

БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

УТВЕРЖДАЮ



Ректор Белорусского
государственного университета

_____ А.Д.Король

23 сентября 2024 г.

Регистрационный № 1639/уч.

КРИСТАЛЛОХИМИЯ

Учебная программа учреждения образования
по учебной дисциплине для специальности:

6-05-0531 01 Химия (по направлениям)

Профилизации:

Химия (Зеленые химические технологии функциональных материалов и
систем)

Химия (Химико-аналитическая и экспертная деятельность)

6-05-0531 04 Химия (научно-педагогическая деятельность)

2024 г.

Учебная программа составлена на основе ОСВО 6-05-0531-01-2023, ОСВО 6-05-0531-04-2023, учебных планов №6-5.5-41/01 от 15.05.2023, №6-5.5-41/03 от 15.05.2023, №6-5.5-43/01 от 15.05.2023.

СОСТАВИТЕЛЬ:

Л.Ю. Садовская, доцент кафедры неорганической химии химического факультета Белорусского государственного университета, кандидат химических наук.

РЕЦЕНЗЕНТ:

А. И. Кулак, директор Института общей и неорганической химии Национальной академии наук Беларуси, доктор химических наук, профессор.

РЕКОМЕНДОВАНА К УТВЕРЖДЕНИЮ:

Кафедрой неорганической химии БГУ
(протокол № 2 от 19.09.2024);

Научно-методическим советом БГУ
(протокол № 2 от 19.09.2024)

Заведующий кафедрой



Д.В. Свиридов

ПОЯСНИТЕЛЬНАЯ ЗАПИСКА

Цели и задачи учебной дисциплины

Цель учебной дисциплины «Кристаллохимия» – обеспечить понимание студентами решения 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 модулю «Химия конденсированного состояния» компонента учреждения образования.

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 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 анализа групп симметрии кристаллического соединения;
- 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 – 90 часов, в том числе 40 аудиторных часов, из них: лекции – 20 часов, семинарские занятия – 8 часов, практические занятия – 8 часов, управляемая самостоятельная работа – 4 часа.

Трудоемкость учебной дисциплины составляет 3 зачетные единицы.

Форма промежуточной аттестации – экзамен.

СОДЕРЖАНИЕ УЧЕБНОГО МАТЕРИАЛА

Введение

Кристаллохимия как наука. Цели, задачи и методология кристаллохимии. История развития кристаллохимии. Предмет и задачи современной кристаллохимии, ее место в системе естественных наук. Проблемы и тенденции развития современной кристаллохимии. Понятие о структурно-химическом дизайне новых веществ и материалов.

Раздел 1. Основные способы описания и изображения кристаллического состояния вещества

Тема 1.1. 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 1.2. Описание кристаллического состояния с использованием элементов симметрии

Симметрия кристаллических структур. Точечные и трансляционные элементы симметрии, их обозначение. Операции симметрии. Математическое описание операций симметрии. Стереографические проекции точечных элементов симметрии. Обозначение групп симметрии – международная символика (символика Германа-Могена) и учебная символика (Браве). Вывод 32 кристаллографических точечных групп симметрии. Пространственные (открытые) группы симметрии. Обозначения групп симметрии.

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

Индексы узлов, рядов и плоскостей решетки. Единичные направления в кристаллах и их сочетание с элементами симметрии. Правильные системы точек.

Тема 1.3. 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.

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

Тема 1.4. Полиэдрический метод изображения кристаллических структур

Координационный полиэдр и координационное число.

Раздел 2. Основы рентгеноструктурного анализа

Тема 2.1. Дифракционные методы исследования

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

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

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 2.2. Методы рентгенографии

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

Метод Лауэ. Область использования метода. Вид лауэграммы. Практические возможности метода Лауэ.

Метод вращающегося кристалла. Область использования метода. Интенсивность рентгеновского дифракционного отражения и ее составляющие. Структурный фактор. Фактор атомного рассеяния, аномальное рассеяние.

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

Раздел 3. Факторы, определяющие структуру и состав кристаллических веществ

Тема 3.1. 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 3.2. 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. Влияние типа химической связи на характер кристаллической структуры.

Тема 3.3. 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.

Тема 3.4. Основные категории кристаллохимии

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

Раздел 4. Основные типы кристаллических структур

Тема 4.1. 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 4.2. 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.. Структурные типы вюрцита и сфалерита. Тройные и четверные алмазоподобные соединения. Молекулярные (структура СО₂, HgBr₂), слоистые (структурные типы HgI₂, PbI₂, Mg(OH)₂), цепочечные (тип SiS₂) и координационные структуры соединений типа АВ₂ (SiO₂ –кристобалит, тридимит, кварц).

Тема 4.3. Структурные типы бинарных соединений АВ и АВ₂ с преимущественно ионным характером связи

Кристаллохимические условия устойчивости ионных кристаллов (правила Полинга для ионных структур). Структурные типы NaCl и CsCl. Производные структуры от типа NaCl. Структурные типы рутила и флюорита. Структурные типы АВХ₃ (перовскит) и АВ₂Х₄ (шпинель). Сегнето- и анти-сегнетоэлектрические свойства веществ с искаженной структурой перовскита.

Фактор толерантности. Нормальные и обращённые шпинели. Ферриты и их техническое значение.

Тема 4.4. Молекулярные структуры

Остаточная (вандерваальсова) связь. Диполь-дипольные и ион-дипольные взаимодействия. Водородная связь. Упаковка молекул в кристалле. Разупорядочение в молекулярных структурах. Понятие о жидких кристаллах. Структура льда, гидратов, неорганических кислот и других водородносвязанных соединений. Соединения включения, клатраты, супрамолекулярные соединения. Органические кристаллы

Тема 4.5. Структурные типы силикатов и алюмосиликатов

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

Тема 4.6. 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

Очная форма получения высшего образования с применением дистанционных образовательных технологий (ДОТ)

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
	Введение	1						
1.1.	Особенности кристаллического состояния вещества	1	1					Устный опрос
1.2.	Описание кристаллического состояния с использованием элементов симметрии	2	1					Устный опрос
1.3.	Описание кристаллического состояния с использованием плотнейших шаровых упаковок.	2		2				Устный опрос
1.4.	Полиэдрический метод изображения кристаллических структур							
2.1.	Дифракционные методы исследования	1	2					Письменный отчет по практической работе
2.2.	Методы рентгенографии	1	2				2	Контрольная работа
3.1.	Кристаллохимические радиусы	1						

3.2.	Типы химической связи в кристаллах, их влияние	1		1				Тест на платформе educhem
3.3.	на структуру. Энергия кристаллической решётки (ЭКР).							
3.4.	Основные категории кристаллохимии	1		1				Устный опрос
4.1.	Металлические кристаллы	2		2				Устный опрос
4.2.	Ковалентные кристаллы	2	2					Устный опрос
4.3.	Структурные типы бинарных соединений АВ и АВ ₂ с преимущественно ионным характером связи	2		1			2	Контрольная работа
4.4.	Молекулярные структуры	1		1				Устный опрос
4.5.	Структурные типы силикатов и алюмосиликатов	2						
4.6.	Изоморфизм							
	ИТОГО	20	8	8			4	

ИНФОРМАЦИОННО-МЕТОДИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ

Основная литература

1. 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.
2. Мычко, Д. И. Физико-химические основы геохимии: пособие / Д. И. Мычко. - Минск: БГУ, 2015. – 303 с.

Дополнительная литература

1. Каратаева, Т. П. Основы кристаллохимии: Учеб. пособие / Т.П. Каратаева. – Минск: БГУ, 2001. – 225 с.
2. 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.
3. 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.
4. Вест, А. Химия твёрдого тела. Теория и приложения: В 2-х ч. Ч.1 / Пер. с англ. – М.: Мир, 1988. – 550 с.
5. Кристаллография: учебное пособие к практическим занятиям по кристаллографии / Е.М. Нуриева, А.А. Ескин. – Казань: Казан. ун-т, 2017. – 94 с.-
6. Зоркий, Петр Маркович. Симметрия молекул и кристаллических структур / П. М. Зоркий ; под ред. М. А. Порай-Кошица. - Москва : Изд-во МГУ, 1986. - 232 с.
7. Уэллс А. Структурная неорганическая кристаллохимия: В 3 т. - М.: Мир, 1987.
8. Егоров-Тисменко, Ю.К. Кристаллография и кристаллохимия: учебник / Ю.К. Егоров-Тисменко; под ред. академика В.С. Урусова. – М.: КДУ, 2005. – 592 с
9. 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
10. 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
11. Ворошилов, Ю.В. Основы кристаллографии и кристаллохимии. Рентгенография кристаллов: Учебник/ Ю.В. Ворошилов, В.И. Павлишин. – К.: КНТ, 2011. — 568 с.
12. 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.

13. 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.

14. Кузьмичева, Г.М. Основные разделы кристаллографии: Учебное пособие / Г. М. Кузьмичева. – М.: МИТХТ, 2000. – 85 с.

15. 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, письменный отчет по практической работе.

К устно-письменной форме диагностики компетенций относятся: устный опрос по аудиторным практическим упражнениям; устный опрос по домашним практическим упражнениям.

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.

Для формирования итоговой отметки по учебной дисциплине используется модульно-рейтинговая система оценки знаний студента, дающая возможность проследить и оценить динамику процесса достижения целей обучения. Рейтинговая система предусматривает использование весовых коэффициентов для текущей и промежуточной аттестации студентов по учебной дисциплине.

Формирование итоговой отметки в ходе проведения контрольных мероприятий текущей аттестации (примерные весовые коэффициенты, определяющие вклад текущей аттестации в отметку при прохождении промежуточной аттестации):

- работа на семинарских и практических занятиях (опрос) –35 %;
- выполнение тестов – 5 %;
- выполнение контрольной работы – 60 %.

Итоговая отметка по дисциплине рассчитывается на основе итоговой отметки текущей аттестации (рейтинговой системы оценки знаний) 40 % и экзаменационной отметки 60 %.

Примерный перечень заданий для управляемой самостоятельной работы студентов

Тема 2.2. Методы рентгенографии

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.

1. 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.

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

Б. Вычислить параметр ячейки (Å).

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

2. 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.

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

а) $\text{MX}:\text{M } \frac{1}{2}00; 0\frac{1}{2}0; 00\frac{1}{2}; \frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}?$

$\text{X } 000; \frac{1}{2}\frac{1}{2}0; \frac{1}{2}0\frac{1}{2}; 0\frac{1}{2}\frac{1}{2}$

б) $\text{MX}:\text{M } 000; \frac{1}{2}\frac{1}{2}0; \frac{1}{2}0\frac{1}{2}; 0\frac{1}{2}\frac{1}{2}$

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

4. Используя радиусы ионов Na и Cl, рассчитать (А) плотность кристаллического NaCl. $R(\text{Na}^+) = 0,116 \text{ нм}$, ($\text{КЧ}=6$); $R(\text{Cl}^-) = 0,167 \text{ нм}$ ($\text{КЧ}=6$). 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 – контрольная работа)

Тема 4.3 Структурные типы бинарных соединений АВ и АВ₂ с преимущественно ионным характером связи

1. Нестехиометрический оксид железа (II) имеет плотность $2,98 \text{ г/см}^3$, размер элементарной ячейки, $a=5,34 \text{ Å}$. Относительные атомные массы: Fe 55,84, O 16. Определить: А. формулу этого оксида, Б. Мольную долю в нем железа (III), В. Число катионных вакансий в элементарной ячейке

2. Изобразите элементарную ячейку для структурного типа сфалерита и укажите координаты базиса решетки. Привести формулу пространственной группы симметрии для данной ячейки.

3. Рассчитайте плотность кристаллического хлорида натрия, если $R(\text{Na}^+) = 0,116$ нм, $R(\text{Cl}^-) = 0,167$ нм. Изобразите структуру NaCl

4. Изобразите элементарную ячейку и опишите структурный тип вюрцита с указанием числа формульных единиц на ячейку и пространственной группы симметрии.

(Форма контроля – контрольная работа)

Примерная тематика семинарских занятий

Семинар № 1. Описание кристаллического состояния с использованием плотнейших шаровых упаковок

Семинар № 2. Факторы, влияющие на структуру кристаллических соединений (химическая связь, ЭКР, радиусы)

Семинар № 3. Металлические кристаллы

Семинар № 4. Ионные и молекулярные кристаллы

Примерная тематика практических занятий

Практическое занятие № 1. Кристаллическое состояние вещества. 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. Ковалентные кристаллы.

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;
- 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; понимания информации как отправного, а не конечного пункта критического мышления.

Методические рекомендации по организации самостоятельной работы обучающихся

В процессе организации самостоятельной работы студентов на аудиторных занятиях используются как традиционные (выполнение заданий с консультациями преподавателя), так и инновационные (работа в группах, анализ реальных экспериментальных данных, выполнение эвристических заданий и др.) формы и методы работы. Задания УСР по учебной дисциплине составляются с учетом индивидуальной подготовки студентов и могут быть представлены на разном уровне: от заданий, формирующих знания по изученному учебному материалу на уровне узнавания, к заданиям, формирующим компетенции на уровне воспроизведения, и далее к заданиям, формирующим компетенции на уровне применения полученных знаний.

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, информационные ресурсы):

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. Симметрия кристаллов и способы описания кристаллов по симметрии
6. Открытые и закрытые операции симметрии, соответствующие им элементы симметрии, их изображение и символика. Стереографическая проекция элементов симметрии.
7. Определение элементов симметрии внешней формы и внутреннего строения кристаллических структур.
8. Точечные и пространственные группы симметрии. Формула группы симметрии (в учебной символике). Распределение групп симметрии по классам и сингониям.
9. Элементарные ячейки пространственных решеток. Типы решёток Браве. Симметрия пространственных решеток. Характеристика кристаллических решеток по категориям, сингониям и группам симметрии.
10. Базис, метрика, число формульных единиц элементарной ячейки.
11. Межплоскостные расстояния и индексы плоскостей (индексы Миллера)
12. Теория плотнейших шаровых упаковок (ПШУ).

13. Кубическая и гексагональная плотнейшие упаковки, соответствующие им элементарные ячейки.
14. Пустоты в плотнейших упаковках, их положение в кристаллических решетках и размеры.
15. Кристаллические структуры, которые можно описывать в терминах теории плотнейших упаковок
16. Дифракционные методы исследования, физические основы этих методов, их возможности и области использования
17. Принципы рентгеноструктурного анализа. Условия дифракции рентгеновских лучей (условия Вульфа-Брегга, условия Лауэ).
18. Методы рентгенографии. Метод Лауэ. Метод вращающегося кристалла. Метод Дебая-Шеррера (метод порошка)
19. Основы качественного и количественного фазового анализа.
20. Интенсивность интерференционных линий рентгенограммы и факторы её определяющие (структурный; тепловой; угловой; повторяемости; абсорбционный).
21. Индексирование рентгенограмм порошков. Определение типа ячейки Браве. Измерение параметров кристаллической решетки.
22. Рентгеновский анализ металлических твердых растворов. Рентгеновский метод определения типа твердого раствора.
23. Использование результатов рентгеноструктурного анализа для определения координат атомов в элементарной ячейке кристаллической структуры
24. Химическая связь и кристаллическая структура. Зонная теория твердого тела. Интерметаллические соединения
25. 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);)
26. Правила Полинга для ионных структур. (соотношение радиусов, валентные усилия связи)
27. Кристаллическая структура металлов. Структурные типы меди, магния, α -железа. Полиморфизм металлов и распределение структурных типов между различными группами металлов Периодической системы химических элементов
28. Классификация интерметаллических соединений. Сверхструктуры, фазы Лавеса, фазы Цинтля, структуры типа арсенида никеля, электронные соединения (фазы Юм-Розери), фазы внедрения
29. 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.

30. Семейство алмазоподобных соединений. Структурные типы сфалерита и вюртцита.

31. Молекулярные, слоистые, цепочечные и координационные соединения типа AB_2 с преимущественно ковалентным характером связи.

32. Кристаллические структуры молекулярных органических веществ.

33. Кристаллические структуры веществ с преимущественно ионным типом химической связи.

34. Структурные типы соединений AB (тип $NaCl$, $CsCl$). Структурные типы соединений AB_2 (CaF_2 , TiO_2). Структурный тип перовскита (ABX_3) и шпинели (AB_2X_4).

35. Кристаллические структуры силикатов (координационные, островковые, кольцевые, цепочечные, слоистые, каркасные),

36. Твердые растворы (внедрения, замещения). Факторы, определяющие структуру твердого раствора. Механизм образования твердых растворов. Требования к компонентам, образующим твердые растворы.

37. Изоморфизм. Условия изоморфизма. Типы изоморфизма. Эмпирические правила изоморфной смесимости.

38. Основные категории теоретической кристаллохимии и соотношения между ними: структурный тип кристалла, изоструктурность, антиизоструктурность, изотипия, гомеотипия, морфотропия, политипия.

39. Полиморфизм, Полиморфные превращения, Классификация полиморфных превращений по структурному признаку.

ПРОТОКОЛ СОГЛАСОВАНИЯ УЧЕБНОЙ ПРОГРАММЫ УО

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 2 от 19.09.2024.
2. Строение вещества	Неорганической химии	Изменения не требуются	Протокол 2 от 19.09.2024.

Заведующий кафедрой

(ученая степень, ученое звание)



(подпись)

Д.В. Свиридов
(И.О.Фамилия)

19. сентября 2024 г.

**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 № ____ от _____ 202_ г.)
(название кафедры)

Заведующий кафедрой

(ученая степень, ученое звание)

(И.О.Фамилия)

УТВЕРЖДАЮ

Декан факультета

(ученая степень, ученое звание)

(И.О.Фамилия)