

Белорусский государственный университет



КАТЕДРА

Директор по учебной работе и
инновационным технологиям

О. Г. Прохоренко

22 октября 2023 г.

Регистрационный № УД-12356 /уч.

КРИСТАЛЛОХИМИЯ

**Учебная программа учреждения высшего образования
по учебной дисциплине для специальности:**

1-31 05 01 Химия (по направлениям)

направление специальности:

1-31 05 03 Химия высоких энергий

1-31 05 04 Фундаментальная химия

2023г.

Учебная программа составлена на основе ОСВО 1-31 05 03-2021, ОСВО 1-31 05 04-2021, уч. планов G-31-1-009/уч; G-31-1-010/от 25.05.2021.

СОСТАВИТЕЛЬ:

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

РЕЦЕНЗЕНТ:

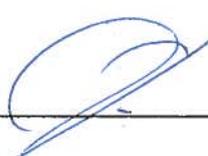
А.И. Кулак, доктор химических наук, профессор, академик НАН Беларуси

РЕКОМЕНДОВАНА К УТВЕРЖДЕНИЮ:

Кафедрой неорганической химии
(протокол № 5 от 4.12.2023 г.);

Научно-методическим Советом БГУ
(протокол № 4 от 21.12.2023г.)

Зав. кафедрой _____



Д.В. Свиридов

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 компонентам учреждения высшего образования, модуль «Химия конденсированного состояния»

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 компетенций:

для специальности 1-31 05 03 Химия высоких энергий ск-10:

- ориентироваться в современной теории химического строения, включающей квантовое состояние молекул, симметрию молекулярных систем, их электрические, магнитные и оптические свойства, в

строении и структурной организации конденсированных фаз (жидких, аморфных веществ, мезофаз, кристаллов);

для специальности 1-31 05 04 Фундаментальная химия бпк-12:

- ориентироваться в системе современных знаний о строении кристаллов и частично упорядоченных конденсированных фаз, методах получения твёрдотельных материалов с заданной структурной организацией (моно- и поликристаллические, нанокристаллические, аморфные и стеклообразные твёрдые тела, порошки, плёнки), механизмах и кинетики реакций с участием твёрдых тел, особенностях химического и фазового состава и структуры твёрдых 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 6 семестре. Всего на изучение учебной дисциплины «Кристаллохимия» отведено для очной формы получения высшего образования – 102 часа, в том числе 60 аудиторных часа, из них: лекции – 28 часа, практических- 16 из них 10 ДОТ, семинарских занятий – 10 часов, управляемая самостоятельная работа – 6 часов:

Трудоемкость учебной дисциплины составляет 3 зачетные единицы.

Форма промежуточной 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. Способы моделирования структуры кристаллических веществ. Проблемы и тенденции развития современной кристаллохимии.

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 внешней формы и внутреннего строения. Основные законы кристаллографии – закон постоянства двугранных углов, закон рациональности отношений параметров граней кристаллов (закон Гаюи). Основные физические свойства кристаллических веществ.

Тема 2.2. Описание кристаллического состояния с использованием элементов симметрии

Симметрия кристаллических структур. Закрытые и открытые операции (преобразования) симметрии. Точечные и трансляционные элементы симметрии, их обозначение. Стереографические проекции точечных элементов симметрии. Сочетание элементов симметрии. Точечные группы симметрии. Обозначения точечных групп симметрии: международная символика (символика Германа-Могена) и учебная символика (Браве). Единичные направления в кристаллах и их сочетание с элементами симметрии. Кристаллографические сингонии и категории. Правильная система точек. Пространственные группы симметрии. Графики пространственных групп симметрии. Кристаллическая (пространственная) решетка кристалла. Элементарная ячейка кристаллической решётки. Параметры решетки. Типы решёток Браве. Индексы узлов, рядов и плоскостей решетки. Межплоскостные расстояния. Связь между параметрами решётки, межплоскостными расстояниями и индексами плоскостей (индексами Миллера – hkl).

Тема 2.3. Описание кристаллического состояния с использованием теории плотнейших шаровых упаковок

Теория плотнейших упаковок. Гексагональная плотнейшая упаковка (ГПУ, двухслойная). Кубическая плотнейшая упаковка (КПУ, гранецентрированную кубическую (ГЦК), трехслойная). Симметрия плотнейших упаковок. Типы, положения и размеры пустот в плотнейших упаковках: октаэдрические и тетраэдрические пустоты. Плотные шаровые кладки: простая (примитивную) гексагональная (ПГ), простая (примитивная) кубическая (ПК), объемноцентрированная кубическая (ОЦК). Плотность упаковки и плотность

кристаллического вещества. Примеры структур, построенных на основе плотнейших упаковок.

Тема 2.4. Полиэдрический метод изображения кристаллических структур
Координационный полиэдр и координационное число. Примеры построения моделей кристаллических структур из правильных полиэдров. Координационные числа атомов и стехиометрический состав кристаллических структур.

Тема 2.5. Структурные типы кристаллических веществ

Кристаллохимическим характеристикам вещества. Структурная единица и структурный тип кристаллических веществ. Классификация кристаллических веществ. Структурные типы простых веществ. Структурный тип α -полония, меди, α -вольфрама (α -железа), магнезия, алмаза, графита. Структурные типы соединений АВ: хлорида натрия, хлорида цезия, сфалерита, вюртцита, никелина, киновари. Структурные типы соединений АВ₂: флюорита, антифлюорита, CdI₂, CdCl₂, молибденита, PdCl₂, рутила. Структуры типа АВХ₃ и АВ₂Х₄: перовскита, шпинели. Изоструктурные и изотипные вещества. Антиизоструктурные соединения. Гомеотипность.

Раздел 3. Методы исследования структуры кристаллических веществ

Тема 3.1. Физические методы изучения структуры кристаллов

Дифракционные методы: рентгенография, электронография, нейтронография. Оптическая и электронная микроскопия. Спектроскопические методы исследования.

Тема 3.2. Методы рентгенографии

Особенности рентгеновской дифрактометрии. Техника рентгеновской дифрактометрии. Методы получения дифракционной картины: метод вращения кристалла (метод монокристалла), метод Лауэ, метод порошка (метода Дебая Шеррера). Возможности различных методов и их практическое использование.

Факторы, определяющие дифракционную картину. Рентгенофазовый анализ: задачи и техника эксперимента. Качественный и количественный рентгенофазовый анализ. Методика анализа рентгенограммы. Идентификация веществ по набору межплоскостных расстояний. Базы дифракционных данных. Рентгеноструктурный анализ: задачи и техника эксперимента. Процедура установления кристаллической структуры. Индексирование рентгенограмм. Определение параметров кристаллической решетки.

Раздел 4. Факторы, определяющие структуру и состав кристаллических веществ

Тема 4.1. Атом в структуре кристалла

Основные характеристики атома в кристаллической структуре: координаты атома, межатомные расстояния и размеры, координационные числа. Электроотрицательность атома. Энергетическая константа иона. Ионный потенциал. Эффективный заряд атома в кристалле. Полярность атомов и ионов.

Тема 4.2. Радиусы атомов и ионов

Подходы к экспериментальному определению радиусов атомов и ионов. Орбитальные и эффективные радиусы атомов и ионов. Ионные, ковалентные, металлические и вандерваальсовы радиусы. Закономерности в изменении радиусов атомов и ионов. Зависимость радиуса атома от его электронного строения и координационного окружения. Соотношение между различными системами радиусов (орбитальными, ионными, атомными, слейтеровскими, кристаллохимическими (классическими), физическими). Эффективные и кристаллические (физические) ионные радиусы Р. Шэннона и Ч. Пруитта. Термохимические радиусы.

Тема 4.3. Факторы, определяющие химический состав и структуру вещества в кристаллическом состоянии

Основные принципы построения кристаллических структур. Основной закон кристаллохимии В. М. Гольдшмидта – В.С. Урусова. Факторы, определяющие структуру кристалла: геометрический фактор, фактор химической связи, термодинамический фактор. Кристаллохимические принципы строения кристаллов.

Тема 4.4. Межатомные взаимодействия и структура кристаллов

Способы описания химической связи в твёрдых телах. Классификация кристаллических структур на основе типов химической связи. Кристаллы ковалентные, ионные, металлические, молекулярные. Структурные свойства различных типов химической связи. Кристаллохимические условия устойчивости ионных кристаллов (правила Магнуса, Гольдшмидта, Полинга, О'Киффа). Критерии устойчивости структурных типов кристаллов с ковалентной связью. Гомодесмические и гетеродесмические структуры. Химическая связь и мотив структуры. Основные структурные мотивы: островные, цепочечные, слоистые, каркасные, координационные. Кристаллохимические особенности строения, свойства и условия образования природных силикатов и алюмосиликатов. Силикаты островные, кольцевые, цепочечные, ленточные, слоистые, каркасные. Структурный мотив и свойства кристаллических веществ. Химический состав и кристаллохимическая формула кристаллических веществ.

Тема 4.5. Термодинамический контроль устойчивости кристаллических структур

Термодинамические характеристики кристаллического состояния вещества. Энергия кристаллической решётки. Подходы к определению энергии кристаллической решётки (ЭКР). Значения ЭКР для кристаллов с различным типом химических связей. Расчёт энергии кристаллической решётки по ионной модели. Уравнение Борна-Ланде. Термодинамический подход для расчёта энергии кристаллической решётки и предсказания существования ионных кристаллов. Цикл Борна-Габер. Приближенные расчёты ЭКР по уравнениям Капустинского. Разрешённые и запрещённые ассоциации химических элементов в кристаллических структурах.

Раздел 5. Кристаллохимические явления

Тема 5.1. Полиморфизм и полиморфные превращения кристаллических структур

Полиморфизм и полиморфизм. Полиморфные модификации кристаллических структур. Структурная классификация полиморфных превращений. Реконструктивные и деформационные фазовые переходы. Термодинамическая факторы полиморфных превращений.. Морфотропия.

Тема 5.2. Твёрдые растворы. Изоморфизм.

Типы твёрдых растворов. Твёрдые растворы замещения, внедрения, вычитания. Способность к образованию твердых растворов. Определение типа твердого раствора по рентгеноструктурным данным. Изоморфизм. Типы изоморфизма и механизмы изоморфного замещения. Стехиометрические и нестехиометрические соединения. Условия и генетические факторы изоморфизма. Правила полярности изоморфизма. Правила Ретгерса и Вегарда.

Раздел 6. Описательная кристаллохимия неорганических и органических веществ

Тема 6.1. Кристаллические структуры простых веществ неметаллов

Кристаллические структуры благородных газов. Кристаллические структуры простых веществ, образуемых элементами VII группы (галогенами). Кристаллические структуры простых веществ, образуемых элементами VI группы (халькогенами). Кристаллические структуры простых веществ, образуемых элементами V группы. Кристаллические структуры простых веществ, образуемых элементами IV группы. Кристаллические структуры бора.

Тема 6.1. Кристаллические структуры металлов и металлических сплавов

Распределение металлов по типам кристаллических структур. Сплавы металлов: сплавы-механические смеси, сплавы-твёрдые растворы, сплавы-химические соединения. Интерметаллические соединения. Упорядоченные фазы металлов. Фазы Лавеса. Электронные соединения (фазы Юм-Розери). Фазы Цинтля. Металлические фазы внедрения.

Тема 6.3. Молекулярные кристаллы

Химическая связь в молекулярных кристаллах. Остаточная (вандерваальсова) связь. Диполь-дипольные и ион-дипольные взаимодействия. Упаковка молекул в кристалле, правила Китайгородского. Разупорядочение в молекулярных структурах. Водородная связь. Молекулярные кристаллы типа AB_2 (CO_2 , $HgBr_2$, $HgCl_2$, H_2O). Молекулярные сульфиды (AsS , As_2S_3). Органические кристаллы (мочевина, тиомочевина, нафталин, этилен, алмазант, гексаметилентетрамин, йодоформ, триазид циануровой кислоты, гидрохинон).

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 УСП	Форма контроля знаний
		Лекции	Практические/ занятия	Семинарские занятия	Лабораторные занятия	Коллоквиум		
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						Тестирование на образовательном портале Educhem
2.1	Особенности кристаллического состояния вещества	1						Тестирование на образовательном портале Educhem
2.2	Описание кристаллического состояния с использованием элементов симметрии	2	2	2			2	Эвристическая беседа. Письменный отчёт. Аудиторная контрольная работа.
2.3	Описание кристаллического состояния с использованием теории плотнейших шаровых упаковок	2	2					Эвристическая беседа. Письменный отчёт. Аудиторная контрольная работа.
2.4	Полиэдрический метод изображения кристаллических структур	1						Тестирование на образовательном портале Educhem

2.5	Структурные типы кристаллических веществ	2	2 (ДОТ)	2		4		Эвристическая беседа. Письменный отчет по исследовательскому заданию. Коллоквиум
3.1	Физические методы изучения структуры кристаллов	1						Тестирование на образовательном портале Educhem
3.2	Методы рентгенографии	2	4 (ДОТ)				2	Эвристическая беседа Письменный отчет по исследовательскому заданию. Аудиторная контрольная работа
4.1	Атом в структуре кристалла	1						Тестирование на образовательном портале Educhem
4.2	Радиусы атомов и ионов	1						Эвристическая беседа. Тестирование на образовательном портале Educhem
4.3	Факторы, определяющие химический состав и структуру вещества в кристаллическом состоянии	2	2 (ДОТ)	2			2	Эвристическая беседа. Аудиторная контрольная работа
4.4	Межатомные взаимодействия и структура кристаллов	1						Эвристическая беседа.
4.5	Термодинамический контроль устойчивости кристаллических структур	1	2 (ДОТ)					Письменный отчет.
5.1	Полиморфизм и полиморфные превращения кристаллических структур	2	2					Тестирование на образовательном портале Educhem

5.2	Твёрдые растворы. Изоморфизм	2		2				Эвристическая беседа. Письменный отчет по исследовательскому заданию. Аудиторная контрольная работа.
6.1	Кристаллические структуры простых веществ неметаллов	1						Тестирование на образовательном портале Educhem
6.2	Кристаллические структуры металлов и металлических сплавов	2		2				Эвристическая беседа. Тестирование на образовательном портале Educhem
6.3	Молекулярные кристаллы	1						Тестирование на образовательном портале Educhem
	ИТОГО	28	16	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. Мычко, Д. И. Физико-химические основы геохимии: пособие / Д. И. Мычко. — Минск: БГУ, 2015. – 303 с.

Перечень дополнительной литературы

1. Филатов, С.К. Общая кристаллохимия : учебник / С.К. Филатов, С.В. Кривовичев, Р.С. Бубнова. – СПб.: Изд-во С.-Петербур. ун-та, 2018.–276 с.
2. Филатов, С. К. Систематическая кристаллохимия : учебник / С.К. Филатов, С.В. Кривовичев, Р.С. Бубнова. – СПб.: Изд-во С.-Петербур. ун-та, 2019. – 230 с.
3. Ерёмин, Н. Н. Неорганическая кристаллохимия. Книга 1. Фундаментальные основы и понятия: Учебное пособие /Н.Н. Ерёмин, Т.А. Ерёмина. – М.: «КДУ», «Университетская книга», 2018. – 394 с.
4. 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.
5. Вест, А. Химия твёрдого тела. Теория и приложения: В 2-х ч. Ч.1 / Пер. с англ. – М.: Мир, 1988. – 550 с.
6. Зоркий, П. М. Симметрия молекул и кристаллических структур / П. М. Зоркий ; под ред. М. А. Порай-Кошица. – Москва : Изд-во МГУ, 1986. – 232 с.
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. Кристаллография: учеб. пособие к практ. занятиям по кристаллографии / Е. М. Нуриева, А. А. Ескин. – Казань : Казан. ун-т, 2017. – 94 с.
9. Пенкаля, Т. Очерки кристаллохимии / Т. Пенкаля ; пер. с пол. В. В. Макарского ; под ред. В. А. Франк-Каменецкого. – Ленинград : Химия, Ленинградское отд-ние, 1974. – 496 с. : ил.
10. Порай-Кошиц, М. А. Основы структурного анализа химических соединений / М. А. Порай-Кошиц. – М.: Высшая школа, 1987.
11. Солодовников, С. Ф. Основы кристаллохимии: Учеб. пособие / Новосибир. гос. ун-т. – Новосибирск, 2012. – 223 с.
12. Урусов, В. С. Кристаллохимия. Краткий курс: Учебник / В.С. Урусов, Н.Н. Ерёмин. – М.: Издательство Московского университета, 2010. – 256 с.

13. Уэллс А. Структурная неорганическая кристаллохимия: В 3 т. – М.: Мир, 1987.
14. Храмов, А. С., Назипов Р. А. Рентгеноструктурный анализ оликристаллов. Ч. V. Краткий терминологический словарь: Учеб.-метод. пособие для студ. физич. фак. – Казань, 2009. – 72 с.
15. Шаскольская, М. П. Кристаллография : учеб. пособие для студ. высших технических учеб. заведений / М. П. Шаскольская. – Изд. 2-е, перераб. и доп. – Москва : Высшая школа, 1984. – 375 с.
16. Шрайвер, Д. 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.
17. Шрайвер, Д. 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.

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 промежуточной 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 в ходе проведения контрольных мероприятий текущей аттестации.

Примерные весовые коэффициенты, определяющие вклад текущей аттестации в отметку при прохождении промежуточной аттестации:

Формирование отметки за текущую аттестацию (точки контроля):

– работа на семинарских и практических занятиях (опрос, письменный отчет по заданию) – 20 %;

II. Установить соответствие и запишите ответ в виде 1А2Б3В4Г

9. Между формулой симметрии и сингонией

Формула симметрии		Сингония	
1	L_66L_2	А	Кубическая
2	L_4PC	Б	Гексагональная
3	$3L_23PC$	В	Тетрагональная
4	L_1	Г	Ромбическая
5	$4L_33L_2$	Д	Примитивная
6	L_66L_27PC	Е	Моноклиная

А. 1Б2В3Г4Д5А6Б; Б. 1А2Б3В4Г5Д6Е; В. 1В2А3Д4Б5Е6Б;
 Г. 1Г2Д3Е4А5Б6В; Д. 1Д2Е3А4В5Г6Б; Е. 1Е2Г3А4Б5В6Д

10. Между параметрами ячейки Браве и сингонией

	Параметры ячейки		Сингония
1	$a=b=c, \alpha=\beta=\gamma=90^\circ$	А	Триклинная
2	$a= b \neq c, \alpha=\beta=90^\circ, \gamma=120^\circ$	Б	Моноклиная
3	$a=b \neq c, \alpha=\beta=\gamma=90^\circ$	В	Ромбическая
4	$a \neq b \neq c, \alpha=\beta=\gamma=90^\circ$	Г	Тригональная
5	$a \neq b \neq c, \alpha=\gamma=90^\circ \neq \beta$	Д	Тетрагональная
6	$a \neq b \neq c, \alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	Е	Кубическая

11. Изобразите стереографическую проекцию точечных элементов для примитивной ячейки тетрагональной сингонии.

12. На рисунке кубической ячейки обозначьте следующие плоскости: (100), (010), (110), (111), (020), (202), (040), $(1\bar{1}0)$.

13. В кубической F -ячейке рассчитайте расстояние между плоскостями (100), (110), (200), (111). Параметр решётки принять равным 3,62 Å.

14. Расстояние между плоскостями с индексом Миллера (200) в кубической ячейке составляет 1,8080 Å. Определите постоянную решётки.

15. Ячейка Браве имеет форму прямоугольного параллелепипеда. Узлы расположены в его вершинах и на верхней и нижней гранях. Установите тип ячейки и укажите её параметры.

Форма контроля – Аудиторная контрольная работа

Тема 3.2. Методы рентгенографии

1. Кальций кристаллизуется в КПУ и имеет радиус, равный 2,23 Å.

А. Рассчитать первые шесть межплоскостных расстояний на для кристаллического кальция.

Б. Определить факторы повторяемости для первых двух линий на рентгенограмме.

В. Указать относительная интенсивность какой линии выше.

2. На рентгенограмме кристалла, относящегося к кубической сингонии и записанной на излучении с $\lambda = 1,54$ Å, наблюдаются отражения под углами (2θ , градусы): 44,508, 51,847, 76,372, 92,947, 98,449, 121,925.

А. Определить тип ячейки Браве этого кристалла (Р, I, F, А).

Б. Вычислить параметр ячейки (Å).

В. Нанести соответствующие плоскости на рисунок и указать их индексы.

3. Определить формулу гипотетического вещества $A_xB_yC_z$ 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.

4. Определить, к какому структурному типу (формула вещества) относятся элементарные ячейки со следующими координатами атомов:

а) 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 ; $\frac{1}{2}\frac{1}{2}0$; $\frac{1}{2}0\frac{1}{2}$; $0\frac{1}{2}\frac{1}{2}$

б) МХ:М 000 ; $\frac{1}{2}\frac{1}{2}0$; $\frac{1}{2}0\frac{1}{2}$; $0\frac{1}{2}\frac{1}{2}$

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

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

6. Металлический натрий кристаллизуется в структурном типе α -Fe (ОЦК) и имеет плотность $0,968$ г/см³. Определить кратчайшее межатомное расстояние Na–Na (нм) и атомный радиус натрия (нм).

Форма контроля – Аудиторная контрольная работа

Тема 4.3. Факторы, определяющие химический состав и структуру вещества в кристаллическом состоянии

1. По данным рентгенографии двойная соль KCl-NH₄Cl кристаллизуется в структурном типе NaCl и имеет размер элементарной ячейки, равный $6,42$ Å. Радиусы ионов K⁺, NH₄⁺, Cl⁻ соответственно равны $1,38$; $1,46$; $1,81$ (Å).

А. Рассчитать состав элементарной ячейки (формула)

Б. Плотность этих кристаллов

2. Нестехиометрический оксид железа (II) имеет плотность $2,98$ г/см³, а размер элементарной ячейки, $a = 5,34$ Å. 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 $1,38$, $0,69$, $1,33$ (Å).

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 установить, к какому структурному типу относятся кристаллы: MgO, если радиусы Mg²⁺ – $0,074$ нм; O²⁻ – $0,136$ 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. Предложить механизм для образования твердых растворов в системах:

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

б) $\text{Na}(\text{AlSi}_3\text{O}_8) \leftarrow \text{CaO} + \text{Al}_2\text{O}_3$;

в) $\text{FeS} \leftarrow \text{Fe}^{3+}$.

Привести соответствующие уравнения изоморфных замещений и указать для каждого случая тип изоморфизма

Форма контроля – Аудиторная контрольная работа

Перечень вопросов к коллоквиуму по теме 2.5. Структурные типы кристаллических веществ

Перечень основных типов кристаллических структур, которые должны уметь описывать: α -Pb, α -Fe, α -W (Na, K), Cu (Au, Ag, Al, γ -Fe, Pt), сплавы медь-золото, Mg (α -Be, α -Co, β -Ca), Амаз (Si, Ge, β -Sn), лонсдейлит, α -графит, CsCl, NaCl, CaF₂ (флюорит), Li₂O (антифлюорит), ZnS (сфалерит), ZnS (вюрцит), Cu₂O, CaTiO₃, BN гексагональный, BN кубический, NiAs (никелин), троилит FeS, пирита FeS₂, халькопирита CuFeS₂, SiO₂ кристобалит, MgAl₂O₄ (шпинель), CdCl₂, CdI₂ (брусита Mg(OH)₂, H₂O (лёд), CO₂, фазы Лавеса, фазы Цинтля, фазы Юм-Розери, структуры силикатов (координационные, островковые, кольцевые, цепочечные, слоистые, каркасные).

План описания типа кристаллической структуры:

- тип кристаллической решётки (сингония, тип ячейки Браве);
- пространственная группа симметрии и позиционная симметрия атомов;
- параметры элементарной ячейки (линейные размеры и углы);
- формула соединения и число формульных единиц, приходящихся на элементарную ячейку;
- координаты атомов в ячейке;
- координационные числа всех атомов и координационные полиэдры, характер их сочленения, общий мотив структуры;
- тип упаковки и мотив заполнения пустот;
- плотность упаковки и плотность вещества;
- тип химических связей.

Примерная тематика семинарских и практических занятий

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

Семинар № 2. Структурные типы кристаллических веществ.

Семинар № 3. Факторы, определяющие химический состав и структуру вещества в кристаллическом состоянии

Семинар № 4. Твёрдые растворы. Изоморфизм.

Семинар № 5. Кристаллические структуры металлов и металлических сплавов

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

Практическое занятие № 2. Описание кристаллического состояния с использованием теории плотнейших шаровых упаковок.

Практическое занятие № 3. Структурные типы кристаллических веществ.

Практическое занятие № 4. Рентгенографические методы изучения кристаллических структур

Практическое занятие № 5. Использование рентгенографических данных для определения параметров кристаллических решеток, размеров атомов и плотности вещества.

Практическое занятие № 6. Факторы, определяющие химический состав и структуру вещества в кристаллическом состоянии.

Практическое занятие № 7. Термодинамический контроль устойчивости кристаллических структур.

Практическое занятие № 8. Полиморфизм и полиморфные превращения кристаллических структур.

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;
- использование 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; понимания информации как отправного, 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>

<https://educhem.bsu.by/course/view.php?id=495>

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. Стереографическая 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. Пространственная решётка кристалла. Элементарная ячейка кристаллической решётки. 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. 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. Кристаллохимические условия устойчивости ионных кристаллов. Правила Полинга для ионных структур. (соотношение радиусов, валентные усилия связи).
29. Критерии устойчивости структурных типов кристаллов с ковалентной связью.
30. Кристаллическая структура металлов. Структурные типы меди, магния, α -железа. Полиморфизм металлов и распределение структурных типов между различными группами металлов Периодической системы химических элементов
31. Классификация интерметаллических соединений. Сверхструктуры, фазы Лавеса, фазы Цинтля, структуры типа арсенида никеля, электронные соединения (фазы Юм-Розери), фазы внедрения.
32. Кристаллические структуры неметаллов. VIIA, VIIA, VIA, VA, IVA, IIIA групп. Закономерности изменения кристаллических структур различных веществ в рамках каждой из рассматриваемых групп.
33. Семейство алмазоподобных соединений. Структурные типы сфалерита и вюртцита.
34. Молекулярные, слоистые, цепочечные и координационные соединения типа AB_2 с преимущественно ковалентным характером связи.
35. Кристаллические структуры молекулярных органических веществ.

36. Кристаллические структуры веществ с преимущественно ионным типом химической связи. Структурные типы соединений В (тип NaCl, CsCl). Структурные типы соединений АВ₂ (CaF₂, TiO₂). Структурный тип перовскита (АВО₃) и шпинели (АВ₂О₄).
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 смешиваемости.
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 5 от 4.12.2023.
2. Строение вещества	Неорганической химии	Изменения не требуются	Протокол 5 от 4.12.2023.

**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 № 5 от 4.12.2023 г.)

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

УТВЕРЖДАЮ
Декан факультета
к.х.н., доцент _____ А.В. Зураев