

Белорусский государственный университет



Утверждаю учебной работе и
научно-педагогическим инновациям

О. Г. Прохоренко

2023 г.

Регистрационный № УД-11704 /уч.

КРИСТАЛЛОХИМИЯ

Учебная программа учреждения высшего образования
по учебной дисциплине для специальности:

1-31 05 01 Химия (по направлениям)

направление специальности:

1-31 05 01-01 Химия (научно-производственная деятельность)

1-31 05 01-02 Химия (научно-педагогическая деятельность)

2023 г.

Учебная программа составлена на основе ОСВО 1-31 05 01-2021, ОСВО 1-31 05 03-2021, ОСВО 1-31 05 04-2021, учебных планов G31-01-005уч., G31-1-006уч. от 25.05.2021 г., G31-1-231/уч., G31-1-232/уч. от 22.03.2022 г., типовая программа №ТД-С.-501/тип. от 04.02.2015 г.

СОСТАВИТЕЛЬ:

Д.И. Мычко, доцент кафедры неорганической химии химического факультета БГУ, кандидат химических наук, доцент

Л.Ю. Садовская, доцент кафедры неорганической химии химического факультета БГУ, кандидат химических наук.

РЕЦЕНЗЕНТ:

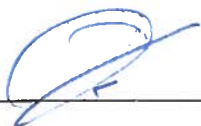
Б. А. Стрельцов, зав.кафедрой электрохимии Белорусского государственного университета, доктор химических наук, профессор

РЕКОМЕНДОВАНА К УТВЕРЖДЕНИЮ:

Кафедрой неорганической химии
(протокол № 7 от 29.12.2022 г.);

Научно-методическим Советом БГУ
(протокол № 4 от 29.12.2022 г.)

Зав. кафедрой _____



ПОЯСНИТЕЛЬНАЯ ЗАПИСКА

Цели и задачи учебной дисциплины

Цель учебной дисциплины «Кристаллохимия» – формирование у студентов компетенций в решении структурно-химических задач фундаментального и прикладного характера.

Задачи учебной дисциплины:

1. Систематизация знаний о способах описания и факторах, определяющие структуру и состав кристаллических веществ;
2. Развитие навыков использования методологии кристаллохимии для изучения и прогнозирования состава, строения и свойств веществ в кристаллическом состоянии;
3. Формирование научного мировоззрения на основе изучения фундаментальных понятий и моделей, используемых при описании структуры химических соединений в кристаллическом состоянии, а также закономерностей в зависимости свойств кристаллов от их строения и способов получения; в практическом использовании полученных знаний при решении учебных задач.

Место учебной дисциплины в системе подготовки специалиста с высшим образованием.

Учебная дисциплина «Кристаллохимия» относится к циклу специальных дисциплин (государственный компонент).

Связи с другими учебными дисциплинами, включая учебные дисциплины компонента учреждения высшего образования, дисциплины специализации и др.

Дисциплина «Кристаллохимия» опирается на следующие дисциплины – «Высшая математика» (линейная алгебра, аналитическая геометрия, начала теории групп); «Физика» (электромагнитное излучение, кулоновское взаимодействие, дифракция); «Неорганическая химия» (строение и свойства атомов, периодический закон, строение молекул, теория химической связи, стереохимия, термодинамика).

Дисциплина «Кристаллохимия» представляет собой теоретическую основу для изучения последующих курсов химического профиля – «Физическая химия», «Строение вещества», «Коллоидная химия», «Химия твёрдого тела», «Химическая технология», «Физические методы исследования».

Требования к компетенциям

Освоение учебной дисциплины «Кристаллохимия» должно обеспечить формирование следующих универсальных, базовых профессиональных и специализированных компетенций:

***специализированные* компетенции:**

СК-6. Ориентироваться в системе современных знаний о строении кристаллов и частично упорядоченных конденсированных фаз, методах получения твердотельных материалов с заданной структурной организацией (моно- и поликристаллические, нанокристаллические, аморфные и

стеклообразные твердые тела, порошки, пленки), механизмах и кинетике реакций с участием твердых тел, особенностях химического, фазового состава и структуры твердых тел, обуславливающих их свойства и практическое применение

В результате освоения учебной дисциплины студент должен:

знать:

- способы описания и изображения структуры веществ в кристаллическом состоянии;
- фундаментальные понятия, терминологию и символику кристаллохимии;
- основные законы и закономерности строения кристаллических веществ;
- общие принципы характеристики и интерпретации свойств кристаллических структур;
- ряд наиболее распространенных структурных типов;
- причины устойчивости кристаллов и полиморфных превращений, условия изоморфизма;
- основы рентгенографических методов исследования кристаллов.

уметь:

- описывать кристаллические структуры, в том числе в терминах плотнейших шаровых упаковок;
- проводить простейшие кристаллографические расчёты (плотность кристаллических веществ, плотность упаковок, размеры элементарных ячеек, атомов и ионов, длин химических связей);
- идентифицировать кристаллические вещества по их рентгенограммам с использованием соответствующего справочного материала;

владеть:

- понятийным аппаратом кристаллохимии;
- приемами построения графиков точечных и простейших пространственных групп, методами определения правильных систем точек (орбит группы);
- опытом анализа, формулировки и решения конкретных структурно-химических задач;
- приёмами анализа данных рентгенофазового и рентгеноструктурного анализа кристаллических веществ.

Структура учебной дисциплины

Дисциплина изучается в 4 семестре. Всего на изучение учебной дисциплины «Кристаллохимия» отведено для очной формы получения высшего образования – 114 часа, в том числе 52 аудиторных часа, из них: лекции – 24 часа, семинарские занятия – 10 часов, практические занятия – 12 часов, управляемая самостоятельная работа – 6 часов.

Трудоемкость учебной дисциплины составляет 3 зачетные единицы.

Форма текущей аттестации – экзамен.

СОДЕРЖАНИЕ УЧЕБНОГО МАТЕРИАЛА

Раздел 1. Введение

Кристаллохимия как наука. Цели, задачи и методология кристаллохимии. История развития кристаллохимии. Предмет и задачи современной кристаллохимии, ее место в системе естественных наук. Различные способы моделирования кристаллических структур – статические и динамические модели, ρ - r - модели, полиэдрические модели. Проблемы и тенденции развития современной кристаллохимии. Понятие о структурно-химическом дизайне новых веществ и материалов.

Раздел 2. Основные способы описания и изображения кристаллического состояния вещества

Тема 2.1. Особенности кристаллического состояния вещества

Конденсированные фазы с различной степенью упорядоченности. Отличия между кристаллическим и аморфным состояниями вещества. Дальний и ближний порядок. Причины устойчивости кристаллического состояния.

Основные свойства кристаллических веществ – анизотропия, однородность, симметрия. Основные законы кристаллографии – закон постоянства двугранных углов, закон рациональности отношений параметров граней кристаллов (закон Гаюи).

Тема 2.2. Описание кристаллического состояния с использованием элементов симметрии

Симметрия кристаллических структур. Точечные и трансляционные элементы симметрии, их обозначение. Стереографические проекции точечных элементов симметрии. Обозначение групп симметрии – международная символика (символика Германа-Могена) и учебная символика (Браве).

Пространственная (трансляционная) решетка кристалла, элементарные ячейки решетки. Метрика решетки. Кристаллографические категории и системы (сингонии). Структурный тип.

Индексы узлов, рядов и плоскостей решетки. Межплоскостные расстояния. Связь между параметрами решетки, межплоскостными расстояниями и индексами плоскостей (индексами Миллера-hkl). Квадратичные формы для кристаллов разных сингоний.

Единичные направления в кристаллах и их сочетание с элементами симметрии.

Правильные системы точек (орбиты) и их характеристики. Принципы построения графиков пространственных групп симметрии и проекций структур.

Тема 2.3. Описание кристаллического состояния с использованием плотнейших шаровых упаковок

Теория плотнейших упаковок. Симметрия плотноупакованного слоя. Гексагональная и кубическая плотнейшие упаковки. Пустоты в плотнейших упаковках. Типы, размещение и размеры пустот в плотнейших упаковках.

Пустоты в плотнейших упаковках, их положение и размеры

Структурные единицы кристалла. Кристаллохимические формулы. Примеры структур, построенных на основе плотнейших упаковок.

Тема 2.4. Полиэдрический метод изображения кристаллических структур
Координационный полиэдр и координационное число.

Раздел 3. Основы рентгеноструктурного анализа

Тема 3.1. Дифракционные методы исследования внутреннего строения кристаллов

Дифракционные методы исследования – рентгеноструктурный анализ (РСА), электронный структурный (ЭСА), нейтронный структурный анализ (НСА). Их сравнительные возможности.

Дифракция рентгеновских лучей кристаллами. Условия дифракции Лауэ, условия Вульфа-Брегга. Методы рентгенографии: метод порошка, метод Лауэ, метод вращающегося кристалла. Возможности различных методов и их практическое использование.

Тема 3.2. Методы рентгенографии

Метод порошка (Дебая-Шеррера). Рентгенофазовый анализ. Получение сведений о наборах межплоскостных расстояний. Индексирование рентгенограмм порошков. Идентификация веществ по набору межплоскостных расстояний. Определение параметров решетки. Рентгеновская плотность веществ. Факторы, определяющие интенсивность дифракционных отражений. Основы качественного и количественного фазового анализа (РФА). Базы данных для проведения РФА.

Метод Лауэ. Область использования метода. Симметрия лауэграмм. Закон Фриделя. Определение пространственной группы симметрии по законам погасаний.

Метод вращающегося кристалла. Область использования метода. Определение постоянных решёток по рентгенограммам вращения. Интенсивность рентгеновского дифракционного отражения и ее составляющие. Структурный фактор. Фактор атомного рассеяния, аномальное рассеяние. Формула электронной плотности (ряд Фурье). Проблема начальных фаз. Методы решения фазовой проблемы. Карты распределения электронной плотности. Оценка координат атомов.

Базы структурных и рентгенографических данных; их использования для идентификации веществ.

Раздел 4. Факторы, определяющие структуру и состав кристаллических веществ

Тема 4.1. Кристаллохимические радиусы

Орбитальные и эффективные радиусы атомов и ионов: определение и периодические закономерности. Ионные, ковалентные, металлические и ван-дер-ваальсовы радиусы атомов и ионов. Соотношение между различными системами радиусов (орбитальными, ионными, атомными, слейтеровскими (эмпирическими), кристаллохимическими, физическими).

Тема 4.2. Типы химической связи в кристаллах, их влияние на структуру.
Способы описания химической связи в твёрдых телах. Классификация кристаллических структур, на основе локализованных в них типов химической связи. Гомодесмические и гетеродесмические структуры. Основные структурные мотивы: островные, цепочечные, слоистые, каркасные, координационные. Кристаллы ковалентные, ионные, металлические, молекулярные.

Тема 4.3. Энергия кристаллической решётки (ЭКР).

Величины ЭКР для кристаллов с различным типом химических связей. Расчёт энергии кристаллической решётки по ионной модели. Уравнения Борна-Майера и Борна-Ланде. Цикл Борна-Габера. Приближенные расчёты ЭКР по уравнениям Капустинского и Ферсмана. Энергия атомизации. Возможности уточнения расчетных значений ЭКР. Энергия стабилизации кристаллическим полем (ЭСКП).

Тема 4.4. Основные категории кристаллохимии

Морфотропия, полиморфизм, политипия. Изменения структуры при фазовых переходах, их классификация

Тема 4.5. Основные структурообразующие факторы, критерии устойчивости кристаллических структур.

Кристаллохимические условия устойчивости ионных кристаллов (правила Магнуса, Гольдшмидта, Полинга, О'Киффа). Влияние эффекта Яна-Теллера на характер кристаллической структуры.

Раздел 5. Основные типы кристаллических структур

Тема 5.1. Металлические кристаллы

Металлическая связь и ее структурные свойства. Структурные типы металлов. Полиморфизм металлов. Кристаллические структуры металлов различных групп периодической системы химических элементов Д.И. Менделеева.

Классификация интерметаллических соединений. Упорядоченные и неупорядоченные твердые растворы металлов. Фазы Лавеса, фазы Цинтля, структуры типа NiAs. Электронные соединения (фазы Юм-Розери). Фазы внедрения, твёрдые растворы внедрения, твёрдые растворы вычитания.

Переход от металлической к ковалентной связи и «переходные» структуры

Тема 5.2. Ковалентные кристаллы

Кристаллические структуры простых веществ неметаллов. Связь между координационным числом в кристаллической структуре простого вещества и электронной структурой образующих её атомов. Кристаллические структуры простых веществ, образуемых элементами VIII (благородные газы), VII (галогены), VI (халькогены), V (подгруппа азота) и IV(подгруппа углерода) групп периодической системы химических элементов Д.И. Менделеева. Кристаллические структуры бора. Закономерности в изменении характера кристаллических структур простых веществ, относящихся к одной группе периодической системы элементов, с увеличением порядковых номеров элементов.

Структурные типы бинарных соединений АВ и АВ₂ с преимущественно ковалентным характером связи. Алмазоподобные кристаллические соединения. Правило Юм-Розери. Структурные типы вюрцита и сфалерита. Тройные и четверные алмазоподобные соединения. Молекулярные (структура СО₂, НgBr₂), слоистые (структурные типы НgI₂, РbI₂, Mg(OH)₂), цепочечные (тип SiS₂) и координационные структуры соединений типа АВ₂ (SiO₂ – кристобалит, тридимит, кварц).

Тема 5.3. Структурные типы бинарных соединений АВ и АВ₂ с преимущественно ионным характером связи

Структурные типы NaCl и CsCl. Производные структуры от типа NaCl. Структурные типы рутила и флюорита.

Тема 5.4. Структурные типы тернарных соединений

Структуры типа АВО₃. Структурный тип перовскита. Сегнето- и анти-сегнетоэлектрические свойства веществ с искаженной структурой перовскита. Структурный тип шпинели (АВ₂О₄). Нормальные и обращённые шпинели. Ферриты и их техническое значение.

Тема 5.5. Молекулярные структуры

Остаточная (вандерваальсова) связь. Диполь-дипольные и ион-дипольные взаимодействия. Упаковка молекул в кристалле, правила Китайгородского. Разупорядочение в молекулярных структурах. Понятие о жидких кристаллах. Водородная связь. Структура льда, гидратов, неорганических кислот и других водородносвязанных соединений. Сольваты, молекулярные (упаковочные) комплексы, комплексы с топологической связью. Соединения включения, клатраты, супрамолекулярные соединения.

Тема 5.6. Структурные типы силикатов и алюмосиликатов

Классификация силикатов. Силикаты островные, кольцевые, цепочечные, ленточные, слоистые, каркасные. Природные и синтетические цеолиты, их структура и применение.

Тема 5.7. Изоморфизм

Виды изоморфных замещений и твердых растворов. Стехиометрические и нестехиометрические соединения. Виды и механизмы изоморфного замещения. Основные типы твердых растворов. Условия и генетические факторы изоморфизма. Правила Вегарда, Ретгерса, Гольдшмидта Юм-Розери.

УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКАЯ КАРТА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Дневная форма получения образования с применением дистанционных образовательных технологий

Номер раздела, темы	Название раздела, темы	Количество аудиторных часов					Количество часов УСР	Форма контроля знаний
		Лекции	Практические занятия	Семинарские занятия	Лабораторные занятия	Иное		
1	2	3	4	5	6	7	8	9
1	Введение. Кристаллохимия как наука. Цели, задачи и методология кристаллохимии. Проблемы и тенденции развития современной кристаллохимии.	1						Тест на образовательном портале Educhem
2.1.	Особенности кристаллического состояния вещества	1						Тест на образовательном портале Educhem
2.2.	Описание кристаллического состояния с использованием элементов симметрии	2	2	2			2	Аудиторная контрольная работа, опрос
2.3.	Описание кристаллического состояния с использованием плотнейших шаровых упаковок	1		2				Тест на образовательном портале Educhem
3.1.	Дифракционные методы исследования внутреннего строения кристаллов	1						Тест на образовательном портале Educhem
3.2.	Методы рентгенографии	2	4				2	Аудиторная контрольная работа Письменный отчет по исследовательскому заданию
4.1.	Кристаллохимические радиусы	1		1				Тест на образовательном портале Educhem
4.2.	Типы химической связи в кристаллах, их влияние на	1		1				Тест на образовательном портале Educhem
4.3.	структуру. Энергия кристаллической решётки (ЭКР).							
4.4.	Основные категории кристаллохимии	1		1				Тест на образовательном портале

								Educhem
4.5.	Основные структурообразующие факторы, критерии устойчивости кристаллических структур	1		1			2	Аудиторная контрольная работа
5.1.	Металлические кристаллы	2		2				Тест на образовательном портале Educhem
5.2.	Ковалентные кристаллы	2	2					Тест на образовательном портале Educhem
5.3.	Структурные типы бинарных соединений АВ и АВ ₂ с преимущественно ионным характером связи	2	1					Тест на образовательном портале Educhem
5.4.	Структурные типы тернарных соединений	1	1					Тест на образовательном портале Educhem
5.5.	Молекулярные структуры	1						Тест на образовательном портале Educhem
5.6.	Структурные типы силикатов и алюмосиликатов	2						Тест на образовательном портале Educhem
5.7.	Изоморфизм	2	2					Тест на образовательном портале Educhem
	ИТОГО	24	12	10			6	

ИНФОРМАЦИОННО-МЕТОДИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ

Перечень основной литературы

1. Каратаева, Т. П. Основы кристаллохимии: Учеб. пособие / Т.П. Каратаева. – Минск: БГУ, 2001. – 225 с.
2. Филатов, С. К. Систематическая кристаллохимия : учебник / С. К. Филатов, С. В. Кривовичев, Р. С. Бубнова ; Санкт-Петербургский гос. ун-т. - Санкт-Петербург : Изд-во Санкт-Петербургского ун-та, 2019. - 230 с.
3. Мычко, Д. И. Физико-химические основы геохимии: пособие / Д. И. Мычко. - Минск: БГУ, 2015. – 303 с.

Перечень дополнительной литературы

1. Шрайвер, Дувард. Неорганическая химия : в 2 т. Т. 1 / Д. Шрайвер, П. Эткинс ; пер. с англ. М. Г. Розовой, С. Я. Истомина, М. Е. Тамм под ред. В. П. Зломанова. - Москва : Мир, 2013. - 679 с.
2. Шрайвер, Дувард. Неорганическая химия : в 2 т. Т. 2 / Д. Шрайвер, П. Эткинс ; пер. с англ. М. Г. Розовой, С. Я. Истомина, М. Е. Тамм под ред. В. П. Зломанова. - Москва : Мир, 2013. - 486 с.
3. Вест, А. Химия твёрдого тела. Теория и приложения: В 2-х ч. Ч.1 / Пер. с англ. – М.: Мир, 1988. – 550 с.
4. Кристаллография: учебное пособие к практическим занятиям по кристаллографии / Е.М. Нуриева, А.А. Ескин. – Казань: Казан. ун-т, 2017. – 94 с.-
5. Зоркий, Петр Маркович. Симметрия молекул и кристаллических структур / П. М. Зоркий ; под ред. М. А. Порай-Кошица. - Москва : Изд-во МГУ, 1986. - 232 с.
6. Уэллс А. Структурная неорганическая кристаллохимия: В 3 т. - М.: Мир, 1987.
7. Егоров-Тисменко, Ю.К. Кристаллография и кристаллохимия: учебник / Ю.К. Егоров-Тисменко; под ред. академика В.С. Урусова. – М.: КДУ, 2005. – 592 с
8. Шаскольская, Марианна Петровна. Кристаллография : учеб. пособие для студ. высших технических учеб. заведений / М. П. Шаскольская. - Изд. 2-е, перераб. и доп. - Москва : Высшая школа, 1984. - 375 с. Экз.: 68, из них: АБУ-18, РФ-2, ХФ-48
9. Бокий, Г. Б. Кристаллохимия / Г. Б. Бокий ; [АН СССР, Ин-т радиотехники и электроники]. - Изд. 3-е, перераб. и доп. - Москва : Наука, 1971. - 400 с. : ил. ; 24x17 см. - Библиогр.: с. 390-393. Экз.: 16, из них: ХФ-16
10. Ворошилов, Ю.В. Основы кристаллографии и кристаллохимии. Рентгенография кристаллов: Учебник/ Ю.В. Ворошилов, В.И. Павлишин. – К.: КНТ, 2011. — 568 с.

11. Картонова, Л. В. Основы кристаллографии: учеб. пособие/ Л. В. Картонова; Владим. гос. ун-т им. А. Г. и Н. Г. Столетовых.– Владимир, 2015. – 80 с.
12. Богдан, Т.В. Описание кристаллических структур металлов в терминах шаровых упаковок и кладок: Учебно-методическое пособие к общему курсу «Кристаллохимия»/ Т.В. Богдан. – М.: Изд-во МГУ. –2015. – 29 с.
13. Кузьмичева, Г.М. Основные разделы кристаллографии: Учебное пособие / Г. М. Кузьмичева. – М.: МИТХТ, 2000. – 85 с.
14. Теоретический расчет рентгенограммы поликристалла: Описание лабораторной работы по курсу «Рентгеноструктурный анализ» / Сост.: Т.В. Панова, В.И. Блинов. – Омск: Омск. гос. ун-т, 2004. – 20 с.

Перечень рекомендуемых средств диагностики и методика формирования итоговой отметки

Для диагностики компетенций могут использоваться следующие формы: письменная; устно-письменная; техническая.

К письменной форме диагностики компетенций относятся: контрольные работы; письменные отчеты по аудиторным (домашним) практическим упражнениям.

К устно-письменной форме диагностики компетенций относятся: отчеты по аудиторным практическим упражнениям с их устной защитой; отчеты по домашним практическим упражнениям с их устной защитой.

К технической форме диагностики компетенций относятся: электронные тесты.

Оценка за ответы на лекциях и семинарских (практических) занятиях может включать в себя полноту ответа, наличие аргументов, правильный выбор способа решения расчетных задач.

Формой текущей аттестации по дисциплине «Кристаллохимия» учебным планом предусмотрен экзамен.

При формировании итоговой отметки используется рейтинговая система оценки знаний студента, дающая возможность проследить и оценить динамику процесса достижения целей обучения. Рейтинговая система предусматривает использование весовых коэффициентов для текущего контроля знаний и текущей аттестации студентов по дисциплине.

Примерные весовые коэффициенты, определяющие вклад текущего контроля знаний в итоговую отметку:

- работа на семинарских и практических занятиях (опрос) – 20 %;
- выполнение тестов – 20 %;
- выполнение аудиторной контрольной работы – 60 %.

Итоговая отметка по дисциплине рассчитывается на основе отметки текущей успеваемости (рейтинговой системы оценки знаний) и экзаменационной отметки с учетом их весовых коэффициентов. Вес отметки по текущей успеваемости составляет 40 %, экзаменационной отметки – 60 %.

Примерный перечень заданий для управляемой самостоятельной работы студентов

Тема 2.2. Описание кристаллического состояния с использованием элементов симметрии

I. Выберите один правильный ответ:

- [illegible]

- II. Установить соответствие и запишите ответ в виде 1A2B3B4Г
- 9.

Формула симметрии		Класс симметрии
1	$L_6 6L_2$	А. Примитивный
2	$L_4 PC$	Б. Центральный
3	$3L_2 3PC$	В. Планыальный
4	$L_3 3P$	Г. Аксиальный
5	$4L_3 3L_2$	Д. Планаксиальный
6	$L_6 6L_2 7PC$	Е. Инверсионно-примитивный

10.

Параметры элементарной ячейки	Сингония
1. $a = b = c \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	А. тетрагональная
2. $a = b = c \alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	Б. гексагональная
3. $a \neq b \neq c \alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	В. кубическая
4. $a = b \neq c \alpha = \beta = 90^\circ \gamma = 120^\circ$	Г. ромбическая
5. $a \neq b \neq c \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	Д. триклинная

Форма контроля – Аудиторная контрольная работа

Тема 3.2. Методы рентгенографии

- Кальций кристаллизуется в КПУ и имеет радиус, равный 2,23 Å.
 - Рассчитать первые шесть межплоскостных расстояний на для кристаллического кальция.
 - Определить факторы повторяемости для первых двух линий на рентгенограмме.
 - Указать относительная интенсивность какой линии выше.
- На рентгенограмме кристалла, относящегося к кубической сингонии и записанной на излучении с $\lambda = 1,54 \text{ Å}$, наблюдаются отражения под углами (2θ , градусы): 44,508, 51,847, 76,372, 92,947, 98,449, 121,925.
 - Определить тип ячейки Браве этого кристалла (Р, I, F, A).
 - Вычислить параметр ячейки (Å).
 - Нанести соответствующие плоскости на рисунок и указать их индексы.
- Определить формулу гипотетического вещества $A_x B_y C_z$ и построить его элементарную ячейку, если известно, что в терминах ПШУ структура описывается следующим образом: атомы В занимают места шаров КПУ, атомы А – половину октаэдрических пустот, атомы С – четверть тетраэдрических пустот.
- Определить, к какому структурному типу (формула вещества) относятся элементарные ячейки со следующими координатами атомов:
 - МХ:М $\frac{1}{2}00$; $0\frac{1}{2}0$; $00\frac{1}{2}$; $\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}$?
Х 000 ; $\frac{1}{2}\frac{1}{2}0$; $\frac{1}{2}0\frac{1}{2}$; $0\frac{1}{2}\frac{1}{2}$
 - МХ:М 000 ; $\frac{1}{2}\frac{1}{2}0$; $\frac{1}{2}0\frac{1}{2}$; $0\frac{1}{2}\frac{1}{2}$

$X \frac{1}{4} \frac{1}{4} \frac{1}{4}; \frac{3}{4} \frac{1}{4} \frac{3}{4}; \frac{3}{4} \frac{3}{4} \frac{1}{4}; \frac{1}{4} \frac{3}{4} \frac{3}{4};$

5. Используя радиусы ионов Na и Cl, рассчитать (А) плотность кристаллического NaCl. $R(\text{Na}^+) = 0,116 \text{ нм}$, ($KЧ=6$); $R(\text{Cl}^-) = 0,167 \text{ нм}$ ($KЧ=6$). Рассчитать плотность упаковки этой структуры (Б).

Металлический натрий кристаллизуется в структурном типе $\alpha\text{-Fe}$ (ОЦК) и имеет плотность $0,968 \text{ г/см}^3$. Определить кратчайшее межатомное расстояние Na–Na (нм) и атомный радиус натрия (нм).

Форма контроля – Аудиторная контрольная работа

Тема 4.5. Основные структурообразующие факторы, критерии устойчивости кристаллических структур

1. По данным рентгенографии двойная соль KCl-NH₄Cl кристаллизуется в структурном типе NaCl и имеет размер элементарной ячейки, равный $6,42 \text{ \AA}$. Радиусы ионов K^+ , NH_4^+ , Cl^- соответственно равны $1,38$; $1,46$; $1,81 \text{ (\AA)}$.

А. Рассчитать состав элементарной ячейки (формула)

Б. Плотность этих кристаллов

2. Нестехиометрический оксид железа (II) имеет плотность $2,98 \text{ г/см}^3$, а размер элементарной ячейки, $a = 5,34 \text{ \AA}$. Относительные атомные массы: Fe – $55,84$; O – 16 . Определить:

А. Формулу этого оксида

Б. Мольную долю в нём железа(III)

В. Число катионных вакансий в элементарной ячейке

3. Записать выражение для коэффициента толерантности (t) для структуры перовскита и решить, возможна ли реализация этого структурного типа для соединения KNiF₃, если известно, что t для данной структуры лежит в интервале $1 - 0,95$, а ионные радиусы для калия, никеля и фтора соответственно равны $1,38$, $0,69$, $1,33 \text{ (\AA)}$.

4. Изобразить элементарную ячейку для структурного типа сфалерита и указать координаты базиса решетки. Привести формулу точечной группы симметрии для данной элементарной ячейки и нанести её элементы на стереографическую проекцию.

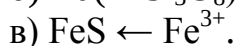
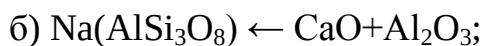
5. Используя значения ионных радиусов установите, к какому структурному типу относятся кристаллы: MgO, если радиусы $\text{Mg}^{2+} - 0,074 \text{ нм}$; $\text{O}^{2-} - 0,136 \text{ нм}$.

6. Определите структурный мотив в следующих минералах:

а) $\text{Ca}_3\text{Al}_2[\text{SiO}_4]_3$, б) $\text{Ca}_3[\text{Si}_3\text{O}_9]$, в) $\text{Na}[\text{AlSi}_3\text{O}_8]$.

7. Предложите механизм для образования твердых растворов в системах:

а) $\text{Mg}_7[\text{Si}_8\text{O}_{22}](\text{OH})_2 \leftarrow \text{Mg}_5\text{Al}_2[\text{Al}_2\text{Si}_6\text{O}_{22}](\text{OH})_2$;



Приведите соответствующие уравнения изоморфных замещений и укажите для каждого случая тип изоморфизма

Форма контроля – Аудиторная контрольная работа

Примерная тематика семинарских и практических занятий

Семинар № 1. Кристаллическое состояние вещества. Описание кристаллического состояния с использованием элементов симметрии

Семинар № 2. Описание кристаллического состояния с использованием плотнейших шаровых упаковок

Семинар № 3. Кристаллохимические радиусы и типы химической связи в кристаллах

Семинар № 4. Основные структурообразующие факторы, критерии устойчивости кристаллических структур

Семинар № 5. Кристаллические структуры металлов и интерметаллических соединений

Практическое занятие № 1. Описание кристаллического состояния с использованием элементов симметрии.

Практическое занятие № 2. Принципы дифракционных методов анализа кристаллических структур.

Практическое занятие № 3. Использование рентгенографических данных для определения параметров кристаллических решеток, размеров атомов и плотности вещества.

Практическое занятие № 4. Структурные типы бинарных соединений АВ и АВ₂ с преимущественно ионным характером связи

Практическое занятие № 5. Ковалентные кристаллы.

Практическое занятие № 6. Изоморфизм. Твёрдые растворы.

Описание инновационных подходов и методов к преподаванию учебной дисциплины

При организации образовательного процесса используется **практико-ориентированный подход**, который предполагает:

- освоение содержания образования через решения практических задач;
- приобретение навыков эффективного выполнения разных видов профессиональной деятельности;
- ориентацию на генерирование идей, реализацию групповых студенческих проектов, развитие предпринимательской культуры;
- использованию процедур, способов оценивания, фиксирующих сформированность профессиональных компетенций.

Помимо этого, при организации образовательного процесса **используются методы и приемы развития критического мышления**, которые представляют собой систему, формирующую навыки работы с информацией в процессе чтения и письма; понимании информации как открытого, а не конечного пункта критического мышления.

Методические рекомендации по организации самостоятельной работы обучающихся

Для организации самостоятельной работы студентов по учебной дисциплине используются современные информационные ресурсы: на образовательном портале educhem.bsu.by размещен комплекс учебных и учебно-методических материалов (учебно-программные материалы, материалы текущего контроля и текущей аттестации, позволяющие определить соответствие учебной деятельности обучающихся требованиям образовательных стандартов высшего образования и учебно-программной документации, в т.ч. вопросы для подготовки к семинарским занятиям, экзамену, задания, тесты, вопросы для самоконтроля, список рекомендуемой литературы, информационных ресурсов):

<https://educhem.bsu.by/course/view.php?id=227>

<https://educhem.bsu.by/course/view.php?id=392>

Примерный перечень вопросов к экзамену

1. Кристаллохимия как наука: предмет, цели, задачи и методы кристаллохимии
2. Особенность кристаллического состояния вещества.
3. Способы описания кристаллической структуры
4. Свойства кристаллов: анизотропия, однородность, симметрия
5. Основные законы кристаллографии (закон рационального отношения параметров, закон постоянства двугранных углов
6. Симметрия кристаллов и способы описания кристаллов по симметрии
7. Открытые и закрытые операции симметрии, соответствующие им элементы симметрии, их изображение и символика. Стереогrafическая проекция элементов симметрии.
8. Определение элементов симметрии внешней формы и внутреннего строения кристаллических структур.
9. Точечные и пространственные группы симметрии. Формула группы симметрии (в учебной символике). Распределение групп симметрии по классам и сингониям.
10. Элементарные ячейки пространственных решеток. Типы решёток Браве. Симметрия пространственных решеток. Характеристика кристаллических решеток по категориям, сингониям и группам симметрии.
11. Базис, метрика, число формульных единиц элементарной ячейки.
12. Межплоскостные расстояния и индексы плоскостей (индексы Миллера)
13. Теория плотнейших шаровых упаковок (ПШУ).
14. Кубическая и гексагональная плотнейшие упаковки, соответствующие им элементарные ячейки.

15. Пустоты в плотнейших упаковках, их положение в кристаллических решетках и размеры.
16. Плотные шаровые кладки.
17. Кристаллические структуры, которые можно описывать в терминах теории плотнейших упаковок
18. Дифракционные методы исследования, физические основы этих методов, их возможности и области использования
19. Принципы рентгеноструктурного анализа. Условия дифракции рентгеновских лучей (условия Вульфа-Брегга, условия Лауэ).
20. Методы рентгенографии. Метод Лауэ. Метод вращающегося кристалла. Метод Дебая-Шеррера (метод порошка)
21. Основы качественного и количественного фазового анализа.
22. Интенсивность интерференционных линий рентгенограммы и факторы её определяющие (структурный; тепловой; угловой; повторяемости; абсорбционный).
23. Расчет рентгенограммы порошка. Индицирование рентгенограмм порошков. Определение типа ячейки Браве. Измерение параметров кристаллической решетки.
24. Рентгеновский анализ металлических твердых растворов. Рентгеновский метод определения типа твердого раствора.
25. Использование результатов рентгеноструктурного анализа для определения координат атомов в элементарной ячейке кристаллической структуры
26. Химическая связь и кристаллическая структура. Зонная теория твердого тела. Интерметаллические соединения
27. Факторы, определяющие структуру и состав кристаллических веществ: геометрические факторы (фактор толерантности, размеры атомов и ионов, особенность кристаллической структуры минерала, координационное окружение атомов); факторы химической связи (валентные усилия связи, стехиометрия и мотив структуры, поляризационные свойства структурных единиц, их заряд, электронное строение атомов, тип химической связи); термодинамические факторы (энергетическая устойчивость кристаллической решетки, термодинамические условия формирования минералов);)
28. Правила Полинга для ионных структур. (соотношение радиусов, валентные усилия связи)
29. Кристаллическая структура металлов. Структурные типы меди, магния, α -железа. Полиморфизм металлов и распределение структурных типов между различными группами металлов Периодической системы химических элементов
30. Классификация интерметаллических соединений. Сверхструктуры, фазы Лавеса, фазы Цинтля, структуры типа арсенида никеля, электронные соединения (фазы Юм-Розери), фазы внедрения
31. Кристаллические структуры неметаллов. VIII, VII, VI, V, IV, III-A - подгрупп. Закономерности изменения кристаллических структур

- различных веществ в рамках каждой из рассматриваемых подгрупп.
Изменение степени гетеродесмичности структур.
32. Семейство алмазоподобных соединений. Структурные типы сфалерита и вюртцита.
 33. Молекулярные, слоистые, цепочечные и координационные соединения типа AB_2 с преимущественно ковалентным характером связи.
 34. Кристаллические структуры молекулярных органических веществ.
 35. Кристаллические структуры веществ с преимущественно ионным типом химической связи.
 36. Структурные типы соединений AB (тип $NaCl$, $CsCl$). Структурные типы соединений AB_2 (CaF_2 , TiO_2). Структурный тип перовскита (ABO_3) и шпинели (AB_2O_4).
 37. Кристаллические структуры силикатов (координационные, островковые, кольцевые, цепочечные, слоистые, каркасные),
 38. Твердые растворы (внедрения, замещения). Факторы, определяющие структуру твердого раствора. Механизм образования твердых растворов. Требования к компонентам, образующим твердые растворы.
 39. Изоморфизм. Условия изоморфизма. Типы изоморфизма. Эмпирические правила изоморфной смесимости.
 40. Основные категории теоретической кристаллохимии и соотношения между ними: структурный тип кристалла, изоструктурность, антиизоструктурность, изотипия, гомеотипия, морфотропия, политипия.
 41. Полиморфизм, Полиморфные превращения, Классификация полиморфных превращений по структурному признаку.

ПРОТОКОЛ СОГЛАСОВАНИЯ УЧЕБНОЙ ПРОГРАММЫ УВО

Название учебной дисциплины, с которой требуется согласование	Название кафедры	Предложения об изменениях в содержании учебной программы учреждения высшего образования по учебной дисциплине	Решение, принятое кафедрой, разработавшей учебную программу (с указанием даты и номера протокола)
1. Физические методы исследования	Неорганической химии	Изменения не требуются	Протокол 7 от 29.12.2022.
2. Строение вещества	Неорганической химии	Изменения не требуются	Протокол 7 от 29.12.2022.

**ДОПОЛНЕНИЯ И ИЗМЕНЕНИЯ К УЧЕБНОЙ ПРОГРАММЕ ПО
ИЗУЧАЕМОЙ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЕ**

на ____ / ____ учебный год

№ п/п	Дополнения и изменения	Основание

Учебная программа пересмотрена и одобрена на заседании кафедры
_____ (протокол № 7 от 29.12.2022 г.)

Заведующий кафедрой

УТВЕРЖДАЮ

Декан факультета

д.х.н., член-корр. НАН Беларуси _____ Д. В. Свиридов