

Министерство науки и высшего образования РФ  
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение  
высшего образования  
«СИБИРСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

**СОГЛАСОВАНО**

Заведующий кафедрой

Кафедра физической и  
неорганической химии  
(ФиНХ\_ХМФ)

наименование кафедры

подпись, инициалы, фамилия

«\_\_\_» \_\_\_\_\_ 20\_\_ г.

институт, реализующий ОП ВО

**УТВЕРЖДАЮ**

Заведующий кафедрой

Кафедра физической и  
неорганической химии  
(ФиНХ\_ХМФ)

наименование кафедры

канд.хим.наук, доцент Денисова  
Л.Т.

подпись, инициалы, фамилия

«\_\_\_» \_\_\_\_\_ 20\_\_ г.

институт, реализующий дисциплину

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ  
ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ  
КРИСТАЛЛОХИМИЯ**

Дисциплина Б1.О.03.02.08 ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ  
Кристаллохимия

Направление подготовки /  
специальность \_\_\_\_\_  
\_\_\_\_\_

Направленность  
(профиль) \_\_\_\_\_  
\_\_\_\_\_

Форма обучения

очная

Год набора

2019

Красноярск 2021

## РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

составлена в соответствии с Федеральным государственным образовательным стандартом высшего образования с учетом профессиональных стандартов по укрупненной группе

040000 «ХИМИЯ»

---

Направление подготовки /специальность (профиль/специализация)

04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия, специализация

---

04.05.01.31 Физическая химия

---

Программу  
составили

д-р.хим.наук, профессор, Кирик С.Д.

---

## 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

<b>УК-1:Способен осуществлять критический анализ проблемных ситуаций на основе системного подхода, выработать стратегию действий</b>
--

<b>ОПК-5:Способен использовать информационные базы данных и адаптировать существующие программные продукты для решения задач профессиональной деятельности с учетом основных требований информационной безопасности</b>
---

1.4 Место дисциплины (модуля) в структуре образовательной программы

Кристаллохимия базируется на сведениях получаемых студентами в курсах «Общая и неорганическая химия», «Физическая химия», «Квантовая механика и квантовая химия» и оказывает, в свою очередь обратное воздействие на более глубокое понимание указанных дисциплин, а также «Физические методы исследования». Рассмотренный в курсе материал является теоретической базой для изучения также курсов блока «Специальные дисциплины».

Дисциплина "Кристаллохимия" является обязательной дисциплиной

Химия твердого тела  
Химическое материаловедение

1.5 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)	Семестр
		7
<b>Общая трудоемкость дисциплины</b>	<b>2 (72)</b>	<b>2 (72)</b>
<b>Контактная работа с преподавателем:</b>	<b>1,5 (54)</b>	<b>1,5 (54)</b>
занятия лекционного типа	1 (36)	1 (36)
занятия семинарского типа		
в том числе: семинары		
практические занятия	0,5 (18)	0,5 (18)
практикумы		
лабораторные работы		
другие виды контактной работы		
в том числе: групповые консультации		
индивидуальные консультации		
иная внеаудиторная контактная работа:		
групповые занятия		
индивидуальные занятия		
<b>Самостоятельная работа обучающихся:</b>	<b>0,5 (18)</b>	<b>0,5 (18)</b>
изучение теоретического курса (ТО)		
расчетно-графические задания, задачи (РГЗ)		
реферат, эссе (Р)		
курсовое проектирование (КП)	Нет	Нет
курсовая работа (КР)	Нет	Нет
<b>Промежуточная аттестация (Зачёт)</b>		

### 3 Содержание дисциплины (модуля)

#### 3.1 Разделы дисциплины и виды занятий (тематический план занятий)

№ п/п	Модули, темы (разделы) дисциплины	Занятия лекционного типа (акад. час)	Занятия семинарского типа		Самостоятельная работа, (акад. час)	Формируемые компетенции
			Семинары и/или Практические занятия (акад. час)	Лабораторные работы и/или Практикумы (акад. час)		
1	2	3	4	5	6	7
1	Введение. Симметрия кристаллов	12	7	0	10	
2	Основы рентгеноструктурного анализа	8	2	0	0	
3	Описание и систематика кристаллических структур	16	9	0	8	
Всего		36	18	0	18	

#### 3.2 Занятия лекционного типа

№ п/п	№ раздела дисциплины	Наименование занятий	Объем в академических часах		
			Всего	в том числе, в инновационной форме	в том числе, в электронной форме
1	1	Предмет и задачи кристаллохимии. Закрытые операции и элементы	4	0	0
2	1	Пространственные группы симметрии. Решеточная кристаллография	4	0	0
3	1	Общие кристаллохимические закономерности	4	0	0

4	2	Основные методы рентгенографии	4	1	0
5	2	Кристаллоструктурная и дифракционная информация	4	0	0
6	3	Структуры простых веществ. Структуры бинарных соединений. Интерметаллиды. Сплавы.	4	1	0
7	3	Структурные типы тернарных соединений. Строение	4	1	0
8	3	Органическая кристаллохимия. Структуры полимеров и биополимеров. Белки и полинуклеотиды.	4	1	0
9	3	Строение реальных кристаллов. Важнейшие типы дефектов.	4	0	0
Всего			26	4	0

### 3.3 Занятия семинарского типа

№ п/п	№ раздела дисциплины	Наименование занятий	Объем в акад. часах		
			Всего	в том числе, в инновационной форме	в том числе, в электронной форме
1	1	Элементы симметрии закрытого типа. Обнаружение элементов симметрии в различных фигурах. Сложение элементов симметрии. Формулы симметрии. Точечные группы симметрии. Символика. Работа с виртуальными моделями кристаллов на компьютере.	2	0	0
2	1	Стереографические проекции симметричного комплекса и граней кристаллов. Сетка Вульфа. Измерение угловых характеристик кристаллов.	1	0	0

3	1	Примитивные и приведенные ячейки. Ячейки Браве. Преобразование элементарных ячеек. Сингонии. Узловые плоскости. Индицирование кристаллографических плоскостей и направлений.	2	0	0
4	1	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	0	0
5	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	0	0
6	3	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	0	0



7	3	Островные структуры солей кислородсодержащих кислот. Структуры фосфатов и силикатов. Классификация структур силикатов	1	0	0
8	3	Компьютерное построение и анализ кристаллических структур сложных химических соединений. Координационные соединения	2	0	0
9	3	Структуры органических соединений.	2	0	0
10	3	Структуры органических соединений. Строение реальных кристаллов. Важнейшие типы	2	0	0
Всего			18	0	0

### 3.4 Лабораторные занятия

№ п/п	№ раздела дисциплины	Наименование занятий	Объем в акад. часах		
			Всего	в том числе, в инновационной форме	в том числе, в электронной форме
Всего					

## 5 Фонд оценочных средств для проведения промежуточной аттестации

Оценочные средства находятся в приложении к рабочим программам дисциплин.

## 6 Перечень основной и дополнительной учебной литературы, необходимой для освоения дисциплины (модуля)

6.1. Основная литература			
	Авторы, составители	Заглавие	Издательство, год
Л1.1	Егоров-Тисменко Ю. К.	Кристаллография и кристаллохимия: учебник для вузов по спец. "Геология"	Москва: КДУ, 2010
Л1.2	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, 2012

6.2. Дополнительная литература			
	Авторы, составители	Заглавие	Издательство, год
Л2.1	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, 1982
Л2.2	Вайнштейн Б. К., Симонов В. И.	Кристаллография и кристаллохимия: [сборник научных трудов]	Москва: Наука, 1986
Л2.3	Шаскольская М. П.	Кристаллография: учебное пособие для технических вузов	Москва: Высшая школа, 1984
Л2.4	Васильев Д. М.	Физическая кристаллография: учебное пособие для металлургических специальностей вузов	Москва: Металлургия, 1981
Л2.5	Шаскольская М.П.	Кристаллография: Учеб. пособие для вузов	Москва: Высшая школа, 1984

### 7 Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины (модуля)

Э1	Кристаллография, рентгенография и микроскопия	<a href="http://lib3.sfu-kras.ru/ft/lib2/elib/b22/i-526778.pdf?Z21ID=001063AC70527689011063381093744B&amp;P21DBN=BOOK1&amp;Z21MFN=%D0%91%D0%91%D0%9A%2022.3%2F%D0%9A825-526778">http://lib3.sfu-kras.ru/ft/lib2/elib/b22/i-526778.pdf?Z21ID=001063AC70527689011063381093744B&amp;P21DBN=BOOK1&amp;Z21MFN=%D0%91%D0%91%D0%9A%2022.3%2F%D0%9A825-526778</a>
Э2	Квантовая механика и квантовая химия. Ч. 2. Проведение квантово - химических расчётов с использованием программного комплекса VASP 5.2	<a href="http://lib3.sfu-kras.ru/ft/lib2/elib/b24/i586277.pdf?Z21ID=24116398305A76890D11E33A10127049&amp;P21DBN=BOOK1&amp;Z21MFN=%D0%91%D0%91%D0%9A%2024.5%2F%D0%9A321-586277">http://lib3.sfu-kras.ru/ft/lib2/elib/b24/i586277.pdf?Z21ID=24116398305A76890D11E33A10127049&amp;P21DBN=BOOK1&amp;Z21MFN=%D0%91%D0%91%D0%9A%2024.5%2F%D0%9A321-586277</a>

### 8 Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины (модуля)

Самостоятельная работа студентов предусматривает подготовку студента к текущим аудиторным занятиям. Результаты этой подготовки проявляются в активности студента на занятиях, выполнении контрольных работ, написании реферата и других форм текущего контроля. Баллы, полученные студентом по результатам аудиторной работы, формируют рейтинговую оценку текущей успеваемости студента по дисциплине.

При самостоятельном изучении теоретического материала, при подготовке к занятиям, промежуточному контролю и при решении задач студенты используют литературу, рекомендованную

преподавателем.

При решении задач рекомендуется пользоваться примерами, разобранными на занятии, а также дополнительной литературой.

Темы рефератов выдаются преподавателями, ведущими практические занятия. При подготовке к защите рефератов студенты помимо рекомендованной и дополнительной литературы проводят литературный поиск, используя библиотеки и Интернет-ресурсы. Если тема доклада пересекается с темой курсовой работы, то в качестве иллюстративного материала рекомендуется использовать ее результаты. Обязательным условием при написании реферата является использование современной научной литературы, а именно статей и монографий, изданных не ранее, чем за последние пять лет, которые студенты ищут самостоятельно.

Публичная защита и обсуждение рефератов проводится во время аудиторного занятия.

Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся по дисциплине (модулю)

1 Кристаллография, рентгенография и микроскопия : учеб.-метод. пособие для самостоят. работы [Электронный ресурс] / И. С. Якимов, П. С. Дубинин. – Красноярск: Сиб. федерал. ун-т ; сост.:– 2012. — Режим доступа: <http://lib3.sfu-kras.ru/ft/lib2/elib/b22/i-526778.pdf?Z21ID=001063AC70527689011063381093744B&P21DBN=BOOK1&Z21MFN=%D0%91%D0%91%D0%9A%2022.3%2F%D0%9A825-526778>

2 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. — 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>

## **9 Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине (модулю) (при необходимости)**

### **9.1 Перечень необходимого программного обеспечения**

9.1.1	Пакет прикладных программ для визуализации и анализа результатов моделирования кристаллических структур:
9.1.2	Avogadro (свободная лицензия)

9.1.3	VESTA (свободная лицензия)
9.1.4	ArgusLab (свободная лицензия)
9.1.5	Пакет MatLab.
9.1.6	Сопровождение учебного процесса требует применение программное обеспечения, позволяющее создавать, редактировать и представлять текстовый и иллюстративный материал: MSOffice (MSWord, MSEXcel, MSPowerPoint)

## 9.2 Перечень необходимых информационных справочных систем

9.2.1	1 База данных минералов [Электронный ресурс]. — Режим доступа: <a href="http://webmineral.com/">http://webmineral.com/</a>
9.2.2	2 База данных кристаллических структур. [Электронный ресурс]. — Режим доступа: <a href="http://www.crystallography.net/result.php">http://www.crystallography.net/result.php</a>
9.2.3	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: <a href="http://lib3.sfu-kras.ru/ft/lib2/elib/b24/i586277.pdf?Z21ID=24116398305A76890D11E33A10127049&amp;P21DBN=BOOK1&amp;Z21MFN=%D0%91%D0%91%D0%9A%2024.5%2F%D0%9A321-586277">http://lib3.sfu-kras.ru/ft/lib2/elib/b24/i586277.pdf?Z21ID=24116398305A76890D11E33A10127049&amp;P21DBN=BOOK1&amp;Z21MFN=%D0%91%D0%91%D0%9A%2024.5%2F%D0%9A321-586277</a>
9.2.4	4 База данных кристаллических структур и минералов. [Электронный ресурс]. — Режим доступа: <a href="http://ruff.geo.arizona.edu/AMS/amcsd.php">http://ruff.geo.arizona.edu/AMS/amcsd.php</a>
9.2.5	5 База данных структуры и свойств химических соединений. [Электронный ресурс]. — Режим доступа: <a href="http://www.webelements.com">http://www.webelements.com</a>
9.2.6	6 Кристаллографическая и кристаллохимическая База данных для минералов и их структурных аналогов [Электронный ресурс]. — Режим доступа: <a href="http://database.iem.ac.ru/mincryst/">http://database.iem.ac.ru/mincryst/</a>

## 10 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.