



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



декан, Пройдаков А.Г.

“ 2016 г.

**Рабочая программа дисциплины**

Индекс дисциплины по УП: **Б1.В.ДВ.1.2**

Наименование дисциплины: «**Избранные главы кристаллохимии**»

Направление подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре:  
**04.06.01 «Химические науки»**

Направленность программы подготовки кадров высшей квалификации (программы аспирантуры): **Неорганическая химия**

Форма обучения: **очная**

Согласовано с УМК  
химического факультета

Протокол № 9 от «15» июня 2016 г.

Председатель \_\_\_\_\_  
Пройдаков А.Г.

Рекомендовано кафедрой общей и  
неорганической химии

Протокол № 6 от «31» июня 2016 г.

Зав. кафедрой \_\_\_\_\_  
Сафронов А.Ю.

Иркутск 2016 г.

## Содержание

	Стр.
1 Цели и задачи дисциплины.	3
2 Место дисциплины в структуре ООП	3
3 Требования к результатам освоения дисциплины	3
4 Объем дисциплины и виды учебной работы	4
5 Содержание дисциплины.	4
5.1 Содержание разделов и тем дисциплины	4
5.2 Разделы дисциплины и междисциплинарные связи с последующими дисциплинами	5
5.3. Разделы и темы дисциплины и виды занятий	5
6 Перечень практических занятий	6
7 Примерная тематика курсовых проектов	-
8 Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины:	7
а) федеральные законы и нормативные документы;	
б) основная литература;	
в) дополнительная литература;	
г) программное обеспечение;	
д) базы данных, поисково-справочные и информационные системы	
9 Материально-техническое обеспечение дисциплины.	7
10 Образовательные технологии.	7
11 Оценочные средства. (ОС).	7

## 1. Цели и задачи дисциплины

### ЦЕЛЬ КУРСА

Цель курса – дать аспирантам 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 КУРСА

Обработка этой информации, систематизация структурного материала, выявление и интерпретация закономерностей, присущих строению кристаллических веществ, установление зависимости физических и химических свойств от структуры - таковы основные задачи кристаллохимии.

## 2. Место дисциплины в структуре ООП

Дисциплина «Избранные главы кристаллохимии» является дисциплиной по выбору учебного плана (Б1.В.ДВ.1.2). Специалиста – химика невозможно представить без знания основ кристаллохимии. Кристаллохимия – наука о кристаллических структурах, базирующаяся главным образом на данных рентгеноструктурного анализа, а также нейтронографии и электронографии. Необходимость углубленного изучения этого предмета диктуется, прежде всего, его практической значимостью. Изучение кристаллохимии не требует дорогостоящего оборудования и при этом обладает высокой надежностью

## 3. Требования к результатам освоения дисциплины

Изучение дисциплины направлено на формирование следующих компетенций:

- УК-1- способностью к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях;
- ОПК-1- способностью самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий;
- ПК-1 - уметь собирать и анализировать научную литературу с целью выбора направления исследования и самостоятельно составлять план исследования в рамках выбранного направления подготовки;
- ПК-2- самостоятельно определять перечень необходимых инструментальных методов исследования, используемых при выполнении диссертационной работы по выбранному направлению подготовки; современные способы обработки и интерпретации получаемых результатов; представлять возможности и ограничения методов;
- ПК-4- знать основные приемы и методы получения веществ, методы их идентификации, определения структуры и свойств с помощью уникального и серийного научного оборудования.

В результате изучения дисциплины аспирант должен:

**Знать** - как самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий (ОПК-1).

**Уметь** - собирать и анализировать научную литературу с целью выбора направления исследования и самостоятельно составлять план исследования в рамках выбранного направления подготовки (ПК-1), самостоятельно определять перечень необходимых инструментальных методов исследования, используемых при выполнении диссертационной работы по выбранному направлению подготовки; современные способы обработки и интерпретации получаемых результатов; представлять возможности и ограничения методов (ПК-2), использовать современные специализированные вычислительные комплексы и базы

данных при планировании химических исследований, для обработки и анализа экспериментальных данных, подготовке публикаций и презентаций результатов диссертационной работы (ПК-4).

**Владеть** - способностью к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях (УК-1), овладеть приемами постановки задачи исследования предоставленной структуры, выбором метода анализа исходя из поставленной задачи.

#### 4. Объем дисциплины и виды учебной работы

Вид учебной работы	Всего часов / зачетных единиц	Курс			
		1	2	3	4
<b>Аудиторные занятия (всего)</b>	3		3		
В том числе:					
Лекции	24 (0,66)		24		
Практические занятия	24 (0,67)		24		
<b>Самостоятельная работа (всего)</b>	60 (1,67)		60		
Вид промежуточной аттестации - зачет с оценкой	+				
Общая трудоемкость:					
Часы	108		108		
зачетные единицы	3		3		

#### 5. Содержание дисциплины

##### 5.1. Содержание разделов и тем дисциплины

###### ВВЕДЕНИЕ

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

2. Симметрия. Элементы симметрии и операции симметрии. Симметрия и естествознание. Симметрия в химии.

3. 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.

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

5. Определение структуры меди по методу Брэгга. Структура кристаллов и структурный тип. Кристаллические структуры элементов. Металлы.

6. 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.

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

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

9. Простые вещества. Типичные и аномальные структуры металлов Кристаллические структуры простых веществ – неметаллов. Группа углерода. Бинарные соединения переходных металлов. Соединения состава  $MX$

### 5.2 Разделы дисциплины и междисциплинарные связи с последующими дисциплинами

Дисциплина является основой для выполнения квалификационных работ аспирантов, необходима в будущей практической деятельности.

### 5.3. Разделы и темы дисциплины и виды занятий

Общая трудоемкость дисциплины составляет 3 зачетных ед., 108 часов

Наименование темы	Всего часов	Виды подготовки		Самостоятельная работа аспиранта
		лекции	практические	
МЕСТО КРИСТАЛЛОХИМИИ СРЕДИ ДРУГИХ НАУК.	6	2	2	2
СИММЕТРИЯ	8	2	2	4
СВЯЗЬ ЭЛЕМЕНТОВ СИММЕТРИИ КРИСТАЛЛОВ И ИХ ФИЗИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК	12	4	4	4
РЕНТГЕНОСТРУКТУРНЫЙ АНАЛИЗ – ДЛЯ ИЗУЧЕНИЯ КРИСТАЛЛОВ	10	2	2	6
КРИСТАЛЛИЧЕСКИЕ СТРУКТУРЫ МЕТАЛЛОВ	12	2	2	8
ТИПЫ ХИМИЧЕСКИХ СВЯЗЕЙ В КРИСТАЛЛАХ	12	2	2	8
ШАРОВЫЕ УПАКОВКИ	14	2	2	10
КРИСТАЛЛОХИМИЧЕСКИЕ ЯВЛЕНИЯ	18	4	4	10
СТРУКТУРЫ СОЕДИНЕНИЙ ТИПЫ $MX$	8	2	2	4
СТРУКТУРЫ СОЕДИНЕНИЙ ТИПЫ $MX_2$	8	2	2	4
Всего часов	108	24	24	60

## 6. Перечень практических занятий

№ п/п	№ темы дисциплины	Наименование практических работ	Трудоемкость (часы)	Оценочные средства	Формируемые компетенции
1.	Симметрия	Решение задач	2	контрольная работа	ОПК-1, УК-1, ПК1,2,4
2.	Рентгеноструктурный анализ для изучения кристаллов	Решение задач	4	контрольная работа	ОПК-1, УК-1, ПК1,2,4
3.	Кристаллические структуры металлов	Структура меди, железа, магния, олова, ртути, мышьяка, индия, марганца	4	устное собеседование	ОПК-1, УК-1, ПК1,2,4
4.	Типы химических связей в кристаллах	Ионная, ковалентная, водородная, металлическая, межмолекулярное взаимодействие	2	устное собеседование	ОПК-1, УК-1, ПК1,2,4
5.	Шаровые упаковки	Тип АВ и тип АВС	2	устное собеседование	ОПК-1, УК-1, ПК1,2,4
6.	Кристаллохимические явления	Изоморфизм, гетероморфизм, политипия	2	устное собеседование	ОПК-1, УК-1, ПК1,2,4
7.	Структуры соединений типы МХ	Галит, вюрцит, сфалерит, никелин, хлорид цезия, нитрид бора, оксид свинца	4	устное собеседование	ОПК-1, УК-1, ПК1,2,4
8.	Кристаллические структуры неметаллов	Графит, алмаз, иод, хлор	2	устное собеседование	ОПК-1, УК-1, ПК1,2,4
9.	Структуры соединений типы МХ <sub>2</sub>	Флюорит, рутил, куприт, молибденит, пирит, кварц	2	устное собеседование	ОПК-1, УК-1, ПК1,2,4

7. Курсовые работы – не предусмотрены

#### 8. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины:

##### ЛИТЕРАТУРА

###### Основная

1. Димова Л.М. Основы кристаллохимии. Учебно-методическое пособие. Иркутск.: Иркут. гос. ун-т. 2010. -117с.
2. Бокий Г.Б. Кристаллохимия. М.: Наука, 1971- 400 с.

3. Л.М. Димова, Е.А. Даткова. Современные неорганические материалы. Учебное пособие / Л.М. Димова, Е.А. Даткова.- Иркутск, Иркутский ун-т.-2012.-157.

*Дополнительная*

1. Пенкаля Т. Очерки кристаллохимии. Польша, Пер. с польск. Под ред. Проф. Франк-Каменецкого В.А. Л.: Химия, 1974- 496 с.
2. Попов Г.М., Шафрановский. Кристаллография. М.: Высшая школа, 1972 - 352 с.
3. Кребс Г. Основы кристаллохимии неорганических соединений. М.: Мир, 1971 – 303 с.
4. Зоркий П.М. Задачник по кристаллохимии и кристаллографии. М.: Моск. Ун-т, 1981 – 20 с.
5. Интернет-источниками по курсу являются сайты университетов и библиотек, имеющие ресурсы по кристаллохимии (например интернет сайт МГУ [www.msu.su](http://www.msu.su)). Для проведение некоторых лекций с компьютерным проектором автором разработаны презентации по некоторым темам (например «Шпинели »).

**9. Материально-техническое обеспечение дисциплины:**

Материалы и оборудование

№ п/п	Наименование	Количество
1.	Модели осей	10
2.	Модели структур	50
3.	Модели шаровых упаковок	2

**10. Образовательные технологии:**

Реализация компетентного подхода в подготовке специалиста предусматривает наряду с **аудиторной деятельностью** студента и преподавателя (лекции, практические занятия), написание отчетов, рефератов, докладов, их изложение, обсуждение с использованием компьютерных технологий, предусматривает работу с электронной библиотекой - знакомство с современным состоянием проблемы, ее представление как отечественными, так и зарубежными исследователями.

**11. Оценочные средства (ОС)\**

Формой промежуточного контроля являются контрольные работы. Формой итогового контроля является *зачет* с оценкой.

**ПРИМЕРНЫЙ ПЕРЕЧЕНЬ 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. Слоистость ПШУ.
- II. 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:



к.х.н., доцент

Л.М. Димова

Программа рассмотрена на заседании кафедры общей и неорганической химии  
«31» мая 2016 г., протокол № 6

Зав. кафедрой, профессор



Сафронов А.Ю.

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

**Лист согласования, дополнений и изменений  
на 2017/2018 учебный год**

К рабочей программе дисциплины **Б1.В.ДВ.1.2 Избранные главы кристаллохимии** по направленности программы подготовки кадров высшей квалификации (программа аспирантуры) **Неорганическая химия**.

1. В рабочую программу дисциплины вносятся следующие дополнения:  
Нет дополнений
  
2. В рабочую программу дисциплины вносятся следующие изменения:  
Нет изменений

Изменения одобрены Ученым советом химического факультета, протокол № 5 от « 26 » мая 2017 г.

Зав. кафедрой общей  
и неорганической химии

 / А. Ю. Сафронов /

**Лист согласования, дополнений и изменений  
на 2018/2019 учебный год**

К рабочей программе дисциплины **Б1.В.ДВ.1 «Избранные главы кристаллохимии»** по направленности программы подготовки кадров высшей квалификации (программы аспирантуры) **02.00.01 «Неорганическая химия»**.

В рабочую программу дисциплины вносятся следующие дополнения:

Нет дополнений

В рабочую программу дисциплины вносятся следующие изменения:

Нет изменений

Изменения одобрены Ученым советом химического факультета, протокол № 5 от 4 апреля 2018 г.

Зав. кафедрой  
общей и неорганической  
химии

  
\_\_\_\_\_  
(подпись)

А. Ю. Сафронов