



**МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ**
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«ИРКУТСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
ФГБОУ ВО «ИГУ»
Кафедра общей и неорганической химии



УТВЕРЖДАЮ
Декан химического факультета, доц.
А.И. Вильмс
«13» мая 2024 г.

Рабочая программа дисциплины Б1.В.06

Наименование дисциплины **КРИСТАЛЛОХИМИЯ**

Направление подготовки **04.03.01 - Химия**

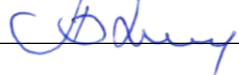
Направленность подготовки: **Химия**

Квалификация выпускника – **БАКАЛАВР**

Форма обучения **очная**


Согласовано с УМК химического
факультета

Протокол № 4 от «13» мая 2024 г.

Председатель  _____
Вильмс А.И.

Рекомендовано кафедрой общей и
неорганической химии:

Протокол № 5 от «24» апреля 2024 г.

Зав. кафедрой  _____
Сафронов А.Ю.

Иркутск 2024 г.

Содержание

	стр.
1. Цели и задачи дисциплины	3
2. Место дисциплины в структуре ОПОП.	3
3. Требования к результатам освоения дисциплины	4
4. Содержание и структура дисциплины	5
4.1 Содержание дисциплины, структурированное по темам	5
4.2 План внеаудиторной самостоятельной работы обучающихся по дисциплине	10
4.3 Содержание учебного материала	14
4.3.1. Перечень семинарских, практических занятий.	16
4.3.2. Перечень тем (вопросов), выносимых на самостоятельное изучение студентов	18
4.4. Методические указания по организации самостоятельной работы студентов	19
4.5. Примерная тематика курсовых работ (проектов) (при наличии)	19
5. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины:	19
а) основная литература;	19
б) дополнительная литература;	19
в) периодические издания	20
г) список авторских методических разработок	20
д) базы данных, поисково-справочные и информационные системы	20
6. Материально-техническое обеспечение дисциплины (модуля)	20
6.1. Учебно-лабораторное оборудование	20
6.2. Программное обеспечение;	20
6.3. Технические и электронные средства	20
7. Образовательные технологии	20
8. Оценочные материалы для текущего контроля и промежуточной аттестации.	21

1. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ:

Цель: дать студентам химикам представления о современном рентгеноструктурном анализе и обработка этой информации, систематизация структурного материала, выявление и интерпретация закономерностей, присущих строению кристаллических веществ, установление зависимости физических и химических свойств от структуры.

Задачи:

- a) ознакомить студентов химического факультета с современным состоянием учения о кристаллических структурах;
- b) закрепить необходимый понятийный аппарат, основные законы и закономерности, описывающие кристаллическое состояние, рентгеноструктурные свойства твердых тел, симметрию кристаллов;
- c) сформировать умение проводить расчетные работы по выявлению симметрии и обработке данных по рентгеноструктурному анализу;
- d) дать представление о роли и месте кристаллохимии, в нанотехнологии и в профессиональной деятельности.

II. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОПОП ВО:

Дисциплина «Кристаллохимия» относится к базовым дисциплинам вариативной части (Б1.В.06).

2.2. Для изучения данной учебной дисциплины необходимы знания, умения и навыки, формируемые предшествующими дисциплинами, а именно:

- «Математика» (Б1.О.10),
- «Механика и молекулярная физика» (Б1.О.12),
- «Общая химия. Химия неметаллов» (Б1.О.16),
- «Металлическая связь. Химия металлов» (Б1.О.17),
- «Математическая теория эксперимента» (Б1.В.02),
- «Физическая химия. Химическая термодинамика» (Б1.О.23),
- «Физическая химия. Электрохимия. Химическая кинетика и катализ» (Б1.О.23).

2.3 Перечень последующих учебных дисциплин, для которых необходимы знания, умения и навыки, формируемые данной учебной дисциплиной:

- «Химия лекарственных препаратов» (Б1.В.ДВ.02.01)
- «Химические основы биологических систем» (Б1.В.12)
- «Физико-химия поверхностно-активных веществ» (Б1.В.ДВ.02.02),
- «Использование хроматографии и электрохимических методов в анализе объектов сложного состава» (Б1.В.ДВ.03.01), выполнения квалификационных работ и формирования профессиональных компетенций.

Кристаллохимия, имея в качестве объектов исследования, в основном реальные вещества и материалы, завершает обще-химическое образование. Она является пограничной областью знания, которая объединяет кристаллохимию, физику, квантовую химию, строение вещества и физико-химические методы анализа рассматривает многие специфические проявления природы, которым раньше не уделялось должного внимания.

III. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Процесс освоения дисциплины направлен на формирование компетенций (элементов следующих компетенций) в соответствии с ФГОС ВО и ОП ВО по данному направлению подготовки 04.03.01 «Химия», направленность подготовки: Химия.

Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с индикаторами достижения компетенций

Компетенция	Индикаторы компетенций	Результаты обучения
<i>ПК-3</i> Способен готовить объекты исследования (вещества синтетического и природного происхождения, материалы и пр.) и проводить их изучение по заданным методикам	<i>ИДК ПК-3.3</i> Проводит расчетно-теоретические исследования по заданным методикам	Знать: теоретический материал для расчетов параметров кристаллических структур Владеть: навыками работы расчетно-теоретических исследований по заданным методикам. Уметь: проводить обработку результатов химических эксперимента при исследовании
<i>ПК-6</i> Способен применять основные естественнонаучные законы и закономерности развития химической науки при анализе полученных результатов	<i>ИДК ПК6.1</i> Знает теоретические основы базовых химических дисциплин (неорганической, органической, аналитической, физической химии, химии высокомолекулярных соединений, химических основ биологических процессов.) и способы их использования при решении конкретных химических задач	Знать: основные законы и закономерности, описывающие поверхностные явления, и определяющие поведение и свойства дисперсных систем. Уметь: применять теоретические основы коллоидной химии при анализе полученных экспериментальных результатов для решения конкретных химических задач.

IV. СОДЕРЖАНИЕ И СТРУКТУРА ДИСЦИПЛИНЫ

Трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетных единицы, 108 часов.

Форма промежуточной аттестации: *зачет*

4.1 Содержание дисциплины, структурированное по темам, с указанием видов учебных занятий и отведенного на них количества академических часов

№ п/п	Раздел дисциплины/темы	Семестр	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу обучающихся и трудоемкость (в часах)				Самостоятельная работа	Формы текущего контроля успеваемости; Форма промежуточной аттестации (по семестрам)
			Контактная работа преподавателя с обучающимися			Самостоятельная работа		
			Лекции	Практические занятия	КСР + консультации			
1	Введение в курс. Предмет и задачи кристаллохимии. Кристаллохимия как часть химии и связь ее с другими науками. Понятие о кристалле. Роль кристаллов в науке и технике. Классификация твердого тела. Ближняя и дальняя упорядоченность	6	2	-	-	-	-	
2	Симметрия. Элементы симметрии и операции симметрии. Симметрия и естествознание. Симметрия в химии. Зависимость физических свойств кристаллов от их симметрии. Свойства	6	2	2	0,5	13	Проверка задач по симметрии, практические задания, коллоквиум	

№ п/п	Раздел дисциплины/темы	Семестр	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу обучающихся и трудоемкость (в часах)				Самостоятельная	Формы текущего контроля успеваемости; Форма промежуточной аттестации (по семестрам)
			Контактная работа преподавателя с обучающимися					
	описываемые тензорами второго ранга. Пиро- и пьезоэлектрические свойства. Оптические свойства. Открытые и закрытые операции симметрии. Типы решеток. Структуры Бравэ и Федорова. Многообразие групп симметрии с различной размерностью. Структурные классы цепей и слоев.							
3	РЕНТГЕНОМЕТРИЯ КРИСТАЛЛОВ Кристаллографические символы. Результаты первых рентгеноструктурных исследований кристаллов. Число атомов, приходящихся на одну ячейку. Определение структуры меди по методу Брэгга. Структура кристаллов и структурный тип..	6	2	2	0,5	7	Проверка задач по симметрии, практические задания, коллоквиум	
4	ХИМИЧЕСКАЯ СВЯЗЬ В КРИСТАЛЛАХ. Типы химической связи в кристаллах. Гомо- и гетеродесмические структуры. Характер	6	2	-	0,25	3	Проверка задач по симметрии, практические задания, коллоквиум	

№ п/п	Раздел дисциплины/темы	Семестр	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу обучающихся и трудоемкость (в часах)				Самостоятельная	Формы текущего контроля успеваемости; Форма промежуточной аттестации (по семестрам)
			Контактная работа преподавателя с обучающимися					
	кристаллической структуры. Координационные, островные, цепочечные, слоистые и каркасные структуры. Структурные типы. Описание и сопоставление важнейших структурных; структурная гомология.							
5	ТИПЫ ПЛОТНЕЙШИХ УПАКОВОК Описание структур в терминах плотнейших шаровых упаковок (ПШК) и плотнейших шаровых кладок (ПШК). Слоиность, координационные числа, координационные полиэдры и пустоты. Слоиность ПШУ	6	5	2	0,25	3	Проверка задач по симметрии, практические задания, коллоквиум	
6	КРИСТАЛЛОХИМИЧЕСКИЕ ЯВЛЕНИЯ. Кристаллохимические явления. Изоструктурность. Изоморфизм. Типы изоморфизма. Твердые растворы замещения, внедрения и вычитания. Сверхструктуры.	6	3	2		3		

№ п/п	Раздел дисциплины/темы	Семестр	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу обучающихся и трудоемкость (в часах)				Самостоятельная	Формы текущего контроля успеваемости; Форма промежуточной аттестации (по семестрам)
			Контактная работа преподавателя с обучающимися					
	Политипизм, полиморфизм. Механизм полиморфных превращений. Морфоторпия.							
7	ПРОСТЫЕ ВЕЩЕСТВА) Типичные и аномальные структуры металлов Кристаллические структуры простых веществ – неметаллов.	6	2	2	0,5	2	Практические задания, коллоквиум	
8	СОЕДИНЕНИЯ СОСТАВА МХ. Оксиды и халькогениды щелочных металлов. Бинарные соединения переходных металлов. Галит, хлорид цезия, сфалерит, вюрцит. Структурный тип никелина. Структурный тип нитрида бора.	6	2	2	0,5	2	Практические задания, коллоквиум	
9	СТРУКТУРНЫЙ ТИП ПЕРОВСКИТА. СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКИ Структурный тип перовскита. Сегнето- и анитисегнетоэлектрические свойства вещества с искаженной структурой перовскита. Структура смешанных оксидов с высокой сверхпроводимостью. Производные перовскита.	6	2	2	0,5	2	Практические задания, коллоквиум	

№ п/п	Раздел дисциплины/темы	Семестр	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу обучающихся и трудоемкость (в часах)				Самостоятельная	Формы текущего контроля успеваемости; Форма промежуточной аттестации (по семестрам)
			Контактная работа преподавателя с обучающимися					
10	СТРУКТУРНЫЙ ТИП ШПИНЕЛИ. Структурный тип шпинели. Нормальные и обращенные шпинели. Ферриты и их техническое значение. Связь строения и магнитных свойств соединений, кристаллизующих по типу шпинели.	6	3	2	0,5	2	Практические задания, коллоквиум	
11	СИЛИКАТЫ. Основные особенности строения силикатов. Классификация структур силикатов. Зависимость физических свойств силикатов от их строения. Природные и синтетические цеолиты, их структуры и применение.	6	3	2	0,5	2	Практические задания, коллоквиум	
12	КООРДИНАЦИОННЫЕ СОЕДИНЕНИЯ Кристаллические структуры координационных соединений. Структуры соединений с полидентатными лигандами (комплексоны, комплексы краун-эфиров). Гетеромолекулярные кристаллы. Клатраты. Молекулярные комплексы.	6	2	-	0,5	2	Практические задания, коллоквиум	
13	ЖИДКИЕ КРИСТАЛЛЫ Строение жидких кристаллов. Каламитические мезофазы. Жидкокристаллические полимеры. Лиотропные мезофазы	6	2	-		-		
14	ДОМЕНЫ	6	2	-	0,5	2	Практические задания, коллоквиум	

№ п/п	Раздел дисциплины/темы	Семестр	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу обучающихся и трудоемкость (в часах)				Самостоятельная	Формы текущего контроля успеваемости; Форма промежуточной аттестации (по семестрам)
			Контактная работа преподавателя с обучающимися					
	Кристаллы с частичной неупорядоченностью. Ротационно-кристаллическое состояние. Микродвойникование, полисинтетические сростки. Доменные структуры. Элементы ближнего, среднего и дальнего порядка в жидкостях.							
Итого часов			34	18	5	43	зачет	

4.2 План внеаудиторной самостоятельной работы обучающихся по дисциплине

Семестр	Название раздела, темы	Самостоятельная работа обучающихся			Оценочное средство	Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы
		Вид самостоятельной работы	Сроки выполнения	Затраты времени (час.)		
6	СИММЕТРИЯ	Подготовка к решению задач по теме Симметрия		13	Проверка работ с задачам. УО	Основы кристаллохимии. Учебно-методическое пособие.

Семестр	Название раздела, темы	Самостоятельная работа обучающихся			Оценочное средство	Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы
		Вид самостоятельной работы	Сроки выполнения	Затраты времени (час.)		
6	РЕНТГЕНОСТРУКТУРНЫЙ АНАЛИЗ – ДЛЯ ИЗУЧЕНИЯ КРИСТАЛЛОВ	Решение задач по теме.		7	Практические задания.	Основы кристаллохимии. Учебно-методическое пособие.
6	КРИСТАЛЛИЧЕСКИЕ СТРУКТУРЫ МЕТАЛЛОВ	Подготовка к УО		3	Собеседование в форме коллоквиума	Основы кристаллохимии. Учебно-методическое пособие.
6	ТИПЫ ХИМИЧЕСКИХ СВЯЗЕЙ В КРИСТАЛЛАХ	Подготовка к УО		3	Собеседование в форме коллоквиума	Основы кристаллохимии. Учебно-методическое пособие.
6	ШАРОВЫЕ УПАКОВКИ.	Подготовка к УО		3	Собеседование в форме коллоквиума	Основы кристаллохимии. Учебно-методическое пособие.
6	ПРОСТЫЕ ВЕЩЕСТВА ТИПА МХ	Подготовка к УО		2	Собеседование в форме коллоквиума	Сборник задач по кристаллохимии
6	ОКСИДЫ И ИХ СТРУКТУРНЫЕ ТИПЫ	Решение задач по теме.		2	Практические задания.	

Семестр	Название раздела, темы	Самостоятельная работа обучающихся			Оценочное средство	Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы
		Вид самостоятельной работы	Сроки выполнения	Затраты времени (час.)		
6	СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКИ	Подготовка к УО		2	Собеседование в форме коллоквиума	Основы кристаллохимии. Учебно-методическое пособие.
6	ШПИНЕЛИ	Подготовка к УО		2	Собеседование в форме коллоквиума	Основы кристаллохимии. Учебно-методическое пособие.
6	КООРДИНАЦИОННЫЕ СОЕДИНЕНИЯ	Решение задач по теме		2	Собеседование в форме коллоквиума	Основы кристаллохимии. Учебно-методическое пособие.
6	КОНДЕНСИРОВАННЫЕ СОЕДИНЕНИЯ 1.4-1.6 Дисперсные системы	Подготовка к УО		2	Собеседование в форме коллоквиума	Основы кристаллохимии. Учебно-методическое пособие.
6	ЖИДКИЕ КРИСТАЛЛЫ	Подготовка к УО		1	Собеседование в форме коллоквиума	Основы кристаллохимии. Учебно-методическое пособие.

Семестр	Название раздела, темы	Самостоятельная работа обучающихся			Оценочное средство	Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы
		Вид самостоятельной работы	Сроки выполнения	Затраты времени (час.)		
6	ДОМЕНЫ	Подготовка к УО		1	Собеседование в форме коллоквиума	Основы кристаллохимии. Учебно-методическое пособие.
Общая трудоемкость самостоятельной работы по дисциплине (час)				43		
Бюджет времени самостоятельной работы, предусмотренный учебным планом для данной дисциплины (час)				43		

4.3 Содержание учебного материала

Содержание разделов и тем дисциплины

1. ВВЕДЕНИЕ

Введение в курс. Предмет и задачи кристаллохимии. Кристаллохимия как часть химии и связь ее с другими науками. Понятие о кристалле. Роль кристаллов в науке и технике. Классификация твердого тела. Ближняя и дальняя упорядоченность

2. СИММЕТРИЯ

Симметрия. Элементы симметрии и операции симметрии. Симметрия и естествознание. Симметрия в химии. Зависимость физических свойств кристаллов от их симметрии. Свойства описываемые тензорами второго ранга. Пиро- и пьезоэлектрические свойства. Оптические свойства. Открытые и закрытые операции симметрии. Типы решеток. Структуры Бравэ и Федорова. Многообразие групп симметрии с различной размерностью. Структурные классы цепей и слоев.

3. РЕНТГЕНОМЕТРИЯ КРИСТАЛЛОВ

Кристаллографические символы. Результаты первых рентгеноструктурных исследований кристаллов. Число атомов, приходящихся на одну ячейку.

Определение структуры меди по методу Брэгга. Структура кристаллов и структурный тип..

4. ХИМИЧЕСКАЯ СВЯЗЬ В КРИСТАЛЛАХ

Типы химической связи в кристаллах. Гомо- и гетеродесмические структуры. Характер кристаллической структуры. Координационные, островные, цепочечные, слоистые и каркасные структуры. Структурные типы. Описание и сопоставление важнейших структурных; структурная гомология.

5. ТИПЫ ПЛОТНЕЙШИХ УПАКОВОК

Описание структур в терминах плотнейших шаровых упаковок (ПШК) и плотнейших шаровых кладок (ПШК). Слоиность, координационные числа, координационные полиэдры и пустоты. Слоиность ПШУ

6. КРИСТАЛЛОХИМИЧЕСКИЕ ЯВЛЕНИЯ

Кристаллохимические явления. Изоструктурность. Изоморфизм. Типы изоморфизма. Твердые растворы замещения, внедрения и вычитания. Сверхструктуры. Политипизм, полиморфизм. Механизм полиморфных превращений. Морфоторпия.

7. ПРОСТЫЕ ВЕЩЕСТВА

Типичные и аномальные структуры металлов Кристаллические структуры простых веществ – неметаллов.

8. СОЕДИНЕНИЯ СОСТАВА МХ

Оксиды и халькогениды щелочных металлов. Бинарные соединения переходных металлов. Галит, хлорид цезия, сфалерит, вюрцит. Структурный тип никелина. Структурный тип нитрида бора.

9. СТРУКТУРНЫЙ ТИП ПЕРОВСКИТА. СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКИ

Структурный тип перовскита. Сегнето- и анитисегнетоэлектрические свойства вещества с искаженной структурой перовскита. Структура смешанных оксидов с высокой сверхпроводимостью. Производные перовскита.

10. СТРУКТУРНЫЙ ТИП ШПИНЕЛИ

Структурный тип шпинели. Нормальные и обращенные шпинели. Ферриты и их техническое значение. Связь строения и магнитных свойств соединений, кристаллизующих по типу шпинели.

11. СИЛИКАТЫ

Основные особенности строения силикатов. Классификация структур силикатов. Зависимость физических свойств силикатов от их строения. Природные и синтетические цеолиты, их структуры и применение.

12. КООРДИНАЦИОННЫЕ СОЕДИНЕНИЯ

Кристаллические структуры координационных соединений. Структуры соединений с полидентатными лигандами (комплексоны, комплексы краун-эфиров). Гетеромолекулярные кристаллы. Клатраты. Молекулярные комплексы.

13. КОНДЕНСИРОВАННЫЕ СОЕДИНЕНИЯ

Конденсированные фазы с различной степенью упорядоченности. Корреляционная длина. Дальний и ближний порядок. Кристаллы и квазикристаллы. Многообразие мезофаз.

14. ЖИДКИЕ КРИСТАЛЛЫ

Строение жидких кристаллов. Каламитические мезофазы. Жидкокристаллические полимеры. Лиотропные мезофазы..

15. ДОМЕНЫ

Кристаллы с частичной неупорядоченностью. Ротационно-кристаллическое состояние. Микродвойникование, полисинтетические сростки. Доменные структуры. Элементы ближнего, среднего и дальнего порядка в жидкостях.

4.3.1 Перечень практических занятий

№ № п/п	№ раздела и темы дисциплины (модуля)	Наименование семинаров, практических и лабораторных работ	Трудоемкость (час.)	Оценочные средства	Формируемые компетенции
1	2	3	4	5	6
1	Группы симметрии и структурные классы	Элементы симметрии и операции симметрии	-	Собеседование	
		Коллоквиум № 1 «Структурные классы»	1	Собеседование в форме коллоквиума и Решение задач	ПК-3.3 ПК-6.1
2		Полярность и хиральность молекул	1	Собеседование в форме коллоквиума. Решение задач	ПК-6.1
3	Элементы структурной кристаллографии	Трансляция, решетки и элементарная ячейка кристалла	1	Собеседование в форме коллоквиума. Решение задач	ПК-3,3 ПК-6.1
4		Коллоквиум № 2 «Морфология кристаллов»	1	Собеседование в форме коллоквиума. Решение задач	ПК-3,3 ПК-6.1
4	Дифракция рентгеновских лучей в кристалле	Физические основы рентгеновского анализа	1	Собеседование в форме коллоквиума. Решение задач	ПК-3,3 ПК-6.1
5		Коллоквиум № 3 «Первый этап анализа структуры. Определение параметров решетки и симметрии кристалла»	1	Собеседование в форме коллоквиума. Решение задач	ПК-6.1
6		Контрольная работа по теме «Определение параметров решетки и симметрии кристалла»»	1	Решение задач	ПК-6.1
7	Кристаллографические структуры	Координационные числа, плотнейшие упаковки координационные полиэдры	1	Собеседование в форме коллоквиума.	ПК-3,3 ПК-6.1
8		Стехиометрическая классификация соединений	1	Собеседование в форме коллоквиума.	ПК-6.1
10	Типы структур химических соединений	Типичные и аномальные структуры металлов	1	Собеседование в форме коллоквиума.	ПК-6.1
11		Кристаллические структуры простых веществ – неметаллов.	1	Собеседование в форме коллоквиума.	ПК-3,3 ПК-6.1

12		Оксиды и халькогениды щелочных металлов. Коллоквиум №4 по теме «Кристаллические структуры типа AX и XY»	1	Собеседование в форме коллоквиума.	ПК-6.1
13	Структурный тип перовскита. Сегнетоэлектрики. Шпинели	Структурный тип перовскита	1	Собеседование в форме коллоквиума.	ПК-3,3 ПК-6.1
14		Решение задач по теме «Сегнето- и анитисегнетоэлектрические свойства вещества с искаженной структурой перовскита.».	1	Решение задач. Контрольная работа	ПК-6.1
15		Структурный тип шпинели. Нормальные и обращенные шпинели	1	Собеседование в форме коллоквиума.	ПК-6.1
23		Ферриты и их техническое значение. Связь строения и магнитных свойств соединений, кристаллизующих по типу шпинели.	1	Собеседование в форме коллоквиума.	ПК-6.1
24		Силикаты	особенности строения силикатов. Классификация структур силикатов. Зависимость физических свойств силикатов от их строения.	1	Собеседование в форме коллоквиума.
	Природные и синтетические цеолиты, их структуры и применение.		1	Собеседование в форме коллоквиума.	ПК-6.1

4.3.2. Перечень тем (вопросов), выносимых на самостоятельное изучение самостоятельной работы студентов

№ п/п	Тема	Задание	Формируемая компетенция	ИДК
1	Симметрия.	Подготовка к коллоквиуму №1 (см. вопросы текущего контроля).	ПК-3, ПК-6	ПК-3,3 ПК-6.1
2	Элементы структурной кристаллографии	Подготовка к коллоквиуму №2 (см. вопросы текущего контроля)..	ПК-3, ПК-6	ПК-3,3 ПК-6.1
3	Основы рентгеноструктурного анализа.	Подготовка к коллоквиуму №3 (см. вопросы текущего контроля).	ПК-3, ПК-6	ПК-3,3 ПК-6.1
4	Кристаллические структуры типа AX и XY	Подготовка к коллоквиуму №4 (см. вопросы текущего контроля).	ПК-3, ПК-6	ПК-3,3 ПК-6.1
5	Кристаллические структуры типа AB ₂	Подготовка к собеседованию (см. вопросы текущего контроля).	ПК-3, ПК-6	ПК-3,3 ПК-6.1
6	Кристаллические структуры типа A _x B _y	Подготовка к собеседованию (см. вопросы текущего контроля).	ПК-3, ПК-6	ПК-3,3 ПК-6.1
7	Домены	Подготовка к собеседованию	ПК-3, ПК-6	ПК-3,3 ПК-6.1
8	Жидкие кристаллы	Подготовка к собеседованию Контрольная работа	ПК-3, ПК-6	ПК-3,3 ПК-6.1

4.4 Методические указания по организации самостоятельной работы студентов

Самостоятельная работа студентов, связанная с подготовкой к практическим работам, закреплением теоретического материала в виде решения задач и подготовки к коллоквиумам, проводится во внеаудиторное время.

Методические рекомендации по подготовке к практическим работам описаны в методических рекомендациях, подготовленных преподавателями кафедры.
Димовой Л.М. Основы кристаллохимии. Учебно-методическое пособие
Иркутск.:Иркут.гос.ун-т.2010.-117с.

4.5. Примерная тематика курсовых работ (проектов) (при наличии) _____

V. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины:

а) основная литература

1. П.М.Зоркий, Симметрия молекул и кристаллических структур, МГУ, 1986.
2. Г.Б.Бокий, Кристаллохимия, 3-е изд. М.: Наука, 1971.
3. Г.Кребс, Основы кристаллохимии неорганических соединений, М., Мир, 1971.
4. Димова Л.М. Основы кристаллохимии. Учебно-методическое пособие
Иркутск.:Иркут.гос.ун-т.2016.-194с.

б) дополнительная литература

1. Ю.К. Егоров-Тисменко, Кристаллография и кристаллохимия, М., Университет, 2005.
2. Д. Киперт, Неорганическая стереохимия, М., Мир, 1985.
3. Пенкаля Т. Очерки кристаллохимии. Польша, Пер. с польск. Под ред. Проф. Франк-Каменецкого В.А. Л.: Химия, 1974- 496 с.

Интернет-ресурсы:

<http://www.chem.msu.ru/rus/cryst/cryschem/glavy.html>
<http://www.chem.msu.ru/rus/cryst/welcome1.html>
<http://www.chem.msu.ru/rus/cryst/cryschem/welcome-cryschem.html>
<http://www.chem.msu.ru/rus/cryst/cryschem/opisanie.htm> <http://database.iem.ac.ru/mincryst/> На сайте <http://www.chem.msu.ru/rus/cryst/cryschem/welcome-cryschem.html> в качестве примера приведены материалы для подготовки к контрольным работам:
Сетевой ресурс поддержки образовательного процесса
www.chem.msu.ru/rus/cryst/cryschem/welcome-cryschem олекулярная симметрия»):
стр. 139-146 (pdf на сайте лаб. кристаллохимии)



в) периодические издания (при необходимости)

г) **список авторских методических разработок:** в ЭИОС ИГУ размещены учебно-методические пособия Димова Л.М. Основы кристаллохимии. Учебно-методическое пособие Иркутск.:Иркут.гос.ун-т.2010.-117с.

д) **базы данных, информационно-справочные и поисковые системы**

Интернет-ресурсы <http://www.chem.msu.ru/rus/cryst/crychem/glavy.html>

<http://www.chem.msu.ru/rus/cryst/welcome1.html>

<http://www.chem.msu.ru/rus/cryst/crychem/welcome-crychem.html>

<http://www.chem.msu.ru/rus/cryst/crychem/opisanie.htm> <http://database.iem.ac.ru/mincryst/> На

сайте <http://www.chem.msu.ru/rus/cryst/crychem/welcome-crychem.html> в качестве

примера приведены материалы для подготовки к контрольным работам:

Сетевой ресурс поддержки образовательного процесса

www.chem.msu.ru/rus/cryst/crychem/welcome-crychem олекулярная симметрия»):

стр. 139-146 (pdf на сайте лаб. кристаллохимии)

VI. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

6.1. Учебно-лабораторное оборудование:

Помещения для проведения лекционных и лабораторных занятий, укомплектованные необходимым оборудованием, приборной базой и реактивами, а именно:

- аудитории, оснащенные мультимедийными средствами, для проведения аудиторных и практических занятий (ауд. 402, 426); ауд. 6, 402, 426 оборудованы мультимедийными проекторами (InFocus IN 105 (3D Ready), настенными экранами, ноутбуками Samsung NP 300T5A-A0FRU.

- компьютерный класс кафедры физической и коллоидной химии (ауд. 303). Общее количество единиц вычислительной техники – 5: Pentium IV – 1 шт.; Pentium III – 1 шт.; Pentium I – 3 шт. Имеется локальная сеть.

:

6.2. Программное обеспечение:

6.3. Технические и электронные средства:

VII. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

В процессе изучения дисциплины «Кристаллохимия» читаются лекции, проводятся контрольные и практические работы, коллоквиумы, разбор конкретных ситуаций с использованием пассивных, активных и интерактивных форм обучения.

Активные формы обучения. На практических занятиях, которые составляют более половины от контактной работы, каждый студент выполняет работу индивидуально. Такой вид организации обучения способствует приобретению навыков самостоятельного ведения практических работ, решения задач, а также практического подтверждения теоретических положений кристаллохимии о свойствах кристаллических систем и их явлениях. Закрепление теоретических положений кристаллохимии (основных законов и закономерностей, определяющие кристаллических структур различного вида) проводится в виде интерактивного обучения – коллоквиумов, и выполнения расчетных задач.

Наименование тем занятий с использованием интерактивных форм обучения:

№	Тема занятия	Вид занятия	Форма / Методы интерактивного обучения	Кол-во часов
1	РЕНТГЕНОСТРУКТУРНЫЙ АНАЛИЗ – ДЛЯ ИЗУЧЕНИЯ КРИСТАЛЛОВ	Практические занятия	Групповая дискуссия / коллоквиум	2
2	КРИСТАЛЛИЧЕСКИЕ СТРУКТУРЫ МЕТАЛЛОВ	Практические занятия	Групповая дискуссия / коллоквиум	2
3	ТИПЫ ХИМИЧЕСКИХ СВЯЗЕЙ В КРИСТАЛЛАХ	Практические занятия	Групповая дискуссия / коллоквиум	2
4	ШАРОВЫЕ УПАКОВКИ.	Практические занятия	Групповая дискуссия / коллоквиум	2
Итого часов				8

VIII. ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ**Оценочные материалы (ОМ):**

Оценочные материалы текущего контроля формируются в соответствии с Положением о балльно-рейтинговой системе университета. Назначение оценочных средств текущего контроля - выявить у обучающихся сформированность компетенций:

Материалы для проведения текущего и промежуточного контроля знаний студентов:

№	Вид контроля	Контролируемые темы (разделы)	Компетенции, компоненты которых контролируются
1	Собеседование в форме коллоквиума. Практическое задание	ЭЛЕМЕНТЫ СИМЕТРИИ И ОПЕРАЦИИ	ПК-3.3 ПК-6.1
2	Собеседование в форме коллоквиума. Практическое задание. КР	КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИЕ СИМВОЛЫ. РЕНТГЕНОСТРУКТУРНЫЙ АНАЛИЗ	ПК-3.3 ПК-6.1
3	Собеседование в форме коллоквиума. Практическое задание	КРИСТАЛЛИЧЕСКИЕ СТРУКТУРЫ МЕТАЛЛОВ	ПК-3.3 ПК-6.1
4	Собеседование в форме коллоквиума. Практическое задание	ТИПЫ ХИМИЧЕСКИХ СВЯЗЕЙ В КРИСТАЛЛАХ	ПК-3.3 ПК-6.1
5	КР	ШАРОВЫЕ УПАКОВКИ.	ПК-3.3 ПК-6.1
6	Собеседование в форме коллоквиума	ПРОСТЫЕ ВЕЩЕСТВА ТИПА МХ	ПК-3.3 ПК-6.1
7	Собеседование в форме коллоквиума	ОКСИДЫ И ИХ СТРУКТУРНЫЕ ТИПЫ	ПК-3.3 ПК-6.1

Демонстрационный вариант контрольной работы**Вопросы к контрольной работе по теме « Симметрия »**

Вариант 1

1. Предмет и задачи кристаллохимии. Кристаллохимия как часть химии. Кристаллохимии и ее связь с другими науками.
2. Элементы симметрии и операции симметрии по Шенфлису, по Герману-Моргану, по формуле симметрии.
3. Точечные группы - что это такое. Приведите примеры.
4. Взаимодействия элементов симметрии. Основные понятия теории групп.
5. Определите конфигурацию молекулы CH_3CH_3 , которая имеет зеркально-поворотную ось S_6
6. Найдите оси C_3 в ионе NH_4^+ . Сколько таких осей имеет данная частица?
7. Определите точечную группу симметрии: $\text{XeF}_4, \text{N}_2\text{O}_4, \text{PCl}_3, \text{SO}_2\text{Cl}_2$
8. Задача: 2.12; 2.13; 2.14.
9. Перечислите элементы симметрии, которые указывают на неполярность молекулы. Используя критерия симметрии, определите, полярны или неполярны частицы $\text{PO}_4^{3-}, \text{SO}_4^{2-}, \text{PCl}_3, \text{SO}_2\text{Cl}_2, \text{HCN}, \text{C}_2\text{H}_2, \text{CO}$.
10. Укажите критерий симметрии для хиральности. Определите, какие из частиц указанные в задании 9, могут обладать оптической активностью.
- 11.

Вопросы к контрольной по теме кристаллические структуры

1. Основные макроскопические признаки вещества в кристаллическом состоянии.
2. Что такое анизотропия.
3. Что такое кристаллическое вещество 4. Что такое одномерный ряд, двухмерный ряд (плоская сетка)
5. Период идентичности
6. Трансляция
7. Сколько плоских сеток вы знаете и каках
8. Что такое трехмерная решетка, какими параметрами она задается.
9. Сколько трехмерных решеток вы знаете и каких.
10. Как на письме обозначается примитивная, объемцентрированная, гранеццентрированная, бокоцентрированные.
11. Сколько решеток Бравэ.
12. Как обозначаются узлы, ряды, плоскости
13. Сколько классов симметрии
14. Сколько категорий и каких
15. Что такое сингония, сколько и какие
16. Что такое простая форма
17. Что такое комбинация
18. Что такое общая и частная форма
19. Открытые и закрытые формы
20. Простые формы низших сингоний
21. Простые формы средних сингоний
22. Простые формы высших сингоний

ВОПРОСЫ ДЛЯ СОБЕСЕДОВАНИЯ

Коллоквиум №1. Симметрия.

- Понятие точечной группы. Симметрические операции и элементы симметрии.

Поворотные и инверсионные оси. Примеры молекул.

- Семейства точечных групп низшей и средней категории. Предельные группы средней категории. Примеры молекул.
- Стереографическая проекция элементов симметрии и нормалей к граням многогранников. Точечные группы высшей категории. Примеры молекул и многогранников.
- Символика точечных групп. Символы Германа-Могена. Зеркально-поворотные оси и символы Шенфлиса.
- Изогоны и орбиты точечных групп. Структурные классы молекул.
- Изоэдры и их комбинации. Семейства изоэдров.
- Группы трансляций. Примитивные и непримитивные параллелепипеды повторяемости. Кристаллическая решетка и кристаллическая структура.
- Симметрия решетки. Голоэдрические точечные группы. Кристаллографические координатные системы. Элементарная ячейка.
- Кристаллографические точечные группы (кристаллографические классы). Симметрия кристаллического многогранника и симметрия позиции в кристаллической структуре. ры.
- Открытые элементы симметрии кристаллических структур и их обозначения.
- Сочетания открытых и закрытых элементов симметрии между собой и с перпендикулярными трансляциями.
- Пространственные группы симметрии. Принцип их вывода. Общие и частные системы эквивалентных позиций (орбиты). Структурные классы.
- Описание кристаллических структур на основе пространственных групп и структурных классов. Примеры структур низшей категории.
- Описание кристаллических структур на основе пространственных групп и структурных классов. Примеры структур средней категории.
- Описание кристаллических структур на основе пространственных групп и структурных классов. Примеры структур высшей категории.
- Многообразие групп симметрии с различной размерностью. Структурные классы цепей и слоев.
- Кристаллохимические радиусы и их использование. Коэффициент плотности упаковки.

Коллоквиум №2. Элементы структурной кристаллографии

1. Трансляция, решётка и элементарная ячейка кристалла
2. Индексы узловых сеток
3. Межплоскостные расстояния
4. Морфология кристаллов
5. Простые формы низших сингоний
6. Простые формы средних сингоний
7. Простые формы высших сингоний

Коллоквиум №3 Основы рентгеноструктурного анализа.

- Какое физическое явление лежит в основе рентгеноструктурного анализа? Что представляет собой материальная субстанция, рассеивающая рентгеновские лучи?
- Назовите основные способы получения дифракционной картины в рентгенографии.
- Какие характеристики кристаллического вещества можно получить с помощью уравнений Лауэ?
- Какие характеристики кристаллического вещества можно получить с помощью уравнения Брэгга-Вульфа?

- Какие формулы выражают зависимость интенсивности дифракционного луча от кристаллической структуры?
- Какая функция является конечным результатом стандартного рентгеноструктурного анализа? Какие характеристики кристаллического вещества извлекают из этой функции?
- Почему стандартный рентгеноструктурный анализ не может дать адекватную информацию о функции распределения электронной плотности?
- Какую дополнительную информацию дает прецизионный рентгеноструктурный анализ по сравнению со стандартным вариантом этого метода?
- Каково назначение и общие принципы устройства автоматического дифрактометра?
- Для какой цели используется рентгенофазовый анализ? Какой метод получения дифракционной картины лежит в основе этого метода?
- Какие дифракционные методы (кроме рентгенографии) используются для определения структуры кристаллов?
- Какое физическое явление лежит в основе нейтронографии и электронографии? На каких материальных объектах рассеиваются нейтроны и электроны?

Коллоквиум №4. Кристаллические структуры типа AX и XY

- Назовите основные структурные типы ионных кристаллов. Каковы координационные числа ионов в этих веществах?
- Чем различаются структуры вюрцита и сфалерита?
- Каков характер кристаллической структуры Cu_2O ?
- Назовите известные Вам модификации SiO_2 ; укажите их сингонию и соотношение с модификациями углерода.
- Укажите важнейшие различия структур CO_2 и SiO_2 .
- Сколько водородных связей образует молекула воды в кристаллах льда? Как эти связи расположены?
- Чем похожи и в чем различаются структуры BN и графита?
- Приведите примеры островных кристаллических структур из числа простых и бинарных веществ.
- Приведите примеры цепочечных кристаллических структур бинарных соединений AX и XY.
- Приведите примеры слоистых кристаллических структур AX и XY.
- Приведите примеры гомодесмических (монолитных) структур AX и XY с ковалентными связями.
- Опишите мотив заполнения пустот в корунде Al_2O_3 .
- Приведите примеры кристаллических структур AX, где металл имеет координационный многогранник в виде:
 - а) октаэдра, б) тетрагональной дипирамиды, в) тригональной призмы.

Промежуточная аттестация (*эчет*) может проводиться в форме устного собеседования или в виде тестовых заданий с открытыми вопросами.

ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ ФОРМИРОВАНИЯ КОМПЕТЕНЦИЙ

Индикаторы достижения компетенции	Результаты обучения (знать, уметь, владеть)	Процедура оценивания
ПК-3.3 Проводит расчетно-теоретические исследования по заданным методикам	Знает: основные законы и закономерности, описывающие кристаллохимические закономерности	. Собеседование в форме коллоквиума. Практические задания. КР.
	Умеет: : применять теоретические основы кристаллохимии при анализе расчетах	. Собеседование в форме коллоквиума. Практические задания. КР.
ПК-6.1 Знает теоретические основы базовых химических дисциплин (неорганической, органической, аналитической, физической химии, химии высокомолекулярных соединений, химических основ биологических процессов.) и способы их использования при решении конкретных химических задач	Знает: основные законы и закономерности, описывающие кристаллохимические явления, и определяющие поведение и свойства кристаллических систем. Умеет: применять теоретические основы кристаллохимии при анализе полученных экспериментальных результатов для решения конкретных химических задач.	. Собеседование в форме коллоквиума. Практические задания. КР. Собеседование в форме коллоквиума. Практические задания. КР.

КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ ОБУЧЕНИЯ:


1. Студенту необходимо изучить материал по 10 темам и написать 6 контрольных работ. Каждая работа оценивается максимум на 5 баллов. При выполнении контрольных работ оценивается знание изученных тем. Предусмотрено 4 собеседования по теоретическому материалу. Каждая тема оценивается максимум на 4 балла.
2. Предусмотрено 6 коллоквиумов, ответы на вопросы которых оцениваются максимум на 5 баллов.
3. Максимальное количество баллов, которое студент может получить в течение семестра, равно 100.
4. Для получения зачёта необходимо получить не менее 75 баллов.

ПРИМЕРНЫЙ СПИСОК ВОПРОСОВ К ЗАЧЕТУ:

- I. Типы химической связи в кристаллах.
2. Гомо-и гетеродесмические структуры.
3. Характер кристаллической структуры. Координационные, островные, цепочечные, слоистые, каркасные структуры.
4. Число формульных единиц в ячейке.
5. Ретикулярная плотность.
6. Координационные числа и координационные полиэдры.
7. Структурные типы. Описание и сопоставление важнейших структурных типов;

8. Структурная гомология.
9. Описание структур в терминах плотнейших шаровых упаковок (ПШУ) и плотнейших шаровых кладок (ПШК).
10. Координационные числа, координационные полиэдры и пустоты в ПШУ и ПШК. Слойность ПШУ.
11. Кристаллохимические радиусы атомов. Металлические и ионные радиусы. Коэффициент плотности упаковки металлических и ионных кристаллов. Ковалентные и ван-дер-ваальсовы радиусы
12. Кристаллохимические явления. Изоструктурность. Изоморфизм.
13. Типы изоморфизма.
14. Основной закон геометрический кристаллографии
15. Полиморфизм, политипия.
16. Монокотропные и энантиотропные полиморфные переходы. Морфотропия.
17. Простые вещества. Типичные и аномальные структуры металлов.
18. Кристаллические структуры простых веществ - неметаллов.
19. Общая характеристика кристаллических структур бинарных соединений. Структура AX, описываемые в терминах ПШУ - ПШК (анионные упаковки и кладки).
20. Какие физические свойства оцениваются при описании кристалла
21. Что такое анизотропия
22. Общая классификация неорганических минералов.

Разработчик:




доцент Л. М. Димова

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО и учетом рекомендаций ПООП по направлению и профилю подготовки 04.03.01 – «Химия».

Программа рассмотрена на заседании кафедры общей и неорганической химии «24» апреля 2024 г., протокол № 5.

Зав. кафедрой

 /А.Ю. Сафронов/

Настоящая программа, не может быть воспроизведена ни в какой форме без предварительного письменного разрешения кафедры-разработчика программы.