

БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

УТВЕРЖДАЮ

Ректор Белорусского
государственного университета

_____ А.Д.Король

27 июня 2025 г.

Регистрационный № 3014/н.



КРИСТАЛЛОХИМИЯ

Учебная программа учреждения образования по учебной дисциплине для
специальностей:

7-07-0531-01 Фундаментальная химия

7-07-0531-02 Химия высоких энергий

2025 г.

Учебная программа составлена на основе ОСВО 7-07-0531-01-2023, ОСВО 7-07-0531-02-2023 и учебных планов: № 7-5.5-68/01, № 7-5.5-69/01 от 15.05.2023.

СОСТАВИТЕЛЬ:

Д.И.Мычко, доцент кафедры неорганической химии химического факультета Белорусского государственного университета, кандидат химических наук, доцент

РЕЦЕНЗЕНТ:

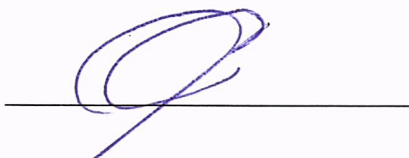
А.И.Кулак, директор Института общей и неорганической химии, академик НАН Беларуси, доктор химических наук, профессор.

РЕКОМЕНДОВАНА К УТВЕРЖДЕНИЮ:

Кафедрой неорганической химии БГУ
(протокол № 10 от 06.06.2025);

Научно-методическим советом БГУ
(протокол № 11 от 26.06.2025)

Заведующий кафедрой



Д.В.Свиридов

Т.В. Коваленко-Рабинская

ПОЯСНИТЕЛЬНАЯ ЗАПИСКА

Цели и задачи учебной дисциплины

Цель учебной дисциплины – 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 относится к модулю «Химия конденсированного состояния» государственного компонента (для специальности 7-07-0531-01 Фундаментальная химия)/ компонента учреждения образования (для специальности 7-07-0531-02 Химия высоких энергий)

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 7-07-0531 01 Фундаментальная химия:

Базовые профессиональные компетенции:

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.

для специальности 7-07-0531 02 Химия высоких энергий:

Специализированные компетенции:

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 распространённых 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;

иметь навык:

- использовать понятийный аппарат кристаллохимии;
- построения графиков точечных и простейших пространственных групп, методами определения правильных систем точек (орбит группы);
- анализа, формулировки и решения конкретных структурно-химических задач;
- обработки данных рентгенофазового и рентгеноструктурного анализа кристаллических веществ.

Структура учебной дисциплины

Дисциплина изучается в 5 семестре. В соответствии с учебным планом всего на изучение учебной дисциплины «Кристаллохимия» отведено **для очной формы** получения высшего образования – 102 часа, в том числе 60 аудиторных часов: лекции – 28 часов, практические занятия – 16 часов, семинарские занятия – 16 часов. **Из них:**

Лекции – 28 часов, семинарские занятия – 10 часов, практические занятия – 16 часов, управляемая самостоятельная работа (УСР) – 6 часов.

Трудоемкость учебной дисциплины составляет 3 зачётные единицы.

Форма промежуточной аттестации – экзамен.

СОДЕРЖАНИЕ УЧЕБНОГО МАТЕРИАЛА

Раздел 1. Введение

Тема 1.1 Кристаллохимия как наука

Цели, задачи и методология кристаллохимии. История развития кристаллохимии. Предмет и задачи современной кристаллохимии, её 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. Обозначения точечных групп симметрии. Пространственные группы симметрии. Сочетание элементов симметрии с трансляциями. Вывод пространственных групп симметрии. Графики пространственных групп симметрии

Тема 2.3 Пространственная решётка кристалла

Кристаллическая (пространственная) решётка кристалла. Параметры (метрика) решётки. Базис решётки. Типы решёток (ячеек) Браве и их характеристики. Распределение ячеек Браве по категориям и сингониям. Индексы узлов, рядов и плоскостей решётки. Межплоскостные расстояния. Связь между параметрами решётки, межплоскостными расстояниями и индексами плоскостей (индексами Миллера – hkl)

Тема 2.4 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 упаковки (шаровые кладки): простая (примитивная) гексагональная (ПГ), простая (примитивная) кубическая (ПК), простая объемноцентрированная кубическая (ОЦК). Плотность упаковки (коэффициент плотности упаковки) и плотность кристаллического вещества. Примеры структур, построенных на основе плотнейших упаковок

Тема 2.5 Полиэдрический метод изображения кристаллических структур

Моделирование строения кристаллов с использованием пространственных полиэдров. Координационный полиэдр и координационное число. Примеры построения моделей кристаллических структур из правильных полиэдров. Координационные числа атомов и стехиометрический состав кристаллических структур

Тема 2.6 Структурные типы кристаллических веществ

Кристаллохимическим характеристикам вещества. Структурная единица и структурный тип кристаллических веществ. Классификация кристаллических веществ. Структурные типы простых веществ: α -полония, меди, α -вольфрама (α -железа), магния, алмаза, графита. Структурные типы соединений АВ: хлорида натрия, хлорида цезия, сфалерита, вюрцита, арсенида никеля (никелина), сульфида ртути (киновари). Структурные типы соединений АВ₂:

фторида кальция (флюорита), антифлюорита, йодида кадмия / йодида свинца,

хлорида кадмия / хлорида свинца и молибденита (MoS₂), хлорида палладия и рутила. Структуры типа АВХ₃(перовскит) и АВ₂Х₄ (шпинели). Изоструктурность. Гомеотипия. Гетеротипные структуры

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. Модели возникновения дифракционной картины. 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. Интенсивность рефлексов и рассеяние рентгеновских лучей. Интенсивность рефлексов на дифрактограмме.

Число рефлексов на дифрактограмме. Форма (профиль) рефлексов.

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. Индицирование рентгенограмм. Определение параметров кристаллической решётки. Определение координат атомов. Построение карт электронной плотности

Раздел 4. Факторы, определяющие структуру и состав кристаллических веществ

Тема 4.1 Атом в структуре кристалла

Основные характеристики атома в кристаллической структуре: размеры атома и его координаты, координационные числа, электроотрицательность и эффективный заряд, межатомные расстояния. Энергетическая константа иона. Ионный потенциал. Поляризуемость 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. Слейтеровские и кристаллохимическими (классическими) радиусы. Эффективные и кристаллические (физические) ионные радиусы Р. Шэннона и Ч. Прюитта. Термохимические радиусы. Соотношение между различными системами радиусов. Закономерности в изменении радиусов атомов и ионов. Зависимость радиуса атома от его электронного строения и координационного окружения

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. Связь между характером межатомного взаимодействия, структурой и физическими свойствами кристаллов. Структурные свойства различных типов химической связи. Кристаллохимические условия устойчивости ионных кристаллов (правила 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-Габера. 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 политипизм. Полиморфные модификации кристаллических структур. Структурная классификация полиморфных превращений. Реконструктивные и деформационные фазовые переходы. Термодинамические факторы полиморфных превращений. Морфотропия.

Тема 5.2 Твёрдые растворы. Изоморфизм.

Типы твёрдых растворов. Твёрдые растворы замещения, внедрения, вычитания. Способность к образованию твёрдых растворов. Определение типа твёрдого раствора по рентгеноструктурным данным. Изоморфизм. Типы изоморфизма и механизмы изоморфных замещений. 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 галогенами. Кристаллические структуры простых веществ, образуемых элементами халькогенами. Кристаллические структуры простых веществ, образуемых пниктогенами. Кристаллические структуры простых веществ, образуемых элементами IV группы. Кристаллические структуры бора.

Тема 6.2 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, адамантан, гексаметилентетрамин, йодоформ, триазид циануровой кислоты, гидрохинон).

УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКАЯ КАРТА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Очная (дневная) форма получения высшего образования

Номер раздела, темы	Название раздела, темы	Количество аудиторных часов				Количество часов УСР	Форма контроля знаний
		Лекции	Практические занятия	Семинарские занятия	Лабораторные занятия		
1	2	3	4	5	6	7	8
1	Введение.						Эвристическая беседа
1.1	Кристаллохимия как наука	1					
2	Основные способы описания и изображения кристаллического состояния вещества						
2.1	Особенности кристаллического состояния вещества	1					
2.2	Описание кристаллического состояния с использованием элементов симметрии	2	2	2		2	Аудиторная контрольная работа №1
2.3	Пространственная решётка кристалла	2		2			Эвристическая беседа, тест
2.4	Описание кристаллического состояния с использованием теории плотнейших шаровых упаковок	1	2				Эвристическая беседа, тест
2.5	Полиэдрический метод изображения кристаллических структур	1					Эвристическая беседа
2.6	Структурные типы кристаллических веществ	2	2				Коллоквиум
3	Методы исследования структуры кристаллических веществ						

3.1	Физические методы изучения структуры кристаллов	1	2				Аудиторная контрольная работа №2
3.2	Методы рентгенографии	1	2			2	Письменный отчёт по исследовательскому заданию.
4	Факторы, определяющие структуру и состав кристаллических веществ						
4.1	Атом в структуре кристалла	0,5					Эвристическая беседа.
4.2	Радиусы атомов и ионов	0,5					Эвристическая беседа.
4.3	Факторы, определяющие химический состав и структуру вещества в кристаллическом состоянии	2	2	2		2	Аудиторная контрольная работа № 3
4.4	Межатомные взаимодействия и структура кристаллов	2					Эвристическая беседа.
4.5	Термодинамический контроль устойчивости кристаллических структур	2					Эвристическая беседа
5	Кристаллохимические явления						
5.1	Полиморфизм и полиморфные превращения кристаллических структур	2	2	2			Эвристическая беседа
5.2	Твёрдые растворы. Изоморфизм	2					Аудиторная контрольная работа №4
6	Описательная кристаллохимия неорганических и органических веществ						
6.1	Кристаллические структуры простых веществ неметаллов	2		2			Эвристическая беседа
6.2	Кристаллические структуры металлов и металлических сплавов	2	2				Эвристическая беседа
6.3	Молекулярные кристаллы	1					Эвристическая беседа
	ИТОГО	28	16	10		6	

ИНФОРМАЦИОННО-МЕТОДИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ

Основная литература

1. Мычко, Д. И. Основы кристаллохимии: учеб. пособие / Д. И. Мычко, Л. Ю. Садовская; под ред. Д. В. Свиридова. – Минск: БГУ, 2024. – 359 с.

Дополнительная литература

1. Бокий, Г. Б. Кристаллохимия / Г. Б. Бокий. – М. : Наука, 1971. – 400 с.
2. Булах, А. Г. Общая минералогия : учебник / А. Г. Булах. – СПб. : Изд-во С.-Петербур. ун-та, 1999. – 356 с.
3. Вест, А. Химия твердого тела. Теория и приложения : в 2 ч. / А. Вест ; пер. с англ. – М. : Мир, 1988. – Ч. 1. – 550 с.
4. Егоров-Тисменко, Ю. К. Кристаллография и кристаллохимия : учебник / Ю. К. Егоров-Тисменко ; под ред. В. С. Урусова. – М. : КДУ, 2005. – 592 с.
5. Еремин, Н. Н. Неорганическая кристаллохимия. Книга 1. Фундаментальные основы и понятия : учеб. пособие / Н. Н. Еремин, Т. А. Еремина. – М. : КДУ, 2018. – 394 с.
6. Зоркий, П. М. Симметрия молекул и кристаллических структур / П. М. Зоркий ; под ред. М. А. Порай-Кошица. – М. : Изд-во МГУ, 1986. – 232 с.
7. Ивашкевич, Л. С. Рентгенографические методы в химических исследованиях : учеб. пособие / Л. С. Ивашкевич, Т. П. Каратаева, А. С. Ляхов. – Минск : БГУ, 2001. – 131 с.
8. Каратаева, Т. П. Основы кристаллохимии : учеб. пособие / Т. П. Каратаева. – Минск : БГУ, 2001. – 225 с.
9. Картонова, Л. В. Основы кристаллографии : учеб. пособие / Л. В. Картонова. – Владимир : Владим. гос. ун-т им. А. Г. и Н. Г. Столетовых, 2016. – 80 с.
10. Картонова, Л. В. Основы материаловедения : учеб. пособие / Л. В. Картонова, В. А. Кечин. – Владимир : Владим. гос. ун-т им. А. Г. и Н. Г. Столетовых, 2014. – 179 с.
11. Мычко, Д. И. Физико-химические основы геохимии: пособие / Д. И. Мычко. — Минск: БГУ, 2015. – 303 с.
12. Нуриева, Е. М. Кристаллография : учеб. пособие / Е. М. Нуриева, А. А. Ескин. – Казань : Казан. ун-т, 2017. – 94 с.
13. Пенкаля, Т. Очерки кристаллохимии / пер. с польск. В. В. Макарского ; под ред. В. А. Франк-Каменецкого. – Л. : Химия, 1974. – 496 с.
14. Солодовников, С. Ф. Основы кристаллохимии : учеб. пособие / С. Ф. Солодовников. – Новосибирск : Новосиб. гос. ун-т, 2012. – 223 с.
15. Тамм, М. Е. Неорганическая химия : в 3 т. : учебник / М. Е. Тамм, Ю. Д. Третьяков ; под ред. Ю. Д. Третьякова. – М. : Академия, 2004. – Т. 1 : Физикохимические основы неорганической химии. – 240 с.

16. Третьяков, Ю. Д. Введение в химию твердофазных материалов : учеб. пособие / Ю. Д. Третьяков, В. И. Путляев. – М. : Изд-во Моск. ун-та: Наука, 2006. – 400 с.

17. Урусов, В. С. Кристаллохимия. Краткий курс : учебник / В. С. Урусов, Н. Н. Еремин. – М. : Изд-во Моск. ун-та, 2010. – 256 с.

18. Уэллс, А. Структурная неорганическая кристаллохимия : в 3 т. / А. Уэллс; пер. с англ. ; под ред. М. А. Порай-Кошица. – М. : Мир, 1987. – Т. 1. – 408 с. ; Т. 2. – 696 с. ; Т. 3. – 564 с.

Перечень рекомендуемых средств диагностики и методика формирования итоговой отметки

Для диагностики компетенций могут использоваться следующие средства текущей аттестации: эвристическая беседа; контрольная работа, тест; письменный отчёт по исследовательскому заданию; коллоквиум.

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):

- ответы на семинарских занятиях – 20 %;
- письменный отчёт по исследовательскому заданию – 10 %;
- ответы на коллоквиуме – 20 %;
- выполнение тестов и аудиторных контрольных работ – 50 %.

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

Примерный перечень заданий для управляемой самостоятельной работы

Тема 2.2. Описание кристаллического состояния с использованием элементов симметрии (2 часа)

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

2. На примере молекулы NH_3 продемонстрируйте применение теорем о сложении элементов симметрии для определения группы симметрии. Приведите формулы точечных групп симметрии, установленных для указанных молекул.

3. Запишите формулы симметрии и изобразите элементы симметрии на стереографической проекции молекулы CH_4 .

4. Изобразите стереографическую проекцию элементов симметрии кристалла, относящейся к группе L_66L_27PC .

5. Изобразите стереографическую проекцию элементов симметрии, характерных для правильных четырёхугольной пирамиды.

6. Изобразите многогранник, который соответствует кубической сингонии и приведите соответствующую ему формулу симметрии. Укажите параметры, систему координат, характерные элементы симметрии и единичные направления.

7. Ячейка Браве имеет форму прямоугольного параллелепипеда. Узлы расположены в его вершинах и на верхней и нижней гранях. Изобразите ячейку. Установите тип ячейки, базис, характерные элементы симметрии, сингонию.

(Форма контроля – аудиторная контрольная работа)

Тема 3.2. Методы рентгенографии (2 часа)

Используя приведённые данные таблицы рентгенографического исследования кристаллических веществ, определите:

1. Межплоскостные расстояния;
2. Тип элементарной ячейки (P, I, F);
3. Параметры элементарной ячейки (a, b, c α, β, γ), число формульных единиц в ячейке, базис ячейки (координаты атомов);
4. Вещество, которому принадлежит рентгенограмма;
5. Плотность вещества и плотность упаковки, число и размеры пустот в ней.

Приведите штрих-рентгенограмму. Зарисуйте: элементарную ячейку и отметьте позиции, занятые атомами (образец рис 2), указав каким химическим элементам они принадлежат; проекцию элементарной ячейки с указанием координат узлов и символы элементов, отвечающих им.

На изображении элементарной ячейки вещества заштрихуйте плоскости, которым соответствуют дифракционным отражениям и обозначьте их с помощью индексов Миллера.

(Форма контроля – письменный отчёт с его устной защитой).

Тема 4.3. Факторы, определяющие химический состав и структуру вещества в кристаллическом состоянии (2 часа)

1. Определите индексы в формуле соединения $A_mB_nX_p$, если координационные числа A и B по X равно четырём, а атом X тетраэдрически окружены двумя атомами A и двумя атомами B .

2. Используя правило о соотношении ионных радиусов, предскажите структурный тип кристаллов теллурида бария, оксида кальция, хлорид рубидия, йодида меди(I), селенида натрия, фторида кадмия(II).

3. Используя фактор толерантности, определите возможность LaAlO_3 и NaTaO_3 кристаллизоваться в структурном типе перовскита.

4. Запишите выражение для коэффициента толерантности (t) для структуры перовскита и решить, возможна ли реализация этого структурного типа для соединения KNiF_3 , 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).

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

6. Определите структурный мотив в минерале $\text{Ca}_3\text{Al}_2[\text{SiO}_4]_3$.

7. Предложите механизм для образования твёрдого раствора в системе $\text{Mg}_7[\text{Si}_8\text{O}_{22}](\text{OH})_2 \leftarrow \text{Mg}_5\text{Al}_2[\text{Al}_2\text{Si}_6\text{O}_{22}](\text{OH})_2$. Приведите соответствующие уравнение изоморфного замещения и укажите тип изоморфизма.

(Форма контроля – аудиторная контрольная работа).

Примерный перечень семинарских занятий

1. Кристаллическое состояние вещества. Описание кристаллического состояния с использованием элементов симметрии.
2. Пространственная решётка кристалла.
3. Факторы, определяющие химический состав и структуру вещества в кристаллическом состоянии
4. Кристаллохимические явления. Полиморфизм. Твёрдые растворы. Изоморфизм.
5. Кристаллические структуры неметаллов, металлов и металлических сплавов.

Примерный перечень практических занятий

1. Описание кристаллического состояния с использованием элементов симметрии.
2. Описание кристаллического состояния с использованием теории плотнейших шаровых упаковок.
3. Структурные типы кристаллических веществ.
4. Физические методы изучения структуры кристаллов
5. Использование рентгенографических данных для идентификации веществ, определения параметров кристаллических решёток, размеров атомов и плотности вещества.
6. Факторы, определяющие химический состав и структуру вещества в кристаллическом состоянии.
7. Кристаллохимические явления. Полиморфизм. Твёрдые растворы. Изоморфизм.
8. Кристаллические структуры металлов и металлических сплавов.

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 приёмы 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

Для организации самостоятельной работы студентов по учебной дисциплине используются современные информационные ресурсы: на образовательном портале educhem.bsu.by размещён 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 символика). 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-Шерерра (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. VIIIA, 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 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. Твёрдые растворы (внедрения, замещения). Факторы, определяющие структуру твёрдого 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 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)
Учебная дисциплина не требует согласования			

Заведующий кафедрой неорганической химии
член-корреспондент НАН Беларуси
доктор химических наук, профессор

_____ Д.В.Свиридов

06.06.2025

ДОПОЛНЕНИЯ И ИЗМЕНЕНИЯ К УЧЕБНОЙ ПРОГРАММЕ УО

на ____ / ____ учебный год

№ п/п	Дополнения и изменения	Основание

Учебная программа пересмотрена и одобрена на заседании кафедры
Неорганической химии (протокол № 10 от 6 июня 2025 г.)

Заведующий кафедрой
д.х.н., член-корр. НАН Беларуси

Д. В. Свиридов

УТВЕРЖДАЮ
Декан факультета
к.х.н., доцент

А. В. Зураев