

МИНОБРНАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

Аннотированная рабочая программа дисциплины

Кристаллохимия

Направление подготовки
04.03.01 – Химия

Квалификация выпускника
Бакалавр

Форма обучения
Очная

Томск – 2015

1. Код и наименование дисциплины

Б1.В.ОД.5 Кристаллохимия.

2. Цель изучения дисциплины – формирование представлений об основах теории симметрии кристаллов и элементах теории рентгеновской дифракции, об основных понятиях и категориях теоретической кристаллохимии, знакомство с базовыми структурным типам неорганических соединений.

3. Год/годы и семестр/семестры обучения

3 год, 5 семестр.

4. Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 зачетные единицы, 144 часа, из которых 82 часов составляет контактная работа обучающегося с преподавателем (34 часа – занятия лекционного типа, 26 часов – занятия семинарского и практического типа, 4 часа – коллоквиум, 4 часа – защита индивидуального задания, 14 часов – консультации), 62 часа составляет самостоятельная работа обучающегося.

5. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы

Формируемые компетенции (код компетенции, уровень (этап) освоения)	Планируемые результаты обучения по дисциплине
(ОПК-1)-I способностью использовать полученные знания теоретических основ фундаментальных разделов химии при решении профессиональных задач	В1 (ОПК-1)-I <i>владеть:</i> навыками работы с учебной литературой по основным разделам кристаллохимии У1 (ОПК-1)-I <i>уметь:</i> выполнять стандартные действия (определять элементы симметрии молекул, многогранников и кристаллических структур, строить кристаллографическую проекцию, описывать кристаллические структуры с точки зрения теоретической кристаллохимии, определять связь строения с физическими свойствами веществ и т.п.) с учетом основных понятий и общих закономерностей, формулируемых в рамках дисциплины кристаллохимия. У2 (ОПК-1)-I <i>уметь:</i> решать типовые учебные задачи по кристаллохимии. З1 (ОПК-1)-I <i>знать:</i> основы описания кристаллических структур и основы теоретической кристаллохимии.

6. Содержание дисциплины и структура учебных видов деятельности

6.1. Структура учебных видов деятельности

Наименование разделов и тем	Всего (час.)	Контактная работа (час.)				Самостоятельная работа (час.)
		Лекции	Семинары	Консультации	Коллоквиумы, защита ИЗ	
Предмет, задачи и основные понятия кристаллохимии.	6	2	2	-	-	2
Группы симметрии и структурные классы	52	8	18	6	4	16
Основы рентгеноструктурного анализа	8	2	-	2	-	4
Основные понятия кристаллохимии	24	6	4	2	-	12
Основные категории теоретической кристаллохимии	24	8	2	2	-	12
Важнейшие структурные типы	20	2	-	2	4	12
Прикладные аспекты кристаллохимии	10	6	-	-	-	4
Итого:	144	34	26	14	8	62

6.2. Содержание дисциплины

1. Предмет, задачи и основные понятия кристаллохимии

Предмет и задачи кристаллохимии. Кристаллохимия как часть химии и как метод исследования химических веществ. Кристаллическое вещество и его основные свойства (однородность, анизотропия, способность к самоограничению, симметрия). Основные законы кристаллографии: законы Стенона и Гаюи.

2. Группы симметрии и структурные классы

Понятия о симметрии. Закрытые операции и элементы симметрии. Взаимодействие элементов симметрии. 32 вида симметрии. Понятие точечной группы, их классификация, изображение на стереографической проекции. Кристаллографические координатные системы. Международные обозначения классов симметрии (символика Германа-Могена) и символы Шенфлиса. Простые формы кристаллов.

Трансляционная симметрия и кристаллическая решетка, параметры элементарной ячейки. Кристаллографические категории и сингонии. Типы решеток (типы Бравэ). Индексы кристаллографических направлений и кристаллографических плоскостей в решетке. Открытые элементы симметрии. Винтовые оси, плоскости скользящего отражения, их обозначения по Герману-Могену и их действие. Взаимодействие закрытых и открытых операций симметрии кристалла между собой и с трансляциями решетки. Пространственные (федоровские) группы симметрии, их классификация и обозначение. Симморфные и несимморфные группы. Общие и частные правильные системы точек. Интернациональные таблицы и содержащаяся в них информация о пространственных группах.

3. Основы рентгеноструктурного анализа

Дифракция рентгеновских лучей на кристалле, принцип работы и спектр рентгеновской трубки. Тормозное излучение и характеристические линии. Уравнение Брегга-Вульфа.

Межплоскостные расстояния и индексы рефлексов. Связь индексов Миллера с межплоскостными расстояниями, расчет параметров элементарной ячейки. Порошковые дифрактограммы в рентгенофазовом анализе, относительные интенсивности рефлексов. Банк порошковых данных ICDD и содержащаяся в нем информация.

4. Основные понятия кристаллохимии

Типы химической связи в кристаллах. Ионная модель кристалла и энергия решетки. Уравнение Борна-Ланде и Борна-Майера. Цикл Борна-Габера. Ковалентные кристаллы. Правило Юм-Розери. Молекулярные кристаллы. Металлические кристаллы.

Описание структур в терминах плотнейших шаровых упаковок (ПШУ). Координационные числа и пустоты в ПШУ. Слои ПШУ. Координационный полиэдр и координационное число.

Кристаллохимические радиусы атомов. Металлические, ковалентные, ионные радиусы, Ван-дер-ваальсовы радиусы. Систематика кристаллических структур по типу связи. Гомо- и гетеродесмичные структуры. Характер кристаллической структуры. Координационные, островные, цепочечные, слоистые, каркасные структуры.

5. Основные категории теоретической кристаллохимии

Морфотропия. Критерии устойчивости структурного типа. Правила Магнуса-Гольдшмидта, Полинга (ионные кристаллы). Правила Юма-Розери, Грима-Зоммерфельда, Пирсона (ковалентные кристаллы). Структурная гомология. Фазы вычитания и внедрения. Псевдосимметрия. Производные и вырожденные структуры.

Полиморфизм и политипизм. Классификация полиморфизма. Фазовые переходы. Механизм полиморфных превращений.

Изоморфизм. Типы изоморфизма. Правила изоморфизма. Твердые растворы замещения, внедрения и вычитания.

Дефекты в кристаллах. Классификация дефектов. Точечные дефекты. Вакансии и межузельные атомы. Дефекты Шоттки и Френкеля. Понятие дислокации. Геометрические свойства дислокаций.

6. Важнейшие структурные типы неорганических веществ

Простые вещества. Кристаллические структуры простых веществ – неметаллов. Изменение характера структуры в группах Периодической системы, сравнение структур, относящихся к разным группам (правило октета).

Общая характеристика кристаллических структур бинарных соединений. Кристаллические структуры интерметаллических соединений. Кристаллические структуры бинарных соединений АХ, описываемые в терминах ПШУ (анионные упаковки и кладки). Общая характеристика кристаллических структур бинарных соединений АХ и ХУ. Примеры структур различного характера.

Структуры солей кислородсодержащих кислот и сложных оксидов. Структурный тип перовскита. Перовскитоподобные структуры. Структурный тип шпинели. Нормальная и обращенная шпинель. Ферриты и их свойства. Кристаллические структуры силикатов. Их классификация. Алюмосиликаты и силикаты алюминия. Зависимость физических свойств силикатов от их структуры. Цеолиты.

7. Прикладные аспекты кристаллохимии

Механические (твердость, спайность, двойникование), оптические (двулучепреломление, оптическая активность, показатель преломления), электрические (пьезо-, пиро- и сегнето-эффекты) и магнитные свойства кристаллов. Зависимость физических свойств кристаллов от их строения. Современные источники кристаллохимической информации. Проблемы современной кристаллохимии.

6.3. Форма промежуточной аттестации: экзамен.

7. Ресурсное обеспечение

7.1. Перечень основной и дополнительной учебной литературы

а) основная литература:

1. Егоров-Тисменко Ю. К. Кристаллография и кристаллохимия / Ю. К. Егоров-Тисменко; под ред. В. С. Урусова – М.: КДУ, 2010. – 588 с.
2. Пугачев В. М. Кристаллохимия / В. М. Пугачев – Кемерово: КемГУ, 2013. – 104 с.
3. Мишенина Л. Н., Селюнина Л. А. Кристаллохимия (учебно-методическое пособие по курсу «Кристаллохимия») / Л. Н. Мишенина, Л. А. Селюнина – Томск: Изд-во ТГУ, 2016. – 48 с. <http://vital.lib.tsu.ru/vital/access/manager/Repository/vtls:000244309>.

б) дополнительная литература:

1. Урусов В. С. Кристаллохимия. Краткий курс. / В. С. Урусов, Н. Н. Ерёмин – М.: Изд-во МГУ, 2010. – 256 с.
2. Бокий Г. Б. Кристаллохимия / Г. Б. Бокий – М.: Наука, 1971. – 400 с. <http://sun.tsu.ru/limit/2016/000049950/000049950.djvu>
3. Зоркий П. М. Симметрия молекул и кристаллических структур / П. М. Зоркий – М.: Изд-во МГУ, 1986. – 232 с. <http://sun.tsu.ru/limit/2016/000134029/000134029.pdf>
4. Кребс Г. Основы кристаллохимии неорганических соединений / Г. Кребс – М.: Мир, 1971. – 304 с.
5. Вест А. Химия твердого тела. Теория и приложения / А. Вест; под ред. Ю. Д. Третьякова – М.: Мир, 1988. – Ч. 1. – 336 с., Ч. 2. – 558 с. <http://sun.tsu.ru/limit/2016/000079663/000079663.djvu>

7.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети

Интернет

1. Учебные материалы по курсу кристаллохимия – М.: МГУ. <http://www.chem.msu.ru/rus/lab/phys/crychem/lectures/index.html>
2. Электронная библиотека (репозиторий) ТГУ [Электронный ресурс]. – Электрон. дан. – Томск, 2011 – URL: <http://vital.lib.tsu.ru/vital/access/manager/Index>
3. Электронная библиотека учебных материалов по химии – М.: МГУ <http://www.chem.msu.ru/rus/elibrary/>

8. Преподаватель

Автор, канд. хим. наук, доцент Л. Н. Мишенина