

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ (НИ ТГУ)

Химический факультет

УТВЕРЖДАЮ:

И.о. декана химического факультета
 А.С. Князев

« 08 »  20 22 г.

Рабочая программа дисциплины

Кристаллохимия

по направлению подготовки

04.03.01 Химия

Направленность (профиль) подготовки:

«Химия»

Форма обучения

Очная

Квалификация

Бакалавр

Год приема

2021


Код дисциплины в учебном плане: Б1.В.11

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель ОП

 В.В. Шелковников

Председатель УМК

 В.В. Хасанов

Томск – 2022

1. Цель и планируемые результаты освоения дисциплины

Целью освоения дисциплины является формирование следующих компетенций:

– ОПК-1. Способен анализировать и интерпретировать результаты химических экспериментов, наблюдений и измерений.

– ОПК-3. Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники.

Результатами освоения дисциплины являются следующие индикаторы достижения компетенций:

ИОПК-1.1. Систематизирует и анализирует результаты химических экспериментов, наблюдений, измерений, а также результаты расчетов свойств веществ и материалов.

ИОПК-1.3. Формулирует заключения и выводы по результатам анализа литературных данных, собственных экспериментальных и расчетно-теоретических работ химической направленности.

ИОПК-3.1. Применяет теоретические и полуэмпирические модели при решении задач химической направленности.

2. Задачи освоения дисциплины

Освоение общих принципов описания кристаллических структур, теории важнейших кристаллохимических явлений и обобщенной кристаллохимии, рассматривающей многообразие конденсированных фаз с различной структурой, изучение физико-химических методов исследования кристаллов, в том числе:

– освоение симметричного аппарата описания молекул, кристаллов и кристаллических структур;

– изучение вопросов, связанных с экспериментальным определением кристаллических структур;

– рассмотрение химической связи в кристаллах;

– знакомство с основными категориями теоретической кристаллохимии и соотношением между ними;

– изучение структурных особенностей различных классов химических соединений и их взаимосвязи с физико-химическими свойствами кристаллов;

– рассмотрение современных методов кристаллохимического прогнозирования.

3. Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы

Дисциплина относится к части образовательной программы, формируемой участниками образовательных отношений, является обязательной для изучения.

4. Семестр(ы) освоения и форма(ы) промежуточной аттестации по дисциплине

Семестр 5, экзамен.

5. Входные требования для освоения дисциплины

Для успешного освоения дисциплины требуются результаты обучения по следующим дисциплинам: неорганическая химия, физическая химия, линейная алгебра и аналитическая геометрия, физика.

6. Язык реализации

Русский

7. Объем дисциплины (модуля)

Общая трудоемкость дисциплины составляет 4 з.е., 144 часа, из которых:

– лекции: 32 ч.;

– практические занятия: 32 ч.;

в том числе практическая подготовка: 16 ч.

Объем самостоятельной работы студента определен учебным планом.

8. Содержание дисциплины, структурированное по темам

Тема 1. Предмет, задачи и основные понятия кристаллохимии

Предмет и задачи кристаллохимии. Кристаллохимия как часть химии и как метод исследования химических веществ. Кристаллическая структура и способы её моделирования (дискретные и континуальные модели, статические и динамические модели). Кристаллическое вещество. Основные свойства кристалла. Основные законы кристаллографии. Пространственная (трансляционная) решетка кристалла и её элементарная ячейка.

Тема 2. Группы симметрии и структурные классы

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

Открытые элементы симметрии. Винтовые оси, плоскости скользящего отражения. Взаимодействие закрытых и открытых операций симметрии кристалла между собой и с трансляциями решетки. Типы решеток (типы Бравэ). Структуры Бравэ. Пространственные (федоровские) группы симметрии, их классификация и обозначение. Общие и частные правильные системы точек.

Тема 3. Общая кристаллохимия

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.

Гомо- и гетеродесмичные структуры. Характер кристаллической структуры. Координационные, островные, цепочечные, слоистые, каркасные структуры.

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

Кристаллохимические радиусы атомов. Металлические и ионные радиусы. Коэффициент плотности упаковки металлических и ионных кристаллов. Общая характеристика молекулярных кристаллов. Ковалентные и Ван-дер-ваальсовы радиусы.

Тема 4. Основные категории теоретической кристаллохимии

Морфотропия. Критерии устойчивости структурного типа. Правила Магнуса-Гольдшмидта, Полинга (ионные кристаллы). Правила Юма-Розери, Грима-Зоммерфельфа, 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.

Тема 5. Важнейшие структурные типы

Простые вещества. Кристаллические структуры простых веществ – неметаллов. Типичные структуры металлов. 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 AX, описываемые в терминах ПШУ (анионные упаковки и кладки). Общая характеристика кристаллических структур бинарных соединений AX и XY. Примеры структур различного характера. Кластеры.

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.

Тема 6. Прикладные аспекты кристаллохимии

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

Современные источники кристаллохимической информации. Базы структурных и рентгенографических данных. Возможности структурного анализа. Проблемы современной кристаллохимии.

9. Текущий контроль по дисциплине

Текущий контроль по дисциплине проводится путем контроля посещаемости, оценивания тестов по лекционному материалу, ответов и заданий на семинарских занятиях, проведения двух устных коллоквиумов, включающих теоретические вопросы и практические задания, защиты индивидуального задания в форме представления презентации и фиксируется в форме контрольной точки не менее одного раза в семестр.

В курсе используется балльно-рейтинговая система оценки знаний.

№	Виды контроля	Максимальное количество баллов
1	Работа на семинарах	60
2	Выполнение заданий семинара	35
3	Выполнение тестовых заданий по лекционному материалу	38
4	Коллоквиум 1 «Закрытые элементы симметрии. Симметрия молекул и многогранников»	45
5	Коллоквиум 2 «Открытые элементы симметрии. Симметрия кристаллических структур»	45
6	Индивидуальное задание по описанию кристаллической структуры	30
7	Рейтинг текущего контроля	253

Для допуска к экзамену необходимо получить оценку текущего контроля знаний и набрать 127 баллов (50% баллов от рейтинга текущего контроля)

10. Порядок проведения и критерии оценивания промежуточной аттестации

Экзамен в пятом семестре проводится в устной форме по билетам. Экзаменационный билет состоит из двух частей. Продолжительность экзамена 1,5 часа, из них 1 час на подготовку ответа, 30 минут на устный ответ.

Первая часть содержит два вопроса, проверяющие ИОПК-1.1 и ИОПК-1.3. Ответ на вопрос первой части даётся в развёрнутой форме. Содержание вопросов соответствует содержанию дисциплины (п.8).

Вторая часть содержит задание, проверяющее ИОПК-3.1, и оформленное в виде практического задания.

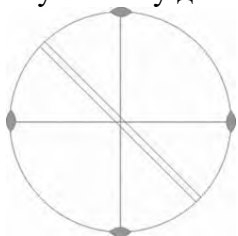
Примеры экзаменационных билетов

Экзаменационный билет №1

1. Понятие о симметрии. Симметричная фигура, симметричное преобразование. Чем различаются операции симметрии первого и второго рода? Перечислите их. Почему в кристаллах встречаются поворотные оси строго определенных порядков?

2. Критерии устойчивости структурного типа. Правила Полинга. Возможно ли применение правил Полинга (если, да, то каких), для структур с существенной долей ковалентности связи.

3. Выведите полный набор элементов симметрии, нанесите их на проекцию, определите категорию и сингонию, запишите обозначение класса симметрии по Шенфлису и Герману-Могену для точечной группы:

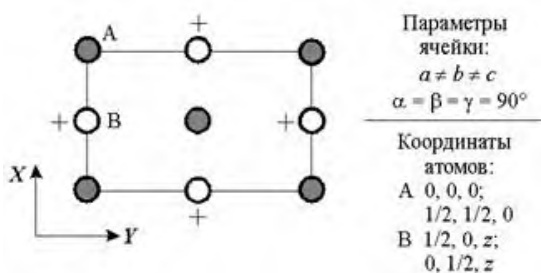


Экзаменационный билет №2

1. Точечные группы геометрических фигур и молекул. Симметрия правильных многогранников. Порядок записи элементов симметрии в символике Бравэ. Как определить наличие в плоской и объемной фигуре центра симметрии?

2. Изоморфизм. Типы изоморфизма. Опишите возможные схемы гетеровалентных замещений без изменения общего числа атомов в элементарной ячейке.

3. Запишите пространственную группу кристаллической структуры в символике Германа-Могена, определите категорию и сингонию, используя проекцию, изобразите элементы симметрии на фоне расположения атомов:



Критерии оценивания

Максимальный балл за экзамен – 140, 1 и 2 вопрос оценивается в 50 баллов, 3 вопрос – 40 баллов. Общий балл за экзамен выставляется суммированием баллов, полученных на ответы на 1, 2 и 3 вопросы.

Критерии оценивания 1 и 2 вопросов:

50-42. Полный безошибочный ответ с правильным применением понятий и определений, с грамотным использованием необходимых терминов и понятий.

41-33. Правильный и достаточно полный, не содержащий существенных ошибок ответ. Оценка может быть снижена за отдельные несущественные ошибки.

32-24. Недостаточно полный объем ответа, наличие ошибок и некоторых пробелов в знаниях.

24-16. Неполный объем ответов, наличие ошибок и пробелов в знаниях.

15-0. Отсутствие необходимых знаний, отрывочный, поверхностный ответ.

Итоговая оценка определяется как суммирование баллов за ответы на 3 экзаменационных вопроса.

Критерии оценивания 3 вопроса:

40-34. Верно определён и записан в указанной символике полный набор элементов симметрии, все элементы обозначены, определена категория и сингония.

33-27. Неверно определён один из указанных пунктов.

26-20. Неверно определён или отсутствует один из указанных пунктов.

19-13. Неверно определены или отсутствуют два из указанных пунктов.

12-0. Неверно определены или отсутствуют три из указанных пунктов.

Результаты дисциплины определяются оценками «отлично», «хорошо», «удовлетворительно», «неудовлетворительно». Итоговая оценка учитывает результаты экзамена и рейтинга семестра: суммарный рейтинг курса – 393 балла.

Соответствие баллов экзаменационной оценке:

393 – 314 баллов – «отлично» (80%)

313 – 255 баллов – «хорошо» (65%)

254 – 197 баллов – «удовлетворительно» (50%)

11. Учебно-методическое обеспечение

а) Электронный учебный курс по дисциплине в электронном университете «Moodle» - <https://moodle.tsu.ru/course/view.php?id=26193>

б) Мишенина Л.Н., Селюнина Л.А. Кристаллохимия. УМП для студентов химического факультета. – Томск.: Издательский Дом ТГУ, 2016. – 48 с.

12. Перечень учебной литературы и ресурсов сети Интернет

а) основная литература:

– Егоров-Тисменко Ю. К. Кристаллография и кристаллохимия / Ю. К. Егоров-Тисменко ; Московский гос. ун-т им. М. В. Ломоносова, Геологический фак. – 2-е изд. – Москва : КДУ, 2010. – 587 с.

– Еремин Н. Н., Еремина Т. А. Неорганическая кристаллохимия. Книга 1. Фундаментальные основы и понятия. Москва : КДУ, Университетская книга, 2018. – 394 с.

– Мюллер У. Структурная неорганическая химия. Долгопрудный : Издательский Дом «Интеллект», 2010. – 352 с.

– Урусов В. С., Ерёмин Н. Н. Кристаллохимия. Краткий курс. М. : МГУ, 2010. – 256 с.

б) дополнительная литература:

– Бокий Г. Б. Кристаллохимия. – М. : Наука, 1971. – 400 с.

– Урусов В. С. Теоретическая кристаллохимия. – М. : Издательство МГУ, 1987. – 272 с.

в) ресурсы сети Интернет:

– Crystallographic and Crystallochemical Database for Minerals and their Structural Analogues [http:// database.iem.ac.ru/mincryst/](http://database.iem.ac.ru/mincryst/)

– Минералогическая база данных <http://web.wt.net/~daba/Mineral/index.htm>

13. Перечень информационных технологий

а) лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение:

- Microsoft Office Standart 2013 Russian: пакет программ. Включает приложения: MS Office Word, MS Office Excel, MS Office PowerPoint, MS Office OneNote, MS Office Publisher, MS Outlook, MS Office Web Apps (Word Excel MS PowerPoint Outlook);
- публично доступные облачные технологии (Google Docs, Яндекс диск и т.п.).

б) информационные справочные системы:

- Электронный каталог Научной библиотеки ТГУ – <http://chamo.lib.tsu.ru/search/query?locale=ru&theme=system>
- Электронная библиотека (репозиторий) ТГУ – <http://vital.lib.tsu.ru/vital/access/manager/Index>
- ЭБС Лань – <http://e.lanbook.com/>
- ЭБС Консультант студента – <http://www.studentlibrary.ru/>
- Образовательная платформа Юрайт – <https://urait.ru/>
- ЭБС ZNANIUM.com – <https://znanium.com/>
- ЭБС IPRbooks – <http://www.iprbookshop.ru/>

14. Материально-техническое обеспечение

Аудитории для проведения занятий лекционного типа.

Аудитории для проведения занятий семинарского типа, индивидуальных и групповых консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации.

Помещения для самостоятельной работы, оснащенные компьютерной техникой и доступом к сети Интернет, в электронную информационно-образовательную среду и к информационным справочным системам.

15. Информация о разработчиках

Мишенина Людмила Николаевна, канд. хим. наук, доцент, кафедра неорганической химии Национального исследовательского Томского государственного университета, доцент.