

**МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ  
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ  
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
«ИНГУШСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

**Кафедра химии**



УТВЕРЖДАЮ

Проректор по учебной работе

Батыгов З.О.

«25» мая 20 18 г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ**

**КРИСТАЛЛОХИМИЯ**

**Факультет:** химико-биологический

**Направление подготовки /специальность:** 04.03.01. Химия

**Программа:** академический бакалавриат

**Квалификация (степень) выпускника:** бакалавр

**Форма обучения:** очная

МАГАС 20 18 г.



## 1. ЦЕЛИ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

**Целями освоения дисциплины «Кристаллохимия» являются:**

- изучение фундаментальных понятий, представлений и физико-химических моделей, используемых при описании структуры химических соединений в кристаллическом состоянии и в практическом использовании полученных знаний для решения конкретных научных и технических задач;
- формирование системных знаний, позволяющих глубже понять явления природы, теоретически осмыслить широкий круг химических явлений;
- развитие у студентов знаний и умений в решении практических вопросов в области кристаллохимии;
- развитие научного мировоззрения студентов.

## 2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОПОП ВО

Дисциплина «Кристаллохимия» относится вариативной части обязательных дисциплин и изучается в 5 семестре.

Дисциплина «Кристаллохимия» представляет собой теоретическую основу для изучения последующих курсов химического профиля – физической химии, коллоидной химии, химической технологии, физических методов исследования.

**Таблица 2.1.**

**Связь дисциплины «Кристаллохимия» с предшествующими дисциплинами и сроки их изучения**

Код дисциплины	Дисциплины, предшествующие дисциплине «Кристаллохимия»	Семестр
Б1.Б.5	Математика	1-4
Б1.Б.6	Физика	1-4
Б1.Б.7	Информатика	1-4
Б1.Б.8	Неорганическая химия	2,3
Б1.В.ОД.2	Квантовая химия	4

Таблица 2.2.

**Связь дисциплины «Кристаллохимия» с последующими дисциплинами и сроки их изучения**

Код дисциплины	Дисциплины, следующие за дисциплиной «Кристаллохимия»	Семестр
Б1.Б.10	Органическая химия	6,7
Б1.Б.11	Физическая химия	6,7
Б1.В.ОД.6	Физические методы исследования	6
Б1.В.ОД.10	Химическая технология	8
Б1.В.ДВ.3	Коллоидная химия	8

**В результате освоения дисциплины обучающийся должен:**

**Знать:**

- основы дифракционного метода исследования кристаллов;
- фундаментальные понятия, терминологию и символику кристаллохимии;
- общие принципы характеристики и интерпретации кристаллических структур;
- систематическую кристаллохимию;
- начала обобщенной кристаллохимии,

**Уметь:**

- использовать первичную кристаллоструктурную информацию для определения основных особенностей строения кристаллических веществ;
- решать задачи по кристаллохимии;
- осуществлять поиск необходимой кристаллоструктурной информации;
- самостоятельно формулировать задачу физико-химического исследования в химических системах;
- пользуясь полученными знаниями, уметь выбирать оптимальные пути и методы решения поставленных задач;
- проводить физико-химические исследования систем и процессов с использованием современных методов и приборов ФХМА;
- проводить физико-химические расчеты;
- пользоваться справочной литературой;
- графически отображать полученные зависимости;
- анализировать и обсуждать результаты физико-химических исследований;
- вести научную дискуссию.

**Владеть:**

- навыками организационных и технологических приемов в сфере своей профессиональной деятельности в области изучения кристаллов и твердых веществ.

**3. КОМПЕТЕНЦИИ ОБУЧАЮЩЕГОСЯ, ФОРМИРУЕМЫЕ В РЕЗУЛЬТАТЕ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ**

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование элементов следующих компетенций в соответствии с ФГОС ВО и ОПОП ВО по данному направлению подготовки:

а) общекультурных (ОК) – ОК-7

б) профессиональных (ПК) – ПК-6, ПК-12

**Таблица 3.1.**

**Матрица связи компетенций, формируемых на основе изучения дисциплины «Кристаллохимия», с временными этапами освоения ее содержания**

Коды компетенций (ФГОС)	Компетенция	Семестр изучения
ОК-7	Способность к самоорганизации и самообразованию	5
ПК-6	Владение навыками представления полученных результатов в виде кратких отчетов и презентаций	5
ПК-12	Способность принимать решения в стандартных ситуациях, брать на себя ответственность за результат выполнения заданий	5

#### 4. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Таблица 4.1.

Объем дисциплины и виды учебной работы

Вид учебной работы	Всего часов	5 семестр
Общая трудоемкость дисциплины	144	144
Аудиторные занятия	82	82
Лекции	32	32
Практические занятия	48	48
Контроль самостоятельной работы (КСР)	2	2
Самостоятельная работа студентов (СРС)	62	62

#### 5. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ, СТРУКТУРИРОВАННОЕ ПО ТЕМАМ (РАЗДЕЛАМ) С УКАЗАНИЕМ ОТВЕДЕННОГО НА НИХ КОЛИЧЕСТВА АКАДЕМИЧЕСКИХ ИЛИ АСТРОНОМИЧЕСКИХ ЧАСОВ И ВИДОВ УЧЕБНЫХ ЗАНЯТИЙ

Таблица 5.1.

Структура и содержание дисциплины

	Раздел дисциплины	Семестр	Неделя семестра	Виды учебной работы (час)				Формы контроля
				Лекции	Лабораторные работы	Самостоятельные работы		
1.	Модуль 1							
1.1.	Учение о симметрии	5	1,2	6	4	6		Задачи
1.2.	Симметрия кристаллической решетки	5	3,4	6	6	6		Опрос, задачи
1.3.	Рентенография	5	5,6	4	4	6		
2.	Модуль 2							
2.1.	Химические связи в кристаллах	5	7,8	2	2	6		Опрос

2.2.	Шаровые кладки и упаковки	5	9,10	2	4	6		Опрос
2.3.	Кристаллохимические радиусы	5	11,12	2	4	8		Опрос
2.4.	Изоморфизм и полиморфизм	5	13,14	2	2	8		Опрос
3.	Модуль 3							
3.1.	Кристаллохимия простых веществ	5	15,16	4	6	8		Опрос
3.2.	Шаровые кладки и упаковки	5	17,18	4	6	8		Опрос
	<b>Итого:</b>			<b>32</b>	<b>48</b>	<b>62</b>		

Таблица 5.2.

**Конкретизация результатов освоения дисциплины**

<i>ОК-7 Способность к самоорганизации и самообразованию</i>		
<b>Знать:</b> понятия «самоорганизация», «самоконтроль», «самообразование»; сущность и особенности воздействия познавательных процессов личности на самоорганизацию и самообразование; методы и приемы самообучения, способы физического совершенствования организма.	<b>Уметь;</b> использовать эти знания при решении социальных и профессиональных задач; для приобретения новых знаний и умений; определять пути взаимодействия в коллективе для достижения поставленных целей.	<b>Владеть:</b> навыками выстраивания собственного поведения с учетом окружения, ситуации.
<i>ПК-6 Владение навыками представления полученных результатов в виде кратких отчетов и презентаций</i>		
<b>Знать:</b> требования к оформлению рефератов, научных сообщений, статей для печати и т.п., способы представления полученных результатов.	<b>Уметь:</b> представлять полученные результаты в виде кратких отчетов (стендовые доклады, рефераты, статьи в периодической научной печати), в устном выступлении (доклады, презентации).	<b>Владеть:</b> навыками представления полученных результатов в виде кратких отчетов и презентаций, опытом участия в научных дискуссиях.
<i>ПК-12 Способность принимать решения в стандартных ситуациях, брать на себя ответственность за результат выполнения заданий</i>		
	<b>Уметь:</b> принимать реше-	

	<p>ния в стандартных ситуациях, брать на себя ответственность за результат выполнения заданий.</p>	
--	--	--

### Содержание дисциплины «Кристаллохимия»

#### Введение

1. Предмет и задачи кристаллохимии. Основные методы анализа и способы моделирования кристаллических структур
2. Основные аспекты кристаллохимии
3. Многообразие кристаллических структур

#### Общая кристаллохимия. Симметрия молекул.

1. Операции и элементы симметрии. Теоремы о сочетании закрытых элементов симметрии
2. Точечные группы симметрии. Международные символы и символы Шенфлиса
3. Системы эквивалентных позиций. Изогоны и изоэдры.
4. Единичные и полярные направления. Полярность и хиральность молекул

#### Симметрия кристаллов

1. Группы трансляций. Строение кристаллов. Симметрия решеток. Типы решеток. Кристаллографические системы координат. Элементарная ячейка
2. Открытые операции и элементы симметрии. Элементы симметричности. Пространственные группы симметрии.

#### Описание и систематика кристаллических структур

1. Число формульных единиц и рентгеновская плотность. Межатомные расстояния, валентные и торсионные углы. Среднеквадратичные плоскости. Координационное число и координационный полиэдр.
2. Структурные типы и изоструктурность. Простейшие структурные типы. Методы изображения и описания структур.
3. Семейства кристаллических структур. Основные, цепочечные, слоистые, каркасные и координационные структуры. Структурные классы.

#### Химические связи в кристаллах

1. Общая теория межатомных взаимодействий. Типы химической связи
2. Межатомные расстояния и прочность связи.
3. Систематика кристаллических структур по типу связи. Гомо- и гетеродесмические структуры.

#### Кристаллохимические радиусы атомов

1. Физический смысл, типы радиусов
2. Модели молекул. Принцип плотной упаковки

#### Энергия кристаллохимических структур

1. Основные термодинамические соотношения. Энергия ионных, ковалентных, металлических структур
2. Энергия молекулярных и других кристаллов.
3. Расчет оптимальной структуры кристаллов.

#### **Зависимость свойств кристаллохимических веществ от их структуры**

1. Описание физических свойств с помощью тензоров.
2. Зависимость электрических свойств от симметрии
3. Двулучепреломление, оптическая активность и энантиморфизм кристаллов.
4. Полупроводники, сверхпроводники, сегнетоэлектрики, ферриты, твердые электролиты. Проводимость органических молекулярных комплексов. Топохимические реакции в твердых телах.

#### **Реальные кристаллы**

1. Точечные дефекты. Дислокации. Мозаичность. Структура поверхности и твердых пленок.
2. Влияние дефектов кристаллов на их свойства. Доменные структуры.

#### **Систематическая кристаллохимия. Структуры простых веществ**

1. Основные структурные типы металлов (медь, магний и др.). Аномальные кристаллические структуры.
2. Структуры простых веществ – неметаллов.
3. Координация атомов. Изменение характера структуры по группам периодической системы.

#### **Структуры бинарных соединений**

1. Структуры интерметаллических соединений (AB). Семейства меди, магния,  $\alpha$ -железа.
2. Структуры соединений металлов с неметаллами (AX).
3. Шаровые упаковки и кладки. Ажурные структуры. Факторы, определяющие выбор структурного типа. Роль химической связи.
4. Особенности координации переходных и непереходных металлов. Кластеры.
5. Структуры соединений металлов (X<sub>2</sub>Y)

#### **Кристаллохимия силикатов**

1. Основные черты строения силикатов. Классификация структур. Зависимость физических свойств от строения.
2. Изовалентный и гетеровалентный изоморфизм в силикатах.
3. Природные и синтетические цеолиты, их структура и применение. Пентасилы.

#### **Органическая кристаллохимия**

1. Стереохимия органических молекул. Конформации. Симметрия. Конформационный полиморфизм.
2. Теория плотной упаковки молекул. Основные межмолекулярные контакты. Координационное число. Неуплотненные и плотнейшие молекулярные упаковки.
3. Специфические межмолекулярные контакты. Межмолекулярные водородные связи
4. Энергия межмолекулярного взаимодействия. Структурные подклассы и анизотропия свойств.
5. Термодинамические функции органического кристалла.
6. Структуры полимеров и биополимеров. Белки и полинуклеотиды.

## **6. ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ**

В процессе обучения используются традиционные образовательные технологии (лекции, семинары, практические работы) и активные инновационные образовательные технологии

1. Семинар в диалоговом режиме применяется в основном при обсуждении выступлений студентов с докладами (рефератами)

2. Групповой разбор результатов контрольных работ

3. Встречи с сотрудниками и руководителями профильных лабораторий и предприятий - потенциальными работодателями выпускников.

В целом при изучении курса активные и интерактивные формы проведения занятий составляют не менее 30% аудиторных занятий.

## 7. ПЕРЕЧЕНЬ УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ ОБУЧАЮЩИХСЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ (МОДУЛЮ)

7.1. Перечень-учебно-методического обеспечения для обучающихся по дисциплине:

1. М.П.Шаскольская. Кристаллография. М.: Высшая школа, 1984.
2. Бокий Г.Б. Кристаллохимия. М.: Наука, 1971.
3. Зоркий П.М. Симметрия молекул и кристаллических структур. М.: МГУ, 1986
4. Зоркий П.М. Задачник по кристаллохимии и кристаллографии. М.: МГУ, 1981.

7.2. Указания для обучающихся по освоению дисциплины

Таблица 7.1.. Содержание самостоятельной работы обучающихся

Номер раздела (темы)	Темы/вопросы, выносимые на самостоятельное изучение	Кол-во часов	Формы работы
1.	Основы рентгеноструктурного анализа.	12	опрос
2.	Динамика кристаллохимических структу.	12	опрос
3.	Изоморфизм и полиморфизм.	12	опрос
4.	Важнейшие структуры тернарных соединений.	12	опрос
5.	Строение конденсированных фаз с частичной упорядоченностью.	14	опрос

## **8. ОЦЕНОЧНЫЕ СРЕДСТВА ДЛЯ ТЕКУЩЕГО КОНТРОЛЯ УСПЕВАЕМОСТИ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ**

Фонды оценочных средств и критерии оценки представлены отдельно, как приложение к рабочей программе.

## **9. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ**

### **Основная литература**

1. М.П.Шаскольская. Кристаллография. М.: Высшая школа, 1984.
2. И.Нарай-Сабо. Неорганическая кристаллохимия. Будапешт, 1968.
3. Бокий Г.Б. Кристаллохимия. М.: Наука, 1971.
4. Зоркий П.М. Симметрия молекул и кристаллических структур. М.: изд-во Моск. Ун-та, 1986
5. Зоркий П.М. Задачник по кристаллохимии и кристаллографии. М.: Изд-во Московского ун-та, 1981.
6. Ванштейн Б.К. Современная кристаллография. Т.1,2. М.: Наука, 1979.
- 7.

### **Дополнительная литература**

1. Порай-Кошиц М.А. Основы структурного анализа химических соединений. М.: Высш.шк., 1982.
2. Китайгородский А.И. Молекулярные кристаллы. М.: Наука, 1971
3. Уэллс А. Структурная неорганическая химия: в 3т.М.: Мир, 1987-1988,Т.1,2,3.

### **Электронные источники информации**

1. Научная электронная база данных издательства Elsevier, <http://www.sciencedirect.com/>
2. Научная электронная база данных издательства ACS Publication, <http://pubs.acs.org/>
3. Научно-поисковая электронная база данных Reaxys. <https://www.reaxys.com/>
4. Научная электронная база данных издательства Springer, <http://www.springerlink.com/>

## **10. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ**

Требования к аудитории для лекционных и практических занятий: бесшумная светлая аудитория на 25 посадочных мест с доской.

Требования к аудитории для лабораторных занятий: лаборатория 60-70 м<sup>2</sup> с вытяжкой, общим и местным (над шестью рабочими столами) освещением, канализацией (холодная и горячая вода).

Требования к специализированному оборудованию: вытяжной шкаф, химически стойкая

раковина, шесть лабораторных столов со стойким покрытием, один стол преподавателя, двенадцать лабораторных стульев, доска, технические и аналитические весы.

**Теоретический курс:**

1. Лекции, презентации
2. Контрольные тесты.
3. Список вопросов для проведения коллоквиумов.
4. Таблицы- бумажный вариант большого формата.
5. Варианты заданий для контрольных работ.

**Лабораторный практикум:**

1. Тематика и описание лабораторных работ (специально разработанный и изданный лабораторный практикум для студентов химического направления).
2. Набор химических реактивов к каждой лабораторной работе.
3. Лабораторные установки, оборудование.