

УТВЕРЖДАЮ
Проректор по УМР

_____ Е.В. Коновалова

16 июня 2022 г., протокол УС №6

**МОДУЛЬ ОБЩЕПРОФЕССИОНАЛЬНЫХ
ДИСЦИПЛИН
Кристаллохимия**
рабочая программа дисциплины (модуля)

Закреплена за кафедрой **Химии**

Учебный план b040301-Хим-22-3.plx
04.03.01 ХИМИЯ
Направленность (профиль): Химия

Квалификация **Бакалавр**

Форма обучения **очная**

Общая трудоемкость **3 ЗЕТ**

Часов по учебному плану 108

в том числе:

аудиторные занятия 64

самостоятельная работа 44

Виды контроля в семестрах:
зачеты 5

Распределение часов дисциплины по семестрам

Семестр (<Курс>.<Семестр на курсе>)	5 (3.1)		Итого	
	уп	рп	уп	рп
Неделя	17 3/6			
Вид занятий	уп	рп	уп	рп
Лекции	32	32	32	32
Практические	32	32	32	32
Итого ауд.	64	64	64	64
Контактная работа	64	64	64	64
Сам. работа	44	44	44	44
Итого	108	108	108	108

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 - бакалавриат по направлению подготовки 04.03.01 Химия (приказ Минобрнауки России от 17.07.2017 г. № 671)

составлена на основании учебного плана:

04.03.01 ХИМИЯ

Направленность (профиль): Химия

утвержденного учебно-методическим советом вуза от 16.06.2022 протокол № 6.

Рабочая программа одобрена на заседании кафедры

Химии

Зав. кафедрой канд.хим.наук, ст. преп. Крайник Виктория Викторовна

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.О.04
2.1 Требования к предварительной подготовке обучающегося:	
2.1.1	Неорганическая химия
2.1.2	Информатика
2.1.3	Молекулярная физика и термодинамика
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)	
ОПК-3.1: Применяет расчетно-теоретические модели для изучения свойств веществ и процессов с их участием	
ОПК-1.2: Анализирует результаты химических экспериментов, наблюдений, измерений, а также результаты расчетов свойств веществ и материалов	
ОПК-1.1: Использует теоретические основы традиционных и новых разделов химии	
ОПК-1.3: Формулирует заключения и выводы по результатам анализа литературных данных, собственных экспериментальных и расчетно-теоретических работ химической направленности	

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.	5	1	ОПК-1.1	Л1.2 Л1.4Л2.3Л3.1	


	Предмет и задачи кристаллохимии. Кристаллическая структура и способы ее моделирования. Базы структурных данных. /Лек/				Э1 Э2 Э3 Э4	
1.2	История развития кристаллохимии. Способы моделирования кристаллических структур. Базы структурных данных. /Ср/	5	5	ОПК-1.1	Л1.2 Л1.4Л2.1 Л2.3 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. Прimitивные 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. /Лек/	5	7	ОПК-3.1 ОПК-1.1	Л1.2 Л1.4Л2.1 Л2.3Л3.1 Э1 Э2 Э3 Э4	
2.2	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	5	10	ОПК-3.1 ОПК-1.1 ОПК-1.2	Л1.2 Л1.4Л2.1 Л2.3Л3.1 Э1 Э2 Э3 Э4	


	Герману-Могену, связь с кристаллографическим классом. Системы эквивалентных позиций (орбиты) пространственных групп, общие и частные положения, их кратность. Графики и орбиты пространственных групп. /Пр/					
2.3	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/	5	10	ОПК-3.1 ОПК-1.1 ОПК-1.2	Л1.2 Л1.4Л2.1 Л2.3Л3.1 Э1 Э2 Э3 Э4	
	Раздел 3. Основы рентгеноструктурного анализа					
3.1	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/	5	6	ОПК-3.1 ОПК-1.1	Л1.2 Л1.3Л2.1 Л2.2 Л2.4Л3.2 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 Fhkl. Построение теоретической рентгенограммы. /Пр/	5	8	ОПК-3.1 ОПК-1.1 ОПК-1.2 ОПК-1.3	Л1.2 Л1.3Л2.1 Л2.4Л3.2 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 рентгенограмм. /Ср/	5	8	ОПК-3.1 ОПК-1.1 ОПК-1.2 ОПК-1.3	Л1.2 Л1.3Л2.1 Л2.2 Л2.4Л3.2 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	5	8	ОПК-3.1 ОПК-1.1	Л1.2 Л1.4Л2.2 Л2.3Л3.1 Э1 Э2 Э3 Э4	

	координационные полиэдры. Основные структурные типы. Описание структур в терминах плотнейших шаровых упаковок (ПШУ) и плотнейших шаровых кладок (ПШК). Кристаллохимические явления: изоструктурность, изоморфизм, полиморфизм. /Лек/					
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. Слойность ПШУ. Основные структурные типы. /Пр/	5	4	ОПК-3.1 ОПК-1.1 ОПК-1.2 ОПК-1.3	Л1.2 Л1.4Л2.3Л3.1 Э1 Э2 Э3 Э4	
4.3	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/	5	6	ОПК-3.1 ОПК-1.1 ОПК-1.2 ОПК-1.3	Л1.2 Л1.4Л2.2 Л2.3Л3.1 Э1 Э2 Э3 Э4	
	Раздел 5. Описание и систематика кристаллических структур					
5.1	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/	5	10	ОПК-3.1 ОПК-1.1	Л1.1 Л1.2Л2.3Л3.1 Э1 Э2 Э3 Э4	
5.2	Рассмотрение структур простых структур металлов и неметаллов, бинарных и тройных соединений. /Пр/	5	10	ОПК-3.1 ОПК-1.1 ОПК-1.3	Л1.1 Л1.2Л2.3Л3.1 Э1 Э2 Э3 Э4	
5.3	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.	5	6	ОПК-3.1 ОПК-1.1 ОПК-1.3	Л1.1 Л1.2Л2.3Л3.1 Э1 Э2 Э3 Э4	

	/Ср/					
5.4	/Зачёт/	5	9	ОПК-3.1 ОПК-1.1 ОПК-1.2 ОПК-1.3		Зачет
5.5	/Контр.раб./	5	0	ОПК-3.1 ОПК-1.1 ОПК-1.2 ОПК-1.3	Л1.4 Л1.3Л2.3 Л2.2 Л2.1Л3.1 Э1 Э2 Э3 Э4	Контрольная работа

5. ФОНД ОЦЕНОЧНЫХ СРЕДСТВ						
5.1. Контрольные вопросы и задания						
представлено отдельным документом						
5.2. Темы письменных работ						
представлено отдельным документом						
5.3. Фонд оценочных средств						
представлено 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:  здательство 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.,	Кристаллохимия: учебно-методическое пособие	Сургут:	37

	Чернов Е. Б.		Издательский центр СурГУ, 2014	
ЛЗ.2	Ковалев  Н., Белая Е. А., Викторов 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/cryschem/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://cristchem.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.
-----	---