------	-------------	------------	------------

	Раздел 1. Введение. Предмет кристаллохимии.					
1.1	Введение. Кристаллохимия как часть химии. Предмет и задачи кристаллохимии. Кристаллическая структура и способы ее моделирования. Базы структурных данных. /Лек/	7	1	ПК-1.1 ПК-1.2 ПК-1.3 ПК-1.4	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л3.1 Л3.2 Э1 Э2 Э3 Э4	
1.2	История развития кристаллохимии. Способы моделирования кристаллических структур. Базы структурных данных. /Ср/	7	13	ПК-1.1 ПК-1.2 ПК-1.3 ПК-1.4	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л3.1 Л3.2 Э1 Э2 Э3 Э4	
	Раздел 2. Описание симметрии кристаллических структур					
2.1	Операции и элементы симметрии. Взаимодействие операций. Группа операций симметрии, порядок группы, подгруппа. Геометрические образы в системах Шенфлиса и Германа-Могена. Матрицы собственных и несобственных преобразований симметрии в трехмерном пространстве. Категории симметрии. Точечные группы. Трансляционная симметрия. Кристаллическая решетка и ее базисные векторы, параметры элементарной ячейки. Закрытые элементы симметрии. Сингонии, голоэдрические группы и решетки Браве. Примитивные и центрированные решетки. Кристаллографические точечные группы. Графики групп. Открытые кристаллографические элементы симметрии, их обозначения по Герману-Могену. Взаимодействие элементов симметрии. Принцип вывода пространственных групп, их символы по Герману-Могену, связь с кристаллографическим классом. Системы эквивалентных позиций (орбиты) пространственных групп, общие и частные положения, их кратность. Графики и орбиты пространственных групп. Интернациональные таблицы и содержащаяся в них информация о пространственных группах.	7	7	ПК-1.1 ПК-1.2 ПК-1.3 ПК-1.4	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л3.1 Л3.2 Э1 Э2 Э3 Э4	

2.2	<p>Операции и элементы симметрии. Группа операций симметрии, порядок группы, подгруппа. Взаимодействие элементов симметрии, графики групп. Матрицы собственных и несобственных преобразований симметрии в трехмерном пространстве. Точечные группы геометрических фигур и молекул. Стереографические проекции точечных групп Кристаллическая решетка и ее базисные векторы, параметры элементарной ячейки. Закрытые элементы симметрии. Сингонии, голоэдрические группы и решетки Браве Кристаллографические точечные группы. Открытые элементы симметрии. Трансляционная симметрия. Кристаллическая решетка и ее базисные векторы, параметры элементарной ячейки. Принцип вывода пространственных групп, их символы по Герману-Могену, связь с кристаллографическим классом. Системы эквивалентных позиций (орбиты) пространственных групп, общие и частные положения, их кратность. Графики и орбиты пространственных групп. /Пр/</p>	7	10	ПК-1.1 ПК-1.2 ПК-1.3 ПК-1.4	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л3.1 Л3.2 Э1 Э2 Э3 Э4
2.3	<p>Открытые и закрытые элементы симметрии. Взаимодействие элементов между собой. Точная и пространственная группы симметрии, их графики. Сингонии, голоэдрические группы и решетки Браве. Зависимость свойств кристаллов от их структуры. Принципы Кюри и Неймана /Ср/</p>	7	14	ПК-1.1 ПК-1.2 ПК-1.3 ПК-1.4	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л3.1 Л3.2 Э1 Э2 Э3 Э4
Раздел 3. Основы рентгеноструктурного анализа					
3.1	<p>Дифракция рентгеновских лучей. Уравнения Лауэ. Уравнение Брэгга - Вульфа. Межплоскостные расстояния. Интенсивность дифракционного луча. Структурная амплитуда. Формула электронной плотности. Тепловые (температурные) параметры атомов. Уточнение кристаллической структуры. Прецизионный рентгеноструктурный анализ. Электронные параметры атомов. Сравнение дифракционных методов изучения кристаллической структуры (рентгенография, нейтронография, электронография). Рентгенофазовый анализ. Основные этапы истории и перспективы развития рентгеноструктурного анализа. /Лек/</p>	7	6	ПК-1.1 ПК-1.2 ПК-1.3 ПК-1.4	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л3.1 Л3.2 Э1 Э2 Э3 Э4

3.2	Зависимость числа измеримых рефлексов от длины волны. Связь индексов hkl с межплоскостными расстояниями для кристаллов орторомбической, тетрагональной и кубической сингоний. Индицирование дифрактограмм. Относительные интенсивности рефлексов. Систематические погасания рефлексов при наличии центрированных решеток и открытых элементов симметрии. Интегральные интенсивности рефлексов и комплексные структурные амплитуды F_{hkl} . Построение теоретической рентгенограммы. /Пр/	7	8	ПК-1.1 ПК-1.2 ПК-1.3 ПК-1.4	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л3.1 Л3.2 Э1 Э2 Э3 Э4	
3.3	Дифракционные методы изучения кристаллической структуры, их возможности и ограничения. Рентгенофазовый анализ (РФА) и рентгеноструктурный анализ монокристаллов (РСА). Принцип работы рентгеновского дифрактометра. Индицирование	7	12,7	ПК-1.1 ПК-1.2 ПК-1.3 ПК-1.4	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л3.1 Л3.2 Э1 Э2 Э3 Э4	
3.4	/КонР/	7	4,3	ПК-1.1 ПК-1.2 ПК-1.3 ПК-1.4	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л3.1 Л3.2 Э1 Э2 Э3 Э4	
Раздел 4. Общая кристаллохимия						
4.1	Виды химических связей в кристаллах. Характерные особенности кристаллов с металлическими, ионными, ван-дер-ваальсовыми и ковалентными взаимодействиями. Островные, цепочечные, слоистые и каркасные мотивы в кристаллах. Кристаллохимические радиусы. Координационные числа и координационные полиэдры. Основные структурные типы. Описание структур в терминах плотнейших шаровых упаковок (ПШУ) и плотнейших шаровых кладок (ПШК). Кристаллохимические явления: изоструктурность, изоморфизм, полиморфизм. /Лек/	7	8	ПК-1.1 ПК-1.2 ПК-1.3 ПК-1.4	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л3.1 Л3.2 Э1 Э2 Э3 Э4	
4.2	Число формульных единиц в ячейке и рентгеновская плотность. Описание структур в терминах плотнейших шаровых упаковок (ПШУ) и плотнейших шаровых кладок (ПШК). Координационные числа, координационные полиэдры и пустоты в ПШУ и ПШК. Слоистость ПШУ. Основные структурные типы. /Пр/	7	4	ПК-1.1 ПК-1.2 ПК-1.3 ПК-1.4	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л3.1 Л3.2 Э1 Э2 Э3 Э4	

4.3	<p>Виды химических связей в кристаллах. Характерные особенности кристаллов с металлическими, ионными, ван-дер-ваальсовыми и ковалентными взаимодействиями. Островные, цепочечные, слоистые и каркасные мотивы в кристаллах. Кристаллохимические радиусы. Координационные числа и координационные полиэдры. Основные структурные типы. Описание структур в терминах плотнейших шаровых упаковок (ПШУ) и плотнейших шаровых кладок (ПШК). Кристаллохимические явления. /Ср/</p>	7	15	ПК-1.1 ПК-1.2 ПК-1.3 ПК-1.4	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л3.1 Л3.2 Э1 Э2 Э3 Э4	
Раздел 5. Описание и систематика кристаллических структур						
5.1	<p>Структуры простых веществ металлов и неметаллов. Кристаллические структуры бинарных соединений. Принципы построения тройных соединений. Структурный тип перовскита. Структурный тип шпинели. Нормальные и обращенные шпинели. Основные особенности строения силикатов. Классификация структур силикатов. Кристаллические структуры координационных соединений. Общая характеристика молекулярных кристаллов. Гетеромолекулярные кристаллы. Кристаллогидраты. Клатраты. Молекулярные комплексы. Дальний и ближний порядок. Кристаллы и квазикристаллы. Строение жидких кристаллов. /Лек/</p>	7	10	ПК-1.1 ПК-1.2 ПК-1.3 ПК-1.4	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л3.1 Л3.2 Э1 Э2 Э3 Э4	
5.2	<p>Рассмотрение структур простых структур металлов и неметаллов, бинарных и тройных соединений. /Пр/</p>	7	10	ПК-1.1 ПК-1.2 ПК-1.3 ПК-1.4	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л3.1 Л3.2 Э1 Э2 Э3 Э4	
5.3	<p>Структуры простых веществ металлов и неметаллов. Кристаллические структуры бинарных и тройных соединений. Кристаллические структуры координационных соединений, кристаллогидратов, клатратов. Дальний и ближний порядок. Кристаллы и квазикристаллы. Строение жидких кристаллов. /Ср/</p>	7	12	ПК-1.1 ПК-1.2 ПК-1.3 ПК-1.4	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л3.1 Л3.2 Э1 Э2 Э3 Э4	
5.4	/Контр.раб./	7	8	ПК-1.1 ПК-1.2 ПК-1.3 ПК-1.4		Контрольная работа
5.5	/Экзамен/	7	37	ПК-1.1 ПК-1.2 ПК-1.3 ПК-1.4	Л1.1 Л1.2 Л1.3 Л1.4 Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л3.1 Л3.2	Экзамен

5. ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА

5.1. Оценочные материалы для текущего контроля и промежуточной аттестации

Представлены отдельным документом

5.2. Оценочные материалы для диагностического тестирования

Представлены отдельным документом

6. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)**6.1. Рекомендуемая литература****6.1.1. Основная литература**


	Авторы, составители	Заглавие	Издательство, год	Колич-во
Л1.1	Партэ Э.	Некоторые главы структурной неорганической химии	М.: Мир, 1993	10
Л1.2	Егоров-Тисменко Ю. К.	Кристаллография и кристаллохимия: учебник для студентов высших учебных заведений, обучающихся по специальности "Геология"	М.: Книжный дом "Университет", 2005	9
Л1.3	Куприянов М. Ф., Рудская А. Г., Кофанова Н. Б., Кабилов Ю. В., Разумная А. Г.	Современные методы структурного анализа веществ: учебник	Ростов-на-Дону: Издательство Южного федерального университета (ЮФУ), 2009, электронный ресурс	1
Л1.4	Филатов С.К., Кривовичев С.В.	Общая кристаллохимия: Учебник	СПб: Издательство Санкт-Петербургского государственного университета, 2018, электронный ресурс	1

6.1.2. Дополнительная литература

	Авторы, составители	Заглавие	Издательство, год	Колич-во
Л2.1	Чупрунов Е. В.	Кристаллография: лабораторный практикум	М.: Физматлит, 2005	10
Л2.2	Кнотько А. В., Пресняков И. А., Третьяков Ю. Д.	Химия твердого тела: учебное пособие	М.: Academia, 2006	5
Л2.3	Урусов В. С., Ерёмин Н. Н.	Кристаллохимия. Краткий курс: Учебник	Москва: Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, 2010, электронный ресурс	1
Л2.4	Анисович А. Г.	Рентгеноструктурный анализ в практических вопросах материаловедения	Минск: Белорусская наука, 2017, электронный ресурс	1

6.1.3. Методические разработки

	Авторы, составители	Заглавие	Издательство, год	Колич-во
Л3.1	Севастьянова Е. В., Чернов Е. Б.	Кристаллохимия: учебно-методическое пособие	Сургут: Издательский центр СурГУ, 2014	37

ЛЗ.2	Ковалев  Н., Белая Е. А., Виктор В. В.	Физические методы в химии твердого тела: Учебно-методическое пособие	Челябинск: Южно-Уральский государственный гуманитарно-педагогический университет, 2017, электронный ресурс	1
------	--	--	--	---

6.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети "Интернет"

Э1	Учебные материалы по курсу кристаллохимии http://www.chem.msu.su/rus/lab/phys/crychem/lectures/index.html
Э2	International Union of Crystallography https://www.iucr.org/
Э3	Crystallography Open Database http://www.crystallography.net/cod/
Э4	Учебные материалы по кристаллохимии http://crystchem.ru/index.htm

6.3.1 Перечень программного обеспечения

6.3.1.1	Пакет прикладных программ Microsoft Office
---------	--

6.3.2 Перечень информационных справочных систем

6.3.2.1	«Гарант», «Консультант плюс», «Консультант-регион»
---------	--

7. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

7.1	Учебные аудитории для проведения занятий лекционного типа, занятий семинарского типа (практических занятий), групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации оснащены: типовой учебной мебелью, техническими средствами обучения, служащими для представления учебной информации.
-----	---