

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ВОРОНЕЖСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
(ФГБОУ ВО «ВГУ»)

УТВЕРЖДАЮ

Заведующий кафедрой
материаловедения и индустрии наносистем
Академик РАН


В.М. Иевлев
подпись, расшифровка подписи

21.04.2022 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Б1.О.17 Кристаллохимия

- 1. Код и наименование направления подготовки/специальности: 04.05.01 – Фундаментальная и прикладная химия**
- 2. Профиль подготовки/специализация: Фундаментальная химия в профессиональном образовании**
- 3. Квалификация выпускника: специалист**
- 4. Форма обучения: очная**
- 5. Кафедра, отвечающая за реализацию дисциплины: кафедра материаловедения и индустрии наносистем**
- 6. Составители программы: Шаров Михаил Константинович, кандидат химических наук, доцент**
- 7. Рекомендована: Научно-методический совет химического факультета протокол № 3 от 19.04.2022**

отметки о продлении вносятся вручную)

8. Учебный год: 2023-2024

Семестр(ы): 3

9. Цели и задачи учебной дисциплины:

Изучение зависимости пространственного строения веществ, их физико-химических свойств в зависимости от типа химической связи, которая реализуется между структурными единицами вещества. В основу положены свойство симметрии и Периодический закон как основа химической систематики. Рассматривается классификация структурных типов и особенностей пространственного строения простых веществ, а также бинарных и сложных химических соединений. Изучаются особенности стереохимии комплексных соединений и металлорганических соединений. Серьезное внимание уделяется стереохимии и кристаллохимии наиболее перспективных функциональных материалов. Уделяется внимание изучению путей развития структурной химии, проблеме получения новых неорганических веществ с заранее заданными свойствами (полупроводники, ферриты, неорганические полимеры, жидкие кристаллы, нанотрубки, наноструктуры и т.п.).

10. Место учебной дисциплины в структуре ООП:

Блок 1, обязательная часть. Для успешного освоения данной дисциплины, студент должен предварительно изучить следующие дисциплины: Неорганическая химия. Данная дисциплина является предшествующей для дисциплин: Строение вещества; Структурный анализ и дифракционные методы исследования; Квантовая механика и квантовая химия.

11. Планируемые результаты обучения по дисциплине/модулю (знания, умения, навыки), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями) и индикаторами их достижения:

Код	Название компетенции	Код(ы)	Индикатор(ы)	Планируемые результаты обучения
ОПК-1	Способен анализировать и интерпретировать результаты химических экспериментов, наблюдений и измерений.	ОПК-1.1	Систематизирует и анализирует результаты химических экспериментов, наблюдений, измерений, а также результаты расчетов свойств веществ и материалов.	Знать: Теоретические основы проведения измерений структуры и свойств кристаллов. Уметь: Делать обоснованный выбор наиболее оптимальных методов измерений свойств кристаллических веществ. Владеть: Методами анализа результатов экспериментов, измерений, количественной оценки качества измерений свойств кристаллических веществ.
		ОПК-1.2	Предлагает интерпретацию результатов собственных экспериментов и расчетно-теоретических работ с использованием теоретических основ традиционных и новых разделов химии	Знать: Законы химии, физики, кристаллографии и кристаллохимии, необходимые для интерпретации собственных экспериментов при исследовании кристаллических веществ. Уметь: Делать обоснованный выбор различного аналитического оборудования для исследования свойств кристаллических веществ. Применять математические методы для интерпретации экспериментов. Владеть: Практическими навыками подготовки образцов кристаллических веществ, для проведения измерений. Навыками работы на аналитическом оборудовании, необходимом исследования

ОПК-3	Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники.	ОПК-1.3	Формулирует заключения и выводы по результатам анализа литературных данных, собственных экспериментальных и расчетно-теоретических работ химической направленности	<p>свойств и структуры кристаллов.</p> <p>Знать: Нормативно-методические требования к оформлению научных отчетов.</p> <p>Уметь: Обосновывать собственные заключения и выводы на основе фундаментальных законов химии, физики, кристаллографии, кристаллохимии, а также на основе ранее проведенных исследований и литературных источников.</p> <p>Владеть: Навыками поиска и обработки источников научной информации в виде печатных изданий и информационных ресурсов сети интернет.</p>
		ОПК-3.1	Применяет теоретические и полуэмпирические модели при решении задач химической направленности	<p>Знать: Математические модели, используемые при решении типовых задач кристаллографии, кристаллохимии и структурного анализа.</p> <p>Уметь: Интерпретировать результаты моделирования структуры и свойств кристаллов.</p> <p>Владеть: Навыками математического моделирования структуры и свойств кристаллов.</p>
		ОПК-3.2.	Использует стандартное программное обеспечение при решении задач химической направленности	<p>Знать: Назначение и возможности стандартных программных комплексов для обработки дифрактометрических измерений кристаллов.</p> <p>Уметь: Использовать программное обеспечение, для обработки результатов анализа структуры кристаллов.</p> <p>Владеть: Навыками работы с программными системами для обработки дифрактометрических измерений структуры кристаллов.</p>

12. Объем дисциплины в зачетных единицах/час — 3/108

Форма промежуточной аттестации – зачет с оценкой..

13. Трудоемкость по видам учебной работы

Вид учебной работы	Трудоемкость			
	Всего	По семестрам		
		№ семестра 1	№ семестра 2	...
Контактная работа	50		50	
в том числе: лекции	16		16	

	практические			
	лабораторные	34		34
	курсовая работа			
Самостоятельная работа		58		58
Промежуточная аттестация				
Итого:		108		108

13.1. Содержание дисциплины

п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела дисциплины	Реализация раздела дисциплины с помощью онлайн-курса, ЭУМК *
1. Лекции			
1.1	Основы кристаллографии	Элементы симметрии континуума. Категории и сингонии кристаллов. Стереографические проекции граней кристаллов. Точечные группы (классы) симметрии кристаллов. Простые и сложные формы кристаллических многогранников. Кристаллическая решетка. Элементы симметрии дисконтинуума. Плоские сетки и пространственные решетки Бравэ. Символы узлов, направлений и плоскостей в кристаллах. Пространственные группы симметрии кристаллов. Систематика точечных и пространственных групп симметрии кристаллов Шенфлиса и Германа-Могена (Международная система). Прямая и обратная решетки.	ЭУМК https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=9507
1.2	Основы кристаллохимии	Структурные типы простых веществ и бинарных соединений. Системы атомных и ионных радиусов. Взаимосвязь симметрии и физических свойств кристаллов (принцип Неймана). Взаимосвязь типа химической связи и кристаллической структуры. Дефекты в кристаллах и их влияние на физико-химические свойства. Основы дифрактометрического анализа структуры кристаллов.	ЭУМК https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=9507
2. Практические занятия			
1.1	Основы кристаллографии	Вывод формул симметрии кристаллических многогранников. Построение проекций элементов симметрии и граней кристаллов. Вывод точечных групп симметрии и соответствующих групповых множеств операций симметрии кристаллов на основе генераторов групп и теорем о сочетании элементов симметрии. Индексация узлов, направлений и плоскостей в кристаллах. Вывод некоторых пространственных групп симметрии.	ЭУМК https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=9507
1.2	Основы кристаллохимии	Описание структур некоторых простых веществ: металлов, полупроводников, диэлектриков. Описание структур бинарных соединений: сфалерита, вюртцита, флюорита, антифлюорита, каменной соли, рутила, кварца. Анализ влияния точечных дефектов на физико-химические свойства кристаллов с учетом особенностей области гомогенности бинарных соединений и твердых растворов. Расчет структуры кристаллов по результатам дифрактометрического анализа.	ЭУМК https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=9507

13.2. Темы (разделы) дисциплины и виды занятий

№	Наименование темы	Виды занятий (часов)
---	-------------------	----------------------

п/п	(раздела) дисциплины	Лекции	Практические	Лабораторные	Самостоятельная работа	Всего
1.1	Основы кристаллографии	10		20	40	70
1.2	Основы кристаллохимии	6		14	18	38

14. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

Для успешного освоения дисциплины, необходимо

- изучение основных и дополнительных литературных источников;
 - подготовка рефератов с целью более детального изучения вопросов, рассматриваемых на лекциях;
 - текущий контроль успеваемости в форме устного опроса.
- ЭУМК <https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=9507>

15. Перечень основной и дополнительной литературы, ресурсов интернет, необходимых для освоения дисциплины

а) основная литература:

№ п/п	Источник
1	Косенко Н.Ф. Кристаллография и кристаллохимия : учебное пособие / Косенко Н.Ф. — Москва : Ивановский ГХТУ, 2017 .— 240 с. // «Консультант студента» : электронно-библиотечная система. — <URL: https://www.studentlibrary.ru/book/ghu_038.html >
2	Басалаев Ю.М. Кристаллофизика и кристаллохимия : учебное пособие / Ю.М. Басалаев ; Министерство образования и науки Российской Федерации ; Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Кемеровский государственный университет» .— Кемерово : Кемеровский государственный университет, 2014 .— 403 с. // «Университетская библиотека online» : электронно-библиотечная система. — <URL: http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=278304 >.
3	Пугачев В.М. Кристаллохимия : учебное пособие / В.М. Пугачев .— Кемерово : Кемеровский государственный университет, 2013 .— 104 с. // «Университетская библиотека online» : электронно-библиотечная система. — <URL: http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=232461 >.

б) дополнительная литература:

№ п/п	Источник
4	Егоров-Тисменко Ю.К. Кристаллография и кристаллохимия / Ю.К. Егоров-Тисменко - М. : КДУ, 2010. - 588 с.
5	Чупрунов Е.В. Основы кристаллографии: учеб. для вузов. / Е. В. Чупрунов, А. Ф. Хохлов, М. А. Фаддеев. - М. : Физматлит, 2006. - 500 с.
6	Методы исследования атомной и структуры и субструктуры материалов / В.М. Иевлев [и др.] – Воронеж : Воронеж. гос. техн. ун-т, 2003. – 484 с.

в) информационные электронно-образовательные ресурсы (официальные ресурсы интернет)*:

№ п/п	Источник
7	http://www.elibrary.ru – научная электронная библиотека.
8	http://www.lib.vsu.ru – Зональная научная библиотека ВГУ.
9	http://geo.web.ru/db/msg.html?mid=1163834&uri=index.htm Электронный учебник по теории симметрии кристаллов. Авторы: Ю.К.Егоров-Тисменко, Г.П.Литвинская.

16. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы

№ п/п	Источник
1	Шаров М.К. Точечные группы симметрии кристаллов / М.К. Шаров, А.М. Самойлов, Б.М. Даринский, В.Ф. Кострюков // Учебное пособие для вузов. – Воронеж: Издательский дом ВГУ, 2016. – 38 с.
2	Самойлов А.М. Структурная химия и кристаллохимия : сборник задач и упражнений : учебно-методическое пособие для вузов : [для студ. 2 к. д/о, 4 к. в/о и магистров первого года обуч. хим. фак. направления 020100 - Химия, 020300 - Химия, физика и механика материалов; специальности 020101 - Фундаментальная и прикладная химия] / А.М. Са-

	мойлов, В.М. Иевлев ; Воронеж. гос. ун-т .— Электрон. текстовые дан. — Воронеж : Издательско-полиграфический центр Воронежского государственного университета, 2013 . // «Электронная библиотека ЗНБ ВГУ» : электронно-библиотечная система. — <URL:http://www.lib.vsu.ru/elib/texts/method/vsu/m13-181.pdf>.
3	Яценко О.Б. Кристаллохимия : учебное пособие / О.Б. Яценко, И.Г. Чудотворцев ; Воронеж. гос. ун-т .— Воронеж : ЛОП ВГУ, 2006-. Ч. 1: Введение в кристаллографию .— 2006 .— 39 с. : ил., табл. — Библиогр.: с. 37 .— // «Электронная библиотека ЗНБ ВГУ» : электронно-библиотечная система. — URL:http://www.lib.vsu.ru/elib/texts/method/vsu/sep06110.pdf>.
4	Яценко О.Б. Кристаллохимия : учебное пособие / О.Б. Яценко, И.Г. Чудотворцев ; Воронеж. гос. ун-т .— Воронеж : ЛОП ВГУ, 2006-. Ч. 2: Идеальные и реальные кристаллы .— 2006 .— 35 с. : ил., табл. — Библиогр.: с. 35 .— // «Электронная библиотека ЗНБ ВГУ» : электронно-библиотечная система. — <URL:http://www.lib.vsu.ru/elib/texts/method/vsu/sep06111.pdf>.

17. Образовательные технологии, используемые при реализации учебной дисциплины, включая дистанционные образовательные технологии (ДОТ), электронное обучение (ЭО), смешанное обучение):

ЭУМК <https://edu.vsu.ru/course/view.php?id=9507>

Проведение текущей аттестации и самостоятельной работы по отдельным разделам дисциплины.

18. Материально-техническое обеспечение дисциплины:

Ноутбук, мультимедийный проектор, экран, модели кристаллических структур

19. Оценочные средства для проведения текущей и промежуточной аттестаций

Порядок оценки освоения обучающимися учебного материала определяется содержанием следующих разделов дисциплины:

№ п/п	Наименование раздела дисциплины (модуля)	Компетенция(и)	Индикатор(ы) достижения компетенции	Оценочные средства
1.	Основы кристаллографии	ОПК-1 ОПК-3	ОПК-1.1 ОПК-1.2 ОПК-1.3 ОПК-3.1 ОПК-3.2	Контрольная работа 1 Контрольная работа 2
2.	Основы кристаллохимии	ОПК-1 ОПК-3	ОПК-1.1 ОПК-1.2 ОПК-1.3 ОПК-3.1 ОПК-3.2	Контрольная работа 3
Промежуточная аттестация форма контроля – зачет с оценкой				Перечень вопросов

20 Типовые оценочные средства и методические материалы, определяющие процедуры оценивания

20.1 Текущий контроль успеваемости

Контроль успеваемости по дисциплине осуществляется с помощью следующих оценочных средств:

Контрольная работа 1.

1. Докажите, что представленные ниже множества операций симметрии образуют группы:

а) $\{e, 2_1^1, 2_2^1, 2_3^1, 3^1, 3^2\}$

б) $\{e, m_1, m_2, m_3, 3^1, 3^2\}$.

2. Найти подгруппы в следующих групповых множествах точечных групп симметрии:

а) $\{e, 2_1^1, 2_2^1, 2_3^1, m_1, m_2, m_3, \bar{1}\}$

б) $\{e, 2_1^1, 2_2^1, 2_3^1, 3_1^1, 3_1^2, 3_2^1, 3_2^2, 3_3^1, 3_3^2, 3_4^1, 3_4^2\}$.

3. Составьте квадраты Кэли для следующих точечных групп симметрии:

а) C_{3v}

б) C_{3h} .

4. Получите групповые множества следующих точечных групп симметрии, используя их генераторы:

а) C_{4h}

б) C_{4v} .

5. Обоснуйте с помощью различных теорем возникновение операций инверсии и зеркальных поворотов в следующих точечных группах симметрии:

а) C_{6h}

б) O_h .

Контрольная работа 2.

1. Постойте проекцию граней и укажите их индексы Миллера для следующих кристаллических многогранников: а) тетрагональный тетраэдр, б) ромбоэдр, в) тригонритетраэдр, г) пирамидальный куб, д) ромбододекаэдр.

2. Какие простые формы кристаллических многогранников реализуются только как общие, или только как частные? Почему?

3. В каких некубических и кубических точечных группах возникают энантиоморфные кристаллические многогранники? Назовите эти многогранники?

4. Почему в четных группах D_n при равнонаклонном расположении грани к двум осям 2-го порядка простая форма остается общей?

5. Почему в частных положениях число точек в правильной системе и число граней в простой форме меньше, чем порядок соответствующей точечной группы? Приведите примеры.

Контрольная работа 3.

1. При растворении олова в PbTe образуются точечные дефекты типа Sn_{Pb} . Рассчитать с помощью правила Вегарда величину периода решетки и плотность твердого раствора $Pb_{0.60}Sn_{0.40}Te$, если период решетки PbTe равен 0.6462 нм, а период решетки SnTe равен 0.63 нм.

2. Углерод образует твердый раствор внедрения в ГЦК-железе (аустенит). Найти долю занятых углеродом междоузлий, если растворимость углерода составляет 2.14 масс. %.

3. Параметры тетрагональной ячейки мартенсита зависят от содержания углерода по уравнению: $c/a = 1 + 0,046 \cdot C$, где C - содержание углерода в массовых процентах. Определить параметры решетки мартенсита при максимальной растворимости углерода 2.14 масс. %. Период решетки первичного аустенита считать равным 0.363 нм.

4. Найти период решетки твердого раствора $PbTe_{1-x}Cl_x$ (где $x = 0.005$), если ионные радиусы имеют следующие величины $R(Te^{2-}) = 0.211$ нм, $R(Cl) = 0.181$ нм, $R(Pb^{2+}) = 0.112$ нм. Полагать, что хлор образует твердый раствор замещения.

5. При растворении серебра в сульфиде олова образуются точечные дефекты типа Ag_{Sn} . Как будет меняться соотношение интенсивностей рефлексов I_{111} / I_{200} (уменьшаться или увеличиваться) с

ростом содержания серебра? Ответ обоснуйте с помощью анализа структурного фактора интенсивностей рентгеновских рефлексов твердого раствора.

Описание технологии проведения.

Контрольные работы проходят в письменной форме. Время выполнения контрольной работы – 2 часа.

Требования к выполнению заданий (или шкалы и критерии оценивания).

Контрольная работа оценивается по количеству выполненных заданий, правильности и полноте выполнения каждого задания.

20.2 Промежуточная аттестация

Промежуточная аттестация по дисциплине осуществляется с помощью следующих оценочных средств: собеседование по билетам к зачету.

Перечень вопросов к зачету и порядок формирования КИМ:

1. Построить стереографические проекции общей и частных простых форм, а также проекции элементов симметрии точечных групп C_n . Показать соответствующие групповые множества.
2. Решетки Бравэ триклинной сингонии.
3. Построить стереографические проекции общей и частных простых форм, а также проекции элементов симметрии точечных групп S_n . Показать соответствующие групповые множества.
4. Решетки Бравэ моноклинной сингонии.
5. Построить стереографические проекции общей и частных простых форм, а также проекции элементов симметрии точечных групп C_{nh} . Показать соответствующие групповые множества.
6. Решетки Бравэ ромбической сингонии.
7. Построить стереографические проекции общей и частных простых форм, а также проекции элементов симметрии точечных групп C_{nv} . Показать соответствующие групповые множества.
8. Решетки Бравэ тригональной сингонии.
9. Построить стереографические проекции общей и частных простых форм, а также проекции элементов симметрии точечных групп D_n . Показать соответствующие групповые множества.
10. Решетки Бравэ тетрагональной сингонии.
11. Построить стереографические проекции общей и частных простых форм, а также проекции элементов симметрии точечных групп D_{nd} . Показать соответствующие групповые множества.
12. Решетки Бравэ гексагональной сингонии.
13. Построить стереографические проекции общей и частных простых форм, а также проекции элементов симметрии точечных групп D_{nh} . Показать соответствующие групповые множества.
14. Решетки Бравэ кубической сингонии.
15. Построить стереографические проекции общей и частных простых форм, а также проекцию элементов симметрии точечной группы T . Показать ее групповое множество.
16. Влияние типа химической связи на структуру кристаллов.
17. Построить стереографические проекции общей и частных простых форм, а также проекцию элементов симметрии точечной группы T_h . Показать ее групповое множество.
18. Кристаллические структуры бинарных соединений типа АВ.
19. Построить стереографические проекции общей и частных простых форм, а также проекцию элементов симметрии точечной группы T_d . Показать ее групповое множество.
20. Кристаллические структуры бинарных соединений типа A_2B .
21. Построить стереографические проекции общей и частных простых форм, а также проекцию элементов симметрии точечной группы O . Показать ее групповое множество.
22. Кристаллические структуры бинарных соединений типа AB_2 .
23. Построить стереографические проекции общей и частных простых форм, а также проекцию элементов симметрии точечной группы O_h . Показать ее групповое множество.
24. Полиморфизм и изоморфизм.
25. Винтовые оси и плоскости скользящего отражения. Примеры.
26. Типы точечных дефектов. Разупорядочение по Шоттки и Френкелю.
27. Теоремы о сочетании элементов симметрии.
28. Точечные дефекты при отклонении от стехиометрии.
29. Индексы Миллера атомных плоскостей и граней кристаллов.
30. Точечные дефекты при легировании и их влияние на свойства кристаллов.
31. Анизотропия кристаллов. Эквипотенциальные поверхности физических процессов на примере теплопроводности в кристаллах различных категорий.
32. Категории, сингонии и классы кристаллов.

-
33. Структурные типы алмаза и сфалерита.
 34. Структурные типы NaCl, CsCl и шпинели
 35. Взаимосвязь понятий – точечная группа, правильная система точек и простые формы кристаллических многогранников. Примеры.
 36. Донорные и акцепторные точечные дефекты. Примеры.
 37. Простые и сложные формы кристаллических многогранников как орбиты точечных групп симметрии. Примеры.
 38. Систематика классов симметрии кристаллов Шенфлиса и Германа-Могена (Международная система).
 39. Систематика пространственных групп симметрии кристаллов Шенфлиса и Германа-Могена (Международная система).
 40. Понятие о прямой и обратной решетке.
 41. Системы атомных и ионных радиусов.
 42. Структуры неорганических полимеров.
 43. Структуры жидких кристаллов.
 44. Структуры фуллеренов и нанотрубок.
 45. Квазипериодические кристаллы. Особенности их свойств. Примеры.

В каждом КИМ по 2 вопроса. Один из которых может являться практическим заданием..

Описание технологии проведения.

После получения студентом билета КИМ и бланка листа ответа, самостоятельно выполняются задания КИМ в письменной форме. Время подготовки 45 минут. При выставлении итоговой оценки по промежуточной аттестации учитывается активность и успешность работы студента на этапах текущего контроля успеваемости.

Требования к выполнению заданий, шкалы и критерии оценивания

отлично	Полный ответ на вопросы КИМ. Демонстрация навыков полученных знаний. Исчерпывающий ответ на дополнительные вопросы по тематике, не связанной с основными вопросами.
хорошо	Недостаточно полный ответ на вопросы КИМ, при понимании основных положений теории и умении их использовать. Допускаются незначительные ошибки, исправленные самостоятельно.
удовлетворительно	Недостаточно полный ответ на вопросы КИМ. Демонстрация знаний только основных понятий без углубления в детализацию.
неудовлетворительно	Нет ответа более чем на 50% учебного материала.