

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.21 Кристаллохимия

- 1. Код и наименование направления подготовки/специальности:** 04.03.01 Химия
- 2. Профиль подготовки/специализация:** Теоретическая и экспериментальная химия, Прикладная химия
- 3. Квалификация выпускника:** бакалавр
- 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 металлоорганических 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

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>оборудовании, необходимом исследования 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	№ семестра 3	...
Контактная работа	68			

в том числе:	лекции	34		34	
	практические	34		34	
	лабораторные				
	курсовая работа				
Самостоятельная работа		40		40	
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 элементов симметрии и 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, бинарных и тройных соединений. Системы атомных и ионных радиусов. Взаимосвязь симметрии кристаллов и физических свойств (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. Определение категории, сингонии и класса кристаллов. Вывод точечных групп симметрии и соответствующих групповых множеств операций симметрии кристаллов на основе генераторов групп и теорем о сочетании элементов симметрии. Построение стереографических проекций простых и сложных форм кристаллов. 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, вюрцита, 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

№ п/п	Наименование темы (раздела) дисциплины	Виды занятий (часов)				
		Лекции	Практические	Лабораторные	Самостоятельная работа	Всего
1.1	Основы кристаллографии	20	20		20	60
1.2	Основы кристаллохимии	14	14		20	48

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/ghtu_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. Самойлов, 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. Постройте 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.