

Министерство науки и высшего образования РФ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«СИБИРСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Б1.О.03.02.08 ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ

Кристаллохимия

наименование дисциплины (модуля) в соответствии с учебным планом

Направление подготовки / специальность

04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

Направленность (профиль)

04.05.01.31 Физическая химия

Форма обучения

очная

Год набора

2021

Красноярск 2022

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Программу составили _____

д-р.хим.наук, профессор, Кирик С.Д.

должность, инициалы, фамилия

1 Цели и задачи изучения дисциплины

1.1 Цель преподавания дисциплины

Целью изучения дисциплины является: получение студентами фундаментальных понятий, представлений и физико-химических закономерностей, используемых при описании пространственной структуры химических соединений в кристаллическом состоянии, что даст возможность использовать полученные знания по атомно-молекулярному строению кристаллов для изучения физических и химических свойств кристаллических веществ.

1.2 Задачи изучения дисциплины

Задачами курса является: формирование у студентов знаний об основных особенностях кристаллической структуры химических соединений и их взаимосвязи с физико-химическими характеристиками, ознакомление студентов с современными методами структурного анализа.

1.3 Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине (модулю), соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы

| Код и наименование индикатора достижения компетенции | Запланированные результаты обучения по дисциплине |
|--|---|
| ОПК-5: Способен понимать принципы работы информационных технологий, использовать информационные базы данных и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности с учетом основных требований информационной безопасности | |
| ОПК-5.1: Использует современные ИТ-технологии при сборе, анализе и представлении информации химического профиля, соблюдая нормы и требования информационной безопасности | |
| ОПК-5.2: Использует стандартные и оригинальные программные продукты, при необходимости адаптируя их для решения задач профессиональной деятельности | |
| ОПК-5.3: Использует современные вычислительные методы для обработки данных химического эксперимента, моделирования свойств веществ (материалов) и процессов с их участием | |
| УК-1: Способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на | |

| основе системного подхода, вырабатывать стратегию действий | |
|--|--|
| УК-1.1: Анализирует проблемную ситуацию как систему, выявляя ее составляющие и связи между ними | |
| УК-1.2: Определяет пробелы в информации, необходимой для решения проблемной ситуации, и проектирует процессы по их устранению | |
| УК-1.3: Критически оценивает надежность источников информации, работает с противоречивой информацией из разных источников | |
| УК-1.4: Разрабатывает и содержательно аргументирует стратегию решения проблемной ситуации на основе системного и междисциплинарного подходов | |
| УК-1.5: Использует логико-методологический инструментарий для критической оценки современных концепций философского и социального характера в своей предметной области | |

1.4 Особенности реализации дисциплины

Язык реализации дисциплины: Русский.

Дисциплина (модуль) реализуется без применения ЭО и ДОТ.

2. Объем дисциплины (модуля)

| Вид учебной работы | Всего, зачетных единиц (акад. час) | е |
|--|---|---|
| | | 1 |
| Контактная работа с преподавателем: | 1,5 (54) | |
| занятия лекционного типа | 1 (36) | |
| практические занятия | 0,5 (18) | |
| Самостоятельная работа обучающихся: | 0,5 (18) | |
| курсовое проектирование (КП) | Нет | |
| курсовая работа (КР) | Нет | |

3 Содержание дисциплины (модуля)

3.1 Разделы дисциплины и виды занятий (тематический план занятий)

| № п/п | | Модули, темы (разделы) дисциплины | | Контактная работа, ак. час. | | | | | | | |
|--|--|---|--|--------------------------------|--------------------------|---|--------------------------|--|--------------------------|-------------------------------------|--------------------------|
| | | | | Занятия лекционного типа | | Занятия семинарского типа | | | | Самостоятельная работа, ак. час. | |
| | | | | | | Семинары и/или Практические занятия | | Лабораторные работы и/или Практикумы | | | |
| | | | | Всего | В том числе в ЭИОС | Всего | В том числе в ЭИОС | Всего | В том числе в ЭИОС | Всего | В том числе в ЭИОС |
| 1. Введение. Симметрия кристаллов | | | | | | | | | | | |
| | | 1. Предмет и задачи кристаллохимии. Закрытые операции и элементы | | 4 | | | | | | | |
| | | 2. Элементы симметрии зарытого типа. Обнаружение элементов симметрии в различных фигурах. Сложение элементов симметрии. Формулы симметрии. Точечные группы симметрии. Символика. Работа с виртуальными моделями кристаллов на компьютере. | | | | 2 | | | | | |
| | | 3. Стереографические проекции симметричного комплекса и граней кристаллов. Сетка Вульфа. Измерение угловых характеристик кристаллов. | | | | 1 | | | | | |
| | | 4. Подготовка к практическим занятиям и изучение теоретической части курса | | | | | | | 10 | | |
| | | 5. Пространственные группы симметрии. Решеточная кристаллография | | 4 | | | | | | | |

| | | | | | | | | |
|---|---|--|---|--|--|--|--|--|
| 6. Прimitives и приведенные ячейки. Ячейки Браве. Преобразование элементарных ячеек. Сингонии. Узловые плоскости. Индексирование кристаллографических плоскостей и направлений. | | | 2 | | | | | |
| 7. Общие кристаллохимические закономерности | 4 | | | | | | | |
| 8. Элементы симметрии открытого типа. Сочетание элементов симметрии. Пространственные группы симметрии. Геометрическое изображение. Правильная система точек. Общее и частное положение. Поиск элементов и установление симметрии в протяженных средах с помощью компьютера. | | | 2 | | | | | |
| 2. Основы рентгеноструктурного анализа | | | | | | | | |
| 1. Основные методы рентгенографии | 4 | | | | | | | |
| 2. Рентгеноструктурный анализ. Расчет рентгенограмм порошкообразных и металлических порошков. Расчет рентгенограмм простых и сложных химических соединений. Интерпретация порошковых рентгенограмм. Рентгенофазовый анализ. Расчет параметров кристаллической решетки для кубических веществ. | | | 2 | | | | | |
| 3. Кристаллоструктурная и дифракционная информация | 4 | | | | | | | |
| 3. Описание и систематика кристаллических структур | | | | | | | | |
| 1. Структуры простых веществ. Структуры бинарных соединений. Интерметаллиды. Сплавы. | 4 | | | | | | | |

| | | | | | | | | |
|--|----|--|----|--|--|--|----|--|
| 2. Запись кристаллических структур. Визуализация кристаллических структур на компьютере. Анализ кристаллических структур простых веществ на ЭВМ. Анализ кристаллических структур бинарных и тройных соединений на ЭВМ. | | | 2 | | | | | |
| 3. Структурные типы тернарных соединений. Строение | 4 | | | | | | | |
| 4. Островные структуры солей кислородсодержащих кислот. Структуры фосфатов и силикатов. Классификация структур силикатов | | | 1 | | | | | |
| 5. Органическая кристаллохимия. Структуры полимеров и биополимеров. Белки и полинуклеотиды. | 4 | | | | | | | |
| 6. Компьютерное построение и анализ кристаллических структур сложных химических соединений. Координационные соединения | | | 2 | | | | | |
| 7. Строение реальных кристаллов. Важнейшие типы дефектов. | 4 | | | | | | | |
| 8. Структуры органических соединений. | | | 2 | | | | | |
| 9. Структуры органических соединений. Строение реальных кристаллов. Важнейшие типы | | | 2 | | | | | |
| 10. Решение задач | | | | | | | 4 | |
| 11. Выполнение, оформление и подготовка к защите реферата | | | | | | | 4 | |
| 12. | | | | | | | | |
| Всего | 36 | | 18 | | | | 18 | |

4 Учебно-методическое обеспечение дисциплины

4.1 Печатные и электронные издания:

1. Егоров-Тисменко Ю. К. Кристаллография и кристаллохимия: учебник для вузов по спец. "Геология"(Москва: КДУ).
2. Якимов И. С., Дубинин П. С. Кристаллография, рентгенография и микроскопия: метод. указания к практ. занятиям для студентов напр. 150100 "Материаловедение и технология новых материалов"(Красноярск: СФУ).
3. Уманский Я. С., Скаков Ю. А., Иванов А. Н., Расторгуев Л. Н. Кристаллография, рентгенография и электронная микроскопия: учебник для вузов по специальностям "Физика металлов" и "Металловедение, оборудование и технология термической обработки металлов"(Москва: Металлургия).
4. Вайнштейн Б. К., Симонов В. И. Кристаллография и кристаллохимия: [сборник научных трудов](Москва: Наука).
5. Шаскольская М. П. Кристаллография: учебное пособие для технических вузов(Москва: Высшая школа).
6. Васильев Д. М. Физическая кристаллография: учебное пособие для металлургических специальностей вузов(Москва: Металлургия).
7. Шаскольская М.П. Кристаллография: Учеб. пособие для вузов(Москва: Высшая школа).

4.2 Лицензионное и свободно распространяемое программное обеспечение, в том числе отечественного производства (программное обеспечение, на которое университет имеет лицензию, а также свободно распространяемое программное обеспечение):

1. Пакет прикладных программ для визуализации и анализа результатов моделирования кристаллических структур:
2. Avogadro (свободная лицензия)
3. VESTA (свободная лицензия)
4. ArgusLab (свободная лицензия)
5. Пакет MatLab.
6. Сопровождение учебного процесса требует применение программного обеспечения, позволяющее создавать, редактировать и представлять текстовый и иллюстративный материал: MSOffice (MSWord, MSExcel, MSPowerPoint)

4.3 Интернет-ресурсы, включая профессиональные базы данных и информационные справочные системы:

1. 1 База данных минералов [Электронный ресурс]. — Режим доступа: <http://webmineral.com/>
2. 2 База данных кристаллических структур. [Электронный ресурс]. — Режим доступа: <http://www.crystallography.net/result.php>

3. 3 Федоров А.С., Квантовая механика и квантовая химия. Ч. 2. Проведение квантово - химических расчётов с использованием программного комплекса VASP 5.2: учебно-методическое пособие [Электронный ресурс] /А.С. Федоров, А.А. Кузубов, Н.С. Елисеева, З.И. Попов, М.А. Высотин. – Электрон.дан. – Красноярск: Сиб. федер. ун-т, 2013. [Электронный ресурс]. — Режим доступа: <http://lib3.sfu-kras.ru/ft/lib2/elib/b24/i586277.pdf?Z21ID=24116398305A76890D11E33A10127049&P21DBN=BOOK1&Z21MFN=%D0%91%D0%91%D0%9A%2024.5%2F%D0%9A321-586277>
4. 4 База данных кристаллических структур и минералов. [Электронный ресурс]. — Режим доступа: <http://rruff.geo.arizona.edu/AMS/amcsd.php>
5. 5 База данных структуры и свойств химических соединений. [Электронный ресурс]. — Режим доступа: <http://www.webelements.com>
6. 6 Кристаллографическая и кристаллохимическая База данных для минералов и их структурных аналогов [Электронный ресурс]. — Режим доступа: <http://database.iem.ac.ru/mincryst/>

5 Фонд оценочных средств

Оценочные средства находятся в приложении к рабочим программам дисциплин.

6 Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине (модулю)

Компьютерный класс с доступом машин в сеть Internet.

Лекционная аудитория с возможностью проецирования на мультимедийный экран презентации лекции и примеров работы с интерактивными базами данных.