

Державний вищий навчальний заклад
«Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника»
Кафедра теоретичної та прикладної хімії

“ЗАТВЕРДЖУЮ”

Проректор _____ Шарин С.В.

“ _____ ” _____ 2017 р.

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

КРИСТАЛОХІМІЯ

спеціальність _____ 102 - Хімія _____
(шифр і назва спеціальності)

спеціалізація _____
(назва спеціалізації)

інститут, факультет _____ Факультет природничих наук _____
(назва інституту, факультету)

Робоча програма навчальної дисципліни «Кристалохімія» для студентів спеціальності 102 Хімія. „___” _____ 2017 р. – 13 с.

Розробник:

Татарчук Т.Р., доцент, к.х.н., доцент кафедри теоретичної і прикладної хімії

Робоча програма затверджена на засіданні кафедри теоретичної і прикладної хімії факультету природничих наук

Протокол від “30” серпня 2017 р. № 1

Завідувач кафедри теоретичної і прикладної хімії

_____ (Миронюк І.Ф.)
(підпис)
“ ___ ” _____ 2017 р.

Схвалено методичною комісією факультету природничих наук

Протокол від “26” вересня 2017 р № 1

“ ___ ” _____ 2017 р.

Голова _____ (Шпарик Ю.С.)
(підпис)

©Т.Р.Татарчук, 2017 рік
©ДВНЗ «Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника», 2017 рік

Опис навчальної дисципліни

Найменування показників	Галузь знань, напрям підготовки, освітньо-кваліфікаційний рівень	Характеристика навчальної дисципліни	
		денна форма навчання	заочна форма навчання
Кількість кредитів – 3	Галузь знань 10 – Природничі науки (шифр і назва)	Нормативна	
Модулів – 3	Спеціальність: <i>102 Хімія</i>	Рік підготовки:	
Змістових модулів – 3		2-й	2-й
Індивідуальне науково-дослідне завдання (назва)		Семестр	
Загальна кількість годин - 90		3-й	3-й
		Лекції	
Тижневих годин для денної форми навчання: 6 аудиторних 2 самостійної роботи студента 4	Освітньо-кваліфікаційний рівень: <i>бакалавр</i>	20 год.	6 год.
		Практичні	
		10 год.	2 год.
		Самостійна робота	
		60 год.	82 год.
		Вид контролю: екзамен	

Співвідношення кількості годин аудиторних занять до самостійної і індивідуальної роботи становить:

для денної форми навчання – $30 / 60 = 0,5$

для заочної форми навчання – $8 / 82 = 0,1$

2. Мета та завдання навчальної дисципліни

Мета: ознайомити студентів з основними закономірностями утворення кристалічних структур, способами опису структури кристалів і моделями, які застосовуються для цього, експериментальними прийомами, що дозволяють одержувати відомості про структуру кристалів; ознайомити зі структурою простих речовин і найпоширеніших структурних типів подвійних і потрійних сполук.

Завдання: навчити студентів використовувати основні поняття кристалохімії, основні закони кристалохімії, відомості про структуру простих речовин та найпоширеніших подвійних та потрійних сполук у вирішенні конкретних задач хімії відповідно до сучасних потреб. Освоєння програми курсу повинне сформувати в студента чітке уявлення про зв'язок між специфікою кристалічної структури та характером хімічного зв'язку в ній.

У результаті вивчення навчальної дисципліни студент повинен

знати:

- історію становлення та розвитку кристалохімії;
- особливості кристалічного стану та методи дослідження кристалічної структури (оптичні, дифракційні, електронно-мікроскопічні, спектроскопічні та ін.), основні закономірності рентгеноструктурного аналізу;
- основи геометричної кристалографії (симетрія кристалів, операції симетрії, точкові групи симетрії);
- примітивні та складні просторові решітки (решітки Браве);
- властивості атомів у кристалах (форму та будову електронних оболонок; основні типи гібридизації; здатність атомів та іонів до поляризації та ін.);
- властивості йонного зв'язку та спосіб розрахунку його енергії (цикл Борна-Габера);
- властивості ковалентного зв'язку (насиченість, напрямленість, просторова орієнтація в залежності від типу гібридизації);
- властивості металічного, молекулярного та водневого зв'язку;
- гомодесмічні та гетеродесмічні структури;
- теорію щільних упаковок (кубічна та гексагональна щільні упаковки);
- основні категорії теоретичної кристалохімії (морфотропія, поліморфізм, ізоморфізм, поліпипізм);
- основні структури простих речовин (купрум, α -Fe, алмазу, графіту, магнію, вольфраму та ін.);
- основні структури бінарних сполук (структурний тип CsCl, NaCl, ZnS (сфалерит та вюрцит), BN, NiAs, CaF₂, Na₂O та ін.);
- основні структури потрійних сполук (шпінелі та перовскіту);
- кристалічну структуру інтерметалічних сполук, силікатів, боратів, органічних сполук, комплексних сполук, клатратних сполук).

вміти

- зображати елементи симетрії та записувати їх сукупність для даної кристалічної форми;
- описувати координаційні числа та координаційні поліедри у кристалах;
- використовувати теорію щільних упаковок для опису шаровості кристалічної структури;
- наводити приклади поліморфних речовин, ізоморфних сумішей;
- застосовувати правило Вегарда для знаходження залежності параметра кристалічної решітки ізоморфної суміші від хімічного складу.

Загальні компетентності (ЗК)

ЗК 1. Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу.

ЗК 2. Здатність вчитися і оволодівати сучасними знаннями.

ЗК 10. Здатність до пошуку, оброблення та аналізу інформації з різних джерел.

Спеціальні (фахові, предметні) компетентності (СК)

СК 1. Здатність застосовувати знання і розуміння математики та природничих наук для вирішення якісних та кількісних проблем в хімії.

СК 5. Здатність здійснювати сучасні методи аналізу даних.

Програмні результати навчання

ПРН6. Вміти застосувати принципи термодинаміки, квантової механіки для опису будови і властивостей атомів, молекул та речовин.

ПРН8. Вміти визначати хімічні, фізико-хімічні, фізичні, механічні та структурні властивості сполук.

ПРН9. Вміти класифікувати сполуки, давати їм назви, обґрунтовувати їх будову, прогнозувати їх властивості.

ПРН 13. Працювати з первинними та вторинними інформаційними ресурсами і системами.

3. Програма навчальної дисципліни

Вступ

Зародження основних ідей (XVI – XVIII ст.). Народження наукової кристалографії (кінець XVIII – поч. XX ст.). Кристалохімія у XX ст.

Предмет та завдання сучасної кристалохімії, її місце в системі природничих наук. Кристалографія. Стереохімічний та кристалоструктурний аспекти кристалохімії. Використання кристалохімічних даних для вивчення будови рідин і рідких кристалів. Узагальнена кристалохімія.

Кристалічна структура та способи її моделювання. Особливості кристалічного стану. Просторова решітка кристалу та елементарна комірка.

Методи дослідження кристалічної структури (оптичні, дифракційні, електронно-мікроскопічні, спектроскопічні та ін.).

Тема 1. Симетрія молекул і кристалів. Теорія точкових груп. Просторові групи.

Поняття симетрії. Операції симетрії (закриті та відкриті) і елементи симетрії. Центр симетрії (інверсії), поворотна вісь n порядку, площина симетрії, дзеркально-поворотні осі, інверсійні осі. Позначення елементів симетрії просторових решіток.

Поняття про групи симетрії. Точкові групи симетрії. 32 класи симетрії. Кристалографічні системи (сингонії).

Примітивні або прості решітки. Складні просторові решітки. Утворення об'ємноцентрованої, базоцентрованої та гранецентрованої кубічних решіток. 14 решіток Браве.

Просторові групи симетрії (230 груп Федорова). Використання для їх опису відкритих елементів симетрії: гвинтові осі, площини пересувного відображення.

Центросиметричні та нецентросиметричні речовини. Анізотропія кристалічних речовин.

Тема 2. Основи рентгеноструктурного аналізу.

Умови дифракції рентгенівських променів. Рівняння Вульфа-Брегга. Основні закономірності та завдання рентгеноструктурного та рентгенофазового аналізів. Основні експериментальні методи рентгеноструктурного аналізу (метод Лауе, метод обертання, гоніометричні методи, метод порошку), їх проведення, вимоги до об'єктів, способи реєстрації дифракційної картини та області застосування.

Тема 3. Хімічний зв'язок у кристалах.

Іонний зв'язок та енергія кристалічної решітки. Цикл Борна-Габера як експериментальний спосіб визначення енергії іонної решітки. Стала Маделунга.

Ковалентний зв'язок. Методи валентних зв'язків та молекулярних орбіталей для опису механізмів утворення ковалентного зв'язку. Основні характеристики ковалентного зв'язку: насиченість, напрямленість, кратність. Правило Юм-Розері. Енергія ковалентного зв'язку. Просторова орієнтація ковалентних зв'язків в залежності від типу гібридизації.

Донорно-акцепторний зв'язок як різновид ковалентного зв'язку. Механізм його утворення (на прикладі сфалериту ZnS , піриту FeS_2).

Зв'язки, проміжні між іонними і ковалентними. Ступінь іонності зв'язку, різні підходи до його оцінки. Принцип вирівнювання електронегативностей.

Металічний зв'язок. Ознаки металічного зв'язку. Зонна енергетична структура кристалу. Валентна зона, зона провідності, заборонена зона. Типові структури металів. Енергія взаємодії атомів у типовому металі. Перехід від металічного до ковалентного зв'язку.

Молекулярний зв'язок. Дисперсійні, орієнтаційні та індукційні сили взаємодії, їх енергії та вплив на властивості молекул. Молекулярні кристали.

Водневий зв'язок, його особливості. Структура льоду. Приклади кристалів з водневим зв'язком.

Кристали з проміжними типами зв'язку. Гомодесмічні та гетеродесмічні структури. Прості речовини та бінарні сполуки. Молекулярні структури. Залежність властивостей кристалів від типу та енергії хімічного зв'язку їх атомів.

Тема 4. Радіуси атомів та йонів у кристалах

Форма та будова електронних оболонок. Розподіл електронної густини в атомі. Електронні конфігурації елементів у періодичній системі. Орбітальні радіуси атомів та йонів. Потенціал йонізації та спорідненість до електрону. Валентний стан атома. Основні типи гібридизації. Орбітальна електронегативність. Здатність атомів та йонів до поляризації. Експериментальні методи її визначення. Кислотно-основні властивості атомів та йонів.

Атомні радіуси. Системи атомних радіусів Слейтера, Гольдшмідта, Полінга. Ковалентні та металічні радіуси.

Йонні радіуси. Ефективні йонні радіуси. Системи йонних радіусів. Закономірності зміни розміру йонів. Зв'язок розмірів атомів і йонів з їх місцезнаходженням у Періодичній системі елементів. Явище лантаноїдного стиснення.

Співвідношення між атомними та іонними радіусами. Ван-дер-ваальсові радіуси. Вплив електростатичного потенціалу на стиснення аніону та розширення катіону. Теорія кристалічного поля. Октаедричне та тетраедричне поле лігандів. Енергія стабілізації в кристалічному полі. Високоспіновий та низькоспіновий стан йонів.

Ефективні заряди атомів у кристалах, методи їх визначення. Поляризація іону (атому) в кристалі. Правило Фаянса.

Координаційні числа та координаційні поліедри. Різні типи координаційних поліедрів. Правило Магнуса-Гольдшміда, Полінга для іонних структур. Правила Юм-Розері, Грімма-Зомерфельда для ковалентних кристалів. Залежність координаційного числа від співвідношення радіусів катіона та аніона. Геометричні межі стійкості структур з різними координаційними числами.

Тема 5. Способи зображення структур кристалів

Розріджені моделі, щільно упаковані моделі та поліедричні моделі. Їх переваги та недоліки. Теорія щільних упаковок атомів. Кубічна та гексагональна щільні упаковки. Кількісне визначення щільності упаковки. Тетраедричні та октаедричні порожнини. Багатокульові упаковки. Способи позначення найщільніших кульових упаковок. Симетрія кульових упаковок.

Структурні одиниці кристалу. Мотив структури. Ізодесмічні (гомодесмічні) та анізодесмічні (гетеродесмічні) структури. Координаційні, каркасні, острівні, ланцюжкові, шаруваті мотиви. Гібридний мотив.

Поліедричне зображення кристалічних структур (метод Полінга-Белова). Кристалохімічні формули. Метод плоских атомних сіток (структурних мозаїк). Символи Шлефлі. Плоскі сітки Кеплера.

Тема 6. Основні поняття кристалохімії

Морфотропія, поліморфізм та ізоморфізм, співвідношення між ними. З історії вивчення морфотропії. Морфотропія силікатів. Структурна гомологія. Похідні та вироджені структури.

Поліморфізм. Історія відкриття. Класифікація поліморфізму. Монотропні та енантіотропні поліморфні перетворення. Фазові переходи та поліморфізм. Зміна симетрії при зміні температури та тиску. Координаційні правила поліморфізму.

Політипізм. Позначення деяких політипів. Політипна модифікація.

Ізоморфізм. Ізоморфні та ізоструктурні кристали. Ізоморфні суміші та тверді розчини. Класифікація ізоморфізму: ізовалентний та гетеровалентний. Типи ізовалентного заміщення. Ізодіморфізм. Гетеровалентне заміщення без зміни загальної кількості атомів та зі зміною. Ізоморфізм з відніманням та вкоріненням. Основні правила ізоморфізму. 15 % критерій Гольдшміда. Вельми досконалий, досконалий та обмежений ізоморфізм. Правило полярності Гольдшміда. Ізоморфні ряди Вернадського. Міжатомні відстані ізоморфних сумішей. Правило Вегарда. Правило Ретгерса. Правила ізоморфізму з сучасної точки зору. Ізоморфізм у природі та матеріалознавстві.

Тема 7. Кристалохімія хімічних сполук

Кристалохімічні закономірності в періодичній системі елементів Д.І.Менделєєва. Кристалічні структури простих речовин. Кристалічні структури металів. Кубічна об'ємноцентрована решітка (структура типу вольфраму). Кубічна гранецентрована решітка (структура типу міді). Гексагональна найщільніша упаковка (структура типу магнію). Кристалічні структури елементів А-підгруп. Використання правила Юм-Розері для визначення координаційних чисел. Особливість елементів IIIA та IVA-підгруп, які мають типові структури металів.

Структури неметалів та металоїдів. Інертні гази. Галогени. Халькогени. Елементи підгрупи нітрогену. Елементи підгрупи карбону. Структура алмазу, графіту. Напівпровідникові властивості силіцію.

Основні структури бінарних сполук. Структурний тип CsCl. Структурний тип NaCl. Похідні від цієї структури. Структурний тип сфалериту та вюрциту (ZnS). Структурний тип BN. Структурний тип NiAs. Особливості розташування ніколу та арсену у кристалічній решітці. Структура флюориту CaF₂ та її похідні. Структура антифлюориту Na₂O. Кристалохімія потрійних сполук. Структура перовскіту CaTiO₃. Структура шпінелі MgAl₂O₄.

3.1. Програма навчальної дисципліни

Змістовий модуль 1. Елементи симетрії кристалів

Лекції

Тема 1. Симетрія молекул і кристалів. Теорія точкових груп. Просторові групи (4 год.)

Тема 2. Основи рентгеноструктурного аналізу (2 год.).

Практичні заняття.

Тема 1. Операції та елементи симетрії (2 год.)

Тема 2. Класи симетрії. Решітки Браве (2 год.)

Змістовий модуль 2. Хімічний зв'язок. Теорія щільних упаковок

Лекції

Тема 3. Хімічний зв'язок у кристалах (2 год.).

Тема 4. Радіуси атомів та йонів у кристалах (2 год.).

Тема 5. Способи зображення структур кристалів (2 год.).

Практичні заняття.

Тема 3. Теорія щільних упаковок. (2 год.)

Тема 4. Розрахунок рентгенівської густини кристалів. (2 год.)

Змістовий модуль 3. Основні типи кристалічних структур

Лекції

Тема 6. Основні поняття кристалохімії (2 год.).

Тема 7. Кристалохімія хімічних сполук (6 год.).

Практичні заняття.

Тема 5. Кристалічні структури простих речовин. (2 год.)

4. Структура навчальної дисципліни

Назви змістових модулів і номери тем	Кількість годин							
	денна форма				заочна форма			
	усього	у тому числі			усього	у тому числі		
		лек	практ	с.р.		лек	практ	с.р.
Змістовий модуль 1. Елементи симетрії кристалів								
Тема 1. Симетрія молекул і кристалів. Теорія точкових груп. Просторові групи	16	4	2	10	14	1	1	12
Тема 2. Основи рентгеноструктурного аналізу	14	2	2	10	11	1		10
Змістовий модуль 2. Хімічний зв'язок. Теорія щільних упаковок								
Тема 3. Хімічний зв'язок у кристалах	12	2		10	15	1		14
Тема 4. Радіуси атомів та йонів у кристалах	14	2	2	10	15	1		14
Тема 5. Способи зображення структур кристалів	9	2	2	5	9			9
Змістовий модуль 3. Основні типи кристалічних структур								
Тема 6. Основні поняття кристалохімії	7	2		5	10	1		9
Тема 7. Кристалохімія хімічних сполук	18	6	2	10	16	1	1	14
Усього годин	90	20	10	60	90	6	2	82

5. Темі семінарських занять

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
1	Не передбачено	

6. Темі практичних занять

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
1	Тема 1. Операції та елементи симетрії	2
2	Тема 2. Класи симетрії. Решітки Браве. КР № 1.	2
3	Тема 3. Теорія щільних упаковок.	2
4	Тема 4. Розрахунок рентгенівської густини кристалів. КР №2	2
5	Тема 5. Кристалічні структури простих речовин.	2

7. Теми лабораторних занять

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
1	Не передбачено	

8. Самостійна робота

8.1. Денна форма навчання

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
1.	Симетрія молекул і кристалів. Теорія точкових груп.	10
2.	Основи рентгеноструктурного аналізу	10
3.	Хімічний зв'язок у кристалах	10
4.	Радіуси атомів та йонів у кристалах	10
5.	Способи зображення структур кристалів	5
6.	Основні поняття кристалохімії	5
7.	Кристалохімія хімічних сполук	10
	Разом	60

8.2. Заочна форма навчання

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
1.	Симетрія молекул і кристалів. Теорія точкових груп.	12
2.	Основи рентгеноструктурного аналізу	10
3.	Хімічний зв'язок у кристалах	14
4.	Радіуси атомів та йонів у кристалах	14
5.	Способи зображення структур кристалів	9
6.	Основні поняття кристалохімії	9
7.	Кристалохімія хімічних сполук	14
	Разом	82

9. Індивідуальні завдання

10. Методи навчання:

- інформаційно-рецептивний (словесні, наочні)
- репродуктивний
- проблемний
- частково-пошуковий (евристичний)
- пошуковий (дослідницький)

11. Методи контролю

- усний контроль і самоконтроль;

- письмовий контроль (самостійні роботи, контрольні роботи, реферати, самоконтроль та взаємоперевірка);
- тестовий контроль.

12. Розподіл балів, які отримують студенти

Матеріал курсу «Кристалохімія» відповідно до навчальної програми містить 7 тем. Оцінка роботи студентів проводиться за модульно-рейтинговою системою і включає такі види роботи над курсом: засвоєння теоретичного матеріалу, домашні завдання, контрольні роботи.

Поточне тестування та самостійна робота			Екзамен	Сума
Змістовий модуль 1 (КР № 1)	Змістовий модуль 2 (КР № 2)	Змістовий модуль 3 (КР № 3)	50 балів	100 балів
Теми 1-2	Теми 3 - 5	Тема 6 – 7		
15 балів	15 балів	20 балів		

Для зарахування модуля студент повинен набрати не менше 50 % балів за кожний модуль.

Шкала оцінювання: національна та ECTS

Сума балів за всі види навчальної діяльності	Оцінка ECTS	Оцінка за національною шкалою	
		для екзамену, курсового проекту (роботи), практики	для заліку
90 – 100	A	відмінно	зараховано
80 – 89	B	добре	
70 – 79	C		
60 – 69	D	задовільно	
50 – 59	E		
26 – 49	FX	незадовільно з можливістю повторного складання	не зараховано з можливістю повторного складання
0-25	F	незадовільно з обов'язковим повторним вивченням дисципліни	не зараховано з обов'язковим повторним вивченням дисципліни

13. Методичне забезпечення

1. Програма курсу «» для студентів спеціальності «Хімія».
2. Конспект лекцій.
3. Методичні вказівки до практичних занять та самостійної роботи студентів.

14. Рекомендована література

Базова

1. Татарчук Т.Р. Методичні вказівки до практичних занять із кристалохімії (для студентів денної та заочної форм навчання). – Івано-Франківськ: Прикарп. нац. ун-т ім.В.Стефаника, 2013. – 80 с.
2. Зиман З.З. Основи структурної кристалографії: Навчальний посібник для студентів вищих навчальних закладів. – Х.: ХНУ імені В.Н.Каразіна, 2008. – 212 с.
3. Куровець М.І. Кристалографія і мінералогія. Ч.1. Кристалографія мінералів. – Львів: Світ, 1996. – 236 с.
4. Павлишин В.І. Основи кристалохімії мінералів: Навч. посібник. – К.: ВЦ «Київський університет», 1998. – 320 с.

Допоміжна

5. Егоров-Тисменко Ю.К. Кристаллография и кристаллохимия: учебник /Ю.К.Егоров-Тисменко; под. ред. академика В.С.Урусова. – М.: КДУ, 2005. – 592 с.
6. Anthony R. West. Solid state chemistry and its applications /Second edition, student edition. (2014) 584 pages
7. R. J. D. Tilley. Crystals and crystal structure. John Wiley & Sons Ltd (2006) 270 p.

15. Інформаційні ресурси

Примітки:

1. Робоча програма навчальної дисципліни є нормативним документом вищого навчального закладу і містить виклад конкретного змісту навчальної дисципліни, послідовність, організаційні форми її вивчення та їх обсяг, визначає форми та засоби поточного і підсумкового контролів.
2. Розробляється лектором. Робоча програма навчальної дисципліни розглядається на засіданні кафедри, у методичній комісії факультету, інституту, підписується завідувачем кафедри, головою методичної комісії і затверджується проректором з науково-педагогічної роботи.

