

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

ХИМИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

Аннотированная рабочая программа дисциплины
Кристаллохимические аспекты неорганической химии

Направление подготовки
04.04.01 Химия

Магистерская программа
Фундаментальная и прикладная химия веществ и материалов

Квалификация (степень) выпускника
магистр

Форма обучения
очная

Томск – 2016

1. Код и наименование дисциплины

Б1.В.ДВ.2.1 Кристаллохимические аспекты неорганической химии.

2. Цель изучения дисциплины освоение общих принципов описания кристаллических структур неорганических веществ, с установлением взаимосвязи строения кристалла и физико-химических свойств материалов.

3. Год и семестр обучения

2 год, 1 семестр.

4. Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетные единицы, 108 часов, из которых 36 часов составляет контактная работа обучающегося с преподавателем (18 часов – занятия лекционного типа, 14 часов – занятия семинарского и практического типа, 2 часа – коллоквиум, 2 часа – защита индивидуального задания), 72 часа составляет самостоятельная работа обучающегося, в том числе 36 часов – подготовка к экзамену.

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
(ПК-2) – II Владение теорией и навыками практической работы в избранной области химии	З (ПК-2)-II Знает основные положения теории групп, матричный метод описания операций симметрии, точечные операции симметрии кристаллического пространства. З (ПК-2)-II Знает основные законы и закономерности строения простых и сложных кристаллических веществ, способы аналитического и графического описания кристаллической структуры. У (ПК-2)-II Умеет описывать кристаллические структуры, используя основные способы построения моделей кристаллов
(СПК-2) – II Способность использовать в исследованиях и расчётах приобретённые знания о физических и химических процессах получения неорганических веществ и материалов, их анализе, прогнозировании свойств	У (СПК-2)-II Умеет интерпретировать основную информацию о строении кристаллических веществ для прогнозирования их свойств В (СПК-2)-II Владеет приемами построения графиков точечных и простейших пространственных групп, методами определения орбит группы, и применения их при решении практических химических задач В (СПК-2)-III Владеет способностью использовать знания о строении кристаллических неорганических веществ в анализе, формулировке и решении конкретных струк- турно-химических задач

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	
Геометрия кристаллического пространства	8	2	2	-	-	4
Точечная симметрия твердых тел и пространственная симметрия кристаллических структур	22	4	4	4	2	8
Структуры простых веществ. Структурные типы бинарных и тройных соединений	34	10	6	4	2	12
Структура реальных кристаллов	8	2	2	2	-	2
Подготовка к экзамену	36					
Итого:	108	18	14	10	4	26

6.2. Содержание дисциплины

1. Геометрия кристаллического пространства

Понятие кристаллического пространства и его свойства. Описание геометрии кристаллической решетки. Индексы узлов решетки, узловых рядов и узловых плоскостей. Основные теоремы решетчатой кристаллографии. Понятие обратной решетки. Условие узлового ряда и узловой плоскости. Закон зон. Кристаллографические проекции.

2. Точечная симметрия твердых тел и пространственная симметрия кристаллических структур

Основные положения теории групп. Матричный метод описания операций симметрии. Точечные операции симметрии кристаллического пространства. Кристаллографические точечные группы симметрии. Влияние точечной симметрии кристалла на геометрию кристаллической решетки.

Решетки Бравэ. Операторный метод описания операций симметрии кристаллического пространства. Орбиты пространственных групп.

3. Структуры простых веществ. Структурные типы бинарных и тройных соединений

Структурные единицы кристалла. Мотив структуры. Полиэдрическое изображение кристаллических структур (метод Полинга-Белова). Параллелоэдры Федорова. Области Дирихле-Вороного. Структурный тип. Изоструктурность, антиизоструктурность, изотипность, гомеотипность. Структурный класс.

Принципы строения неметаллов: ковалентные и ван-дер-ваальсовы взаимодействия. Аллотропия, полиморфизм и изоморфизм, политипы в неметаллах. Структуры алмаза, лонсдейлита, α - и β -графита, Si, Ge, α - и β -Sn, I₂, кристаллических инертных газов. Мотивы из атомов и расположение молекул в кристаллах фуллерена C₆₀, α -N₂, белого и черного фосфора, желтого и серого As, ромбической и моноклинной серы S₈, красного и серого селена. Принципы строения нанотрубок углерода, красного фосфора, пластической и волокнистой серы. Относительные значения длин связей и невалентных контактов в простых веществах неметаллов.

Бинарные соединения, построенные по принципу плотной упаковки анионов с катионами в пустотах. Ионные кристаллохимические радиусы. Структурные типы

соединений типа AX, A₂X и AX₂. Структурные типы CsCl, NaCl, ZnS (сфалерит, вюрцит), NiAs, флюорит и антифлюорит, рутил, двухслойный и четырехслойный политипы CdI₂, CdCl₂ и Cs₂O. «Корундовый» мотив из катионов и упаковка анионов в α-Al₂O₃ и FeCl₃. Корреляции свойств бинарных соединений со структурой и соотношением радиусов ионов. Изоморфное замещение катионов в кристаллах.

Некоторые структурные типы соединений A_mB_nC_k. Принципы построения тройных соединений: халькопирита CuFeS₂, ильменита FeTiO₃, перовскитов ABO₃, нормальных и обращенных («инвертированных») шпинелей AB₂O₄.

Кристаллические структуры комплексных и металлоорганических соединений. Псевдосимметрия кристаллических структур. Квазикристаллы.

4. Структура реальных кристаллов

Моно- и поликристаллы. Зональное и секториальное строение кристаллов. Кристаллы двойники. Жидкие кристаллы.

6.3. Форма промежуточной аттестации: экзамен.

7. Ресурсное обеспечение

7.1. Перечень основной и дополнительной учебной литературы

а) основная литература:

1. Мюллер У. Структурная неорганическая химия / У. Мюллер; под ред. А. М. Ховина – Долгопрудный: Издательский Дом «Интеллект», 2010. – 352 с.

2. Егоров-Тисменко Ю. К. Кристаллография и кристаллохимия / Ю. К. Егоров-Тисменко; под ред. В. С. Урусова – М.: КДУ, 2010. – 588 с.

б) дополнительная литература:

1. Третьяков Ю. Д. Введение в химию твердофазных материалов / Ю.Д. Третьяков, В.И. Путляев. – М.: Изд-во Моск. ун-та: Наука, 2006. – 400 с.

2. Вест А. Химия твердого тела. Теория и приложения / А. Вест; под ред. Ю. Д. Третьякова – М.: Мир, 1988. – Ч. 1. – 336 с.

3. Вест А. Химия твердого тела. Теория и приложения / А. Вест; под ред. Ю. Д. Третьякова – М.: Мир, 1988. – Ч. 2. – 558 с.

<http://sun.tsu.ru/limit/2016/000079663/000079663.djvu>

4. Уэллс А. Структурная неорганическая химия / А. Уэллс; под ред. М. А. Порай-Кашица – М.: Мир, 1987. – Т. 1. – 408 с., Т. 2. – 696 с., Т. 3. – 564 с.

<http://sun.tsu.ru/limit/2016/000134175/000134175.djvu>;

<http://sun.tsu.ru/limit/2016/000143146/000143146.djvu>

5. Харгиттаи И. Симметрия глазами химика / И. Харгиттаи, М. Харгиттаи – М.: Мир, 1989. – 496 с.

7.2. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети Интернет

1. Научная библиотека Томского государственного университета [Электронный ресурс] / НИ ТГУ, Научная библиотека ТГУ. – Электрон. дан. – Томск, 1997-. – URL: <http://www.lib.tsu.ru/ru>

2. Электронная библиотека учебных материалов по химии – М.: МГУ <http://www.chem.msu.ru/rus/elibrary/>

3. Электронная библиотека (репозиторий) ТГУ [Электронный ресурс]. – Электрон. дан. – Томск, 2011. URL: <http://vital.lib.tsu.ru/vital/access/manager/Index>

8. Автор: Мишенина Людмила Николаевна, канд. хим. наук, доцент кафедры неорганической химии ХФ ТГУ.