

**ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ
«Кристаллохимия»**

**Рекомендуется для направления подготовки
020300.62 Химия физика и механика материалов.**

Квалификация (степень) выпускника - бакалавр

Москва 2014

**Автор:
профессор Н.Н.Еремин**

1. Цели и задачи освоения дисциплины:

Цель: показать роль кристаллохимии как теоретического фундамента современной структурной химии, научить основам теории симметрии и элементам теории рентгеновской дифракции, базовым структурным типам неорганических соединений, структурным представлениям в химии, дать общую информацию о направлениях развития современной кристаллохимии.

Задачи: привить учащимся навыки систематического подхода к решению структурно-химических задач фундаментального и прикладного характера

2. Место дисциплины в структуре ООП ВПО

Дисциплина относится к федеральному компоненту блока ОПД ООП ВПО бакалавра по направлению «химия, физика и механика материалов»

3. Требования к результатам освоения содержания дисциплины:

3. Требования к результатам освоения дисциплины

Процесс изучения учебной дисциплины направлен на формирование элементов следующих компетенций:

универсальных, в том числе:

а) общекультурных (социально-личностных):

– способность осознавать свою роль и предназначение в разнообразных профессиональных и жизненных ситуациях; умение использовать нормативные правовые документы в своей деятельности (ОК-1);

– умение переоценивать накопленный опыт, анализировать собственные достижения и перспективы самосовершенствования (ОК-2);

б) общенаучных:

– обладание знаниями о предмете и объектах изучения, методах исследования, современных концепциях, достижениях и ограничениях естественных наук: физики, химии, биологии, наук о земле и человеке, экологии (ОНК-1);

– способность к поиску, критическому анализу, обобщению и систематизации научной информации, к постановке целей исследования (ОНК-2);

– владение методологией научных исследований в профессиональной области (ОНК-5);

– способность использовать в профессиональной деятельности базовые знания в области физики (ОНК-6);

в) инструментальных:

– владение терминологией специальности на иностранном языке (ИК-2);

– владение навыками использования программных средств и работы в компьютерных сетях, использования ресурсов Интернет; (ИК-3);

– способность использовать профессиональные базы данных, работать с распределенными базами знаний (ИК-4);

– способность использовать современную вычислительную технику и специализированное программное обеспечение в научно-исследовательской работе (ИК-5);

г) системных:

– способность к творчеству, порождению инновационных идей, выдвижению самостоятельных гипотез (СК-1);

– способность к поиску, критическому анализу, обобщению и систематизации научной информации, к постановке целей исследования и выбору оптимальных путей и методов их достижения (СК-2);

– способность к самостоятельному обучению и разработке новых методов исследования, к изменению научного и научно-производственного профиля деятельности; к инновационной научно-образовательной деятельности (СК-3);

– **профессиональных**, в том числе:

общепрофессиональных, обязательными для всех профилей подготовки (в соответствии с видами деятельности):

научно-исследовательская деятельность:

- способность самостоятельно осуществлять сбор информации, использовать в научно-исследовательской деятельности навыки лабораторных исследований (ПК-1);
- способность самостоятельно ставить конкретные задачи научных исследований и решать их с использованием новейшего отечественного и зарубежного опыта (ПК-3);
- готовность в составе научно-исследовательского коллектива участвовать в составлении отчетов, рефератов, библиографий и обзоров по тематике научных исследований, в подготовке докладов и публикаций (ПК-4);

организационно-управленческая деятельность:

- готовность к практическому использованию нормативных документов при планировании и организации лабораторных исследований (ПК-13);
- готовность участвовать в организации научных и научно-практических семинаров и конференций (ПК-14).

В результате освоения дисциплины обучающийся должен:

Знать: основные законы и закономерности строения кристаллических веществ, способы представления кристаллической структуры, физико-химические основы кристаллохимии, основные законы, определяющие кристаллическую структуру, взаимосвязь кристаллической структуры и физических свойств кристаллов

Уметь: формулировать конкретные структурно-химические задачи на основе законов и закономерностей, освоенных в курсе кристаллохимии, обобщать полученные результаты используя в том числе принципы плотнейших упаковок.

Владеть: приемами построения графиков точечных и простейших пространственных групп, методами определения правильных систем точек (орбит группы),

Приобрести опыт деятельности: в анализе, формулировке и решении конкретных структурно-химических задач, как фундаментальных, так и практических.

4. Структура и содержание дисциплины Кристаллохимия

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 зачетные единицы или 72 часа, в том числе 48 аудиторных занятий (32 часа лекций и 16 часов семинарских занятий) и 24 часа внеаудиторных самостоятельных занятий студента.

4.1. Структура преподавания дисциплины

№ п/п	Раздел дисциплины	Семестр	Виды учебной работы, включая самостоятельную работу студентов и трудоемкость (в часах)				Формы текущего контроля (по неделям семестра) Форма промежуточной аттестации (по семестрам)
			Лекции	Семинары	Практич. занятия	Самостоятельная работа	
1.	Введение в химическую кристаллографию. Понятие «симметрия» и его использование в геологии. История развития науки. Место кристаллографии и кристаллохимии среди родственных наук. Элементы симметрии. Сложные оси. Осевая теорема Эйлера. Вывод 32 классов симметрии. Обозначения групп симметрии в симво-	6	6	2		4	Собеседование на каждом семинаре, Домашнее задание №1 и его проверка.

	<p>лике Шенфлиса. Категории. Сингонии. Международная символика (символика Германа – Могена). Простые формы кристаллов и икосаэдрических объектов. Предельные группы симметрии Кюри. Физические явления, описываемые этими группами.</p>					
2.	<p>Понятие о кристаллической решетке. Вывод 14 типов решеток Браве. Представление об элементах симметрии кристаллических структур - трансляционных элементах симметрии - плоскостях скользящего отражения и винтовых осях, их взаимодействиях. 230 пространственных групп симметрии. Правильные системы точек (орбиты) и их характеристики. Принципы вычерчивания графиков пространственных групп симметрии и построение проекций структур.</p>	6	6		6	Собеседование на каждом семинаре, Домашние задания №2-4 и их проверка.
3.	<p>Свойства атомов, важные для кристаллохимии. Строение электронных оболочек. Электронные конфигурации элементов и Периодическая система элементов Менделеева. Орбитальные радиусы атомов и ионов. Потенциалы ионизации и сродство к электрону. Валентное состояние и гибридизация орбиталей. Орбитальные электроотрицательности, Поляризуемость, магнитные свойства, кислотно-основные свойства атомов и ионов. Основные характеристики структуры: координационные числа (КЧ) и координационные многогранники (КМ) (полиэдры), число формульных единиц (Z). План описания кристаллической структуры.</p>	6	2		2	Собеседование на каждом семинаре, Домашнее задание №5, проверка ведения атласа кристаллических структур
4.	<p>Химическая связь в кристаллах. Основные типы химической связи. Потенциальная кривая химической связи. Энергия сцепления кристаллов. Степень ионности связи и ее структурное влияние. Общий взгляд на природу химической связи в кристаллах. Размеры и форма атомов в кристаллах. Атомные, Ван-дер-ваальсовы и ионные радиусы. Распределение электронной плотности и «кристаллические» радиусы атомов. Понятие об эффективных зарядах атомов в кристаллах и методах их определения.</p>	10	2		4	Собеседование на каждом семинаре, проверка ведения атласа кристаллических структур. Домашнее задание №6

	Поляризуемость ионов в кристалле.					
5.	Теория ПУ и ее использование для описания кристаллических структур. Полиэдрический метод изображения кристаллических структур. Плотнейшие упаковки в кристаллах. Пустоты плотнейших упаковок. Двухслойная (гексагональная) плотнейшая упаковка. Трехслойная (кубическая) плотнейшая упаковки. Многослойные упаковки. Систематика кристаллических структур, построенных на основе различных ПУ. Решение задач по определению слойности упаковок. Решение расчетных задач по построению по структурным данным чертежа структуры.	4	4		8	Подготовка и проведение итоговой письменной контрольной работы по всему курсу
6.	ИТОГОВАЯ АТТЕСТАЦИЯ	6				Зачет
Всего часов: 2 ЗЕ или 72 часа			32	16		24

Лекция №	Содержание лекций
1	Введение в химическую кристаллографию. Понятие «симметрия» и его использование в геологии. История развития науки. Место кристаллографии и кристаллохимии среди родственных наук.
2	Элементы симметрии. Сложные оси. Осевая теорема Эйлера. Вывод 32 классов симметрии. Обозначения групп симметрии в символике Шенфлиса. Категории. Сингонии. Международная символика (символика Германа – Могена).
3	Простые формы кристаллов и икосаэдрических объектов. Предельные группы симметрии Кюри. Физические явления, описываемые этими группами
4	Пространственная решетка. Вывод 14 типов решеток Браве.
5	Трансляционные элементы симметрии бесконечных кристаллических построек. Пространственные (федоровские) группы симметрии и принципы их вывода. Принципы графического представления пространственных групп симметрии.
6	Правильные системы точек и их характеристики: симметрия позиции, величина симметрии, число степеней свободы, кратность, координаты точек. Международные кристаллографические таблицы.
7	Свойства атомов, важные для кристаллохимии. Строение электронных оболочек. Электронные конфигурации элементов и Периодическая система элементов Менделеева. Орбитальные радиусы атомов и ионов.
8	Потенциалы ионизации и сродство к электрону. Валентное состояние и гибридизация орбиталей. Орбитальные электроотрицательности, Поляризуемость, магнитные свойства, кислотно-основные свойства атомов и ионов.
9	Основные характеристики структуры: координационные числа (КЧ) и координационные многогранники (КМ) (полиэдры), число формульных единиц (Z). План описания кристаллической структуры.
10	Размеры и форма атомов в кристаллах. Атомные, Ван-дер-ваальсовы и ионные радиусы. Распределение электронной плотности и «кристаллические» радиусы атомов. Свойства атома в кристалле. Заряд, поляризуемость,

	магнитные свойства.
11	Химическая связь в кристаллах. Основные типы химической связи в кристаллах. Потенциальная кривая химической связи. Энергия сцепления кристаллов. Ионная связь
12	Критерии устойчивости структурного типа для ионных кристаллов.
13	Ковалентная связь. Теория направленных валентностей. Критерии устойчивости структурного типа для ковалентных кристаллов.
14	Металлическая, водородная и в-д-в связи, их особенности
15	Теория ПУ и ее использование для описания кристаллических структур. Полиэдрический метод изображения кристаллических структур. Плотнейшие упаковки в кристаллах. Пустоты плотнейших упаковок. Двухслойная (гексагональная) плотнейшая упаковка. Трехслойная (кубическая) плотнейшая упаковки. Многослойные упаковки.
16	Систематика кристаллических структур, построенных на основе различных ПУ.

Занятие №	Содержание семинарского занятия
1	Практическое занятие на взаимодействие элементов симметрии точечных групп и достройку до полного класса симметрии. Домашнее задание №1
2	Вычерчивание графиков ромбических групп <i>mm2</i> Домашнее задание №2
3	Вычерчивание графиков ромбических групп <i>mmm</i> Домашнее задание №3
4	Ознакомление с планом описания кристаллической структуры. Работа с простейшими структурными типами: графит (2H, 3R), BN лонсдейлит, алмаз, α -Fe, Cu, Mg, NaCl NiAs, CsCl Домашнее задание №4
5	Работа с моделями кристаллических структур, построенными на основе кубической и гексагональной ПУ и без ПУ. CaF ₂ , ZnS (сфалерит, вюрцит), Li ₂ O, Cu ₂ O, CO ₂ , FeS ₂ (пирит, марказит), CdI ₂ 2сл, CdI ₂ 3сл, CaTiO ₃ , TiO ₂ -рутил, Al ₂ O ₃ -корунд, Mg ₂ AlO ₄ -шпинель, черчение октаэдрических мотивов Домашнее задание №5
6	Работа с моделями кристаллических структур SiC (3 модиф.). Решение задач по определению слойности упаковок. Домашнее задание №6
7	Решение расчетных задач по построению по структурным данным чертежа структуры (элементарная ячейка и краевые связи). Подготовка к итоговой контрольной работе.
8	Письменная итоговая контрольная работа по всему курсу.

5. Рекомендуемые образовательные технологии

При освоении дисциплины Кристаллохимия активно используется образовательная **технология педагогических мастерских** - преподаватель создаёт атмосферу открытости, доброжелательности, сотворчества в общении, равен ученику в поиске знания, не торопится давать ответы на поставленные вопросы. Исключает официальное оценивание работы учащегося, но через социализацию, афиширование работ даёт возможность появления самооценки учащегося, её изменения, самокоррекции.

В курсе предусматривается широкое использование активных и интерактивных форм проведения занятий. Учащиеся знакомятся с современными методами изучения кристаллического вещества на макро- и микро-уровне. По результатам внеаудиторной работы студенты под руководством преподавателя готовят решение индивидуальных задач по основным разделам дисциплины и защищают их на семинарах.

При чтении лекций используются *интерактивные лекции-визуализации* с выделением в визуальной форме основных понятий кристаллохимии.

При проведении семинарских занятий используются ролевые игры, имитирующие реальные задачи, имеющие практическую значимость.

6. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины.

6.1. Домашние задания для самостоятельной подготовки студентов

6.1.1 План кристаллохимического описания кристаллической структуры:

- Определить ячейку Браве структуры.
- Подсчитать, сколько атомов различного типа приходится на ячейку Браве, определить кристаллохимическую формулу соединения, число формульных единиц.
- Определить взаимную координацию атомов, КЧ и КП для каждого сорта атомов, там, где возможно, – идентифицировать атомы разного сорта.
- Там, где возможно, - использовать термины плотнейшей упаковки.
- Указать характер сочленения разнообразных структурных фрагментов.
- Пояснить предпочтение атомов определенного сорта наблюдаемым позициям.
- Указать типы химических связей между атомами.
- нарисовать кристаллическую структуру в плане, выделив контуры элементарной ячейки и обозначив высоты (координаты z) атомов.

6.1.2. Рекомендуемый набор кристаллических структур:

Cu (Au, Ag, Pt), Mg, α -, β -, γ -Fe, C (α -, β -графит), BN (борнитрид), C (алмаз, лонсдейлит), модификации ZnS (сфалерит, вюрцит) и C (карборунд), CsCl, NaCl (галит) = MgO (периклаз) = PbS (галенит), NiAs (никелин) = FeS (пирротин), CaF₂ (флюорит) = Li₂O, модификации TiO₂ (рутил, брукит, анатаз), модификации CaCO₃ (кальцит, арагонит), FeS₂ (марказит, пирит), MoS₂ (молибденит), CO₂, модификации CdI₂ = Mg(OH)₂ (брусит), Cu₂O (куприт), CaTiO₃ (перовскит), Al₂O₃ (корунд), MgAl₂O₄ (шпинель).

6.1.3. Типовые расчетные задания

- Используя символику Полинга расшифровать классическую последовательность слоев ...АВАВСВСВСВ...
- Определить тип решетки Браве по изображенной проекции, учитывая приведенные соотношения параметров a , b и c .
- По словесному описанию структуры нарисовать ее в плане и дать полную характеристику. Назвать структурный тип.
- Нарисовать график пространственной группы $Pbn?$. Дать характеристику всем правильным системам точек этой группы.
- Построить по структурным данным на миллиметровке чертеж структуры (элементарная ячейка и краевые связи). Определить формулу соединения. Выделить структурные полиэдры, определить характер их соединения. Сделать вывод о типе катиона и аниона.
- Рассчитайте радиус атома меди, если известно, что параметр элементарной ячейки Cu равен 3,61 Å.
- Рассчитайте нижний предел устойчивости катиона в тетраэдрической координации.
- Рассчитайте нижний предел устойчивости катиона в октаэдрической координации.
- Расположение атомов в кристаллах титаната стронция соответствует структурному типу перовскита. Параметр элементарной ячейки $a = 3.9$ Å. Оцените анионный радиус кислорода. Ответ поясните с помощью проекции элементарной ячейки.
- Электроотрицательность фтора (по Полингу) равна 4 и его потенциал ионизации

- $I=17.4$ эВ. С помощью формулы Малликена оцените его средство к электрону.
- В структуре NaCl ионы Cl образуют кубическую плотнейшую упаковку из несжимаемых шаров. Параметр элементарной ячейки NaCl = 5.65 Å. Определите ионный радиус Na⁺.
 - Энергия решетки U элементарной ячейки стишовита SiO₂ равна -259 эВ. Рассчитайте значение энергии атомизации кристалла. Последовательные потенциалы ионизации кремния равны: $I_1=8$ эВ, $I_2=15$ эВ, $I_3=23$ эВ, $I_4=57$ эВ. Значения средства к электрону для кислорода равно: $F_1=1,5$ эВ, $F_2=-9$ эВ.
 - По сингонии и координатам атомов изобразите проекцию элементарной ячейки кристалла. Определите состав и структурный тип соединения, мотив кристаллической структуры, число формульных единиц в ячейке и координацию атомов (координационные полиэдры и координационные числа).
 - По данной проекции элементарной ячейки определите структурный тип соединения. Изобразите проекцию элементарной ячейки в общепринятом для данного структурного типа виде. Приведите примеры веществ, относящихся к этому типу.

6.2. Контроль усвоения материала.

Контроль усвоения пройденного материала осуществляется на нескольких уровнях. Контроль на всех уровнях выражается в индивидуальной балльно-рейтинговой системе оценки знаний учащихся.

Текущий контроль осуществляется путем непосредственного контакта преподавателя с каждым студентом во время семинарских и индивидуальных занятий, путем проверки, анализа и обсуждения домашних работ.

Предусмотрена 1 письменный тест по итогам курса и устное собеседование по итогам которых выставляется зачет.

6.3. Вопросы для подготовки к зачету (семестр 6):

1. Основные вехи истории кристаллохимии. Кристаллохимия среди других наук о веществе. Основные задачи кристаллохимии.
2. Симметрия, симметричная фигура, операция симметрии, элемент симметрии.
3. Конгруэнтное и энантиоморфное равенство. Элементы симметрии, связывающие конгруэнтно равные и энантиоморфно равные фигуры.
4. Элементы симметрии первого рода – поворотные оси симметрии. Их характеристики. Элементы симметрии второго рода – зеркальная плоскость, центр симметрии.
5. Основной закон симметрии кристаллов и его доказательство.
6. Сложные элементы симметрии. Их взаимосвязь и реализация в кристаллическом веществе.
7. Простые формы кристаллов, их характеристики.
8. Простые формы в конечных фигурах икосаэдрической симметрии.
9. Понятие «пространственная решетка», как элемента симметрии
10. Элементарная ячейка и основная ячейка, их отличия.
11. Вывод 14 типов ячеек Браве.
12. Трансляционные элементы симметрии.
13. Взаимодействие трансляционных и нетрансляционных элементов симметрии
14. Взаимодействие трансляционных элементов симметрии между собой
15. Принципы вычерчивания графиков пространственных групп симметрии типа Pmm2
16. Принципы вычерчивания графиков пространственных групп симметрии типа Pmmm
17. Правильные системы точек и их характеристики
18. Правильные системы точек и позиции Уайкоффа. Их отличия.
19. Интернациональные кристаллографические таблицы. Информация, получаемая из них.

20. Координационные числа и координационные многогранники, число формульных единиц.
21. Словесное описание кристаллической структуры.
22. Свойства атомов, важные для кристаллохимии: угловая форма орбиталей, орбитальные радиусы, потенциалы ионизации и сродство к электрону, орбитальные электроотрицательности, поляризуемость, кислотно-основные свойства.
23. Построение периодической системы элементов: принцип Паули, правило Гунда.
24. Потенциалы ионизации и сродство к электрону. Периодическая зависимость от порядкового номера Z . Химические свойства и классификация элементов: металлы, полуметаллы и неметаллы.
25. Понятие об электроотрицательности. Шкала электроотрицательности Полинга. Связь электроотрицательности с потенциалом ионизации и сродством к электрону (формула Малликена). Степень ионности связи и разность электроотрицательностей.
26. Поляризуемость атомов и ионов. Ее связь с размерами атомов и ионов. Слоистые структуры как результат поляризации анионов.
27. Эффективные радиусы ионов. Критерии вывода радиусов Ланде, Гольдшмидта, Полинга.
28. Зависимость ионного радиуса от заряда, координационного числа, спинового состояния.
29. Периодические зависимости ионных радиусов. Лантаноидное сжатие.
30. Атомные и ковалентные радиусы. Их периодические зависимости. Соотношение между атомными и ионными радиусами. Ван-дер-ваальсовы радиусы.
31. Распределение электронной плотности и «кристаллические» радиусы атомов. Сжатие аниона и расширение катиона в кристаллическом поле.
32. Эффективные заряды атомов в кристалле и методы их определения
33. Структурные особенности разных типов связи: ионной, ковалентной, металлической, ван-дер-ваальсовой
34. Ионная связь. Энергия решетки ионных кристаллов.
35. Цикл Борна-Габера. Формулы Борна-Майера и Борна-Ландэ
36. Энергия связи в кристаллах: энергия решетки, энергия атомизации. Потенциальная кривая химической связи
37. Переходные типы химической связи в кристаллах. Степень ионности химической связи и разность электроотрицательностей. Структуры кристаллов, переходные от ионных к ковалентным.
38. Переходные типы химической связи в кристаллах. Структуры, переходные между металлическими и ковалентными.
39. Металлическая связь. Радиусы Металлических атомов. Основные структуры металлов.
40. Остаточная (вандерваальсова) связь. Ван-дер-ваальсовы радиусы. Молекулярные кристаллы.
41. Диполь-дипольные взаимодействия. Поляризация аниона в низкосимметричных позициях структуры
42. Водородная связь. Строение кристаллогидратов. Структура льда. Конфигурационная энтропия льда.
43. Элементы теории кристаллического поля. Спиновое состояние. Ионы переходных металлов в кристаллическом поле. Расщепление d -электронов в октаэдрическом окружении. Предпочтение иона переходного металла к октаэдру или тетраэдру. Энергия стабилизации в кристаллическом поле. Радиусы ионов переходных металлов в высокоспиновом и низкоспиновом состояниях.
44. Кислотно-основные свойства атомов и ионов.
45. Плотнейшие шаровые упаковки в кристаллах. Их типы и характеристики. Примеры структур.

46. Пустоты в плотнейших упаковках. Их количество расположение в разных упаковках. Их роль в разнообразии кристаллических структур.
47. Кристаллические структуры, построенные на основе двухслойной плотнейшей упаковки.
48. Кристаллические структуры, построенные на основе трехслойной плотнейшей упаковки.
49. Структуры кристаллов с формулами типа AX, построенные на основе плотнейшей упаковки и без нее. Примеры.
50. Структуры кристаллов с формулами типа AX₂, построенные на основе плотнейшей упаковки и без нее. Примеры.
51. Полиэдрический метод изображения кристаллических структур, построенных на основе плотнейших упаковок и без них.
52. Использование обозначения Полинга при описании плотнейших упаковок.
53. Структуры SiC и CdI₂. Явление политипии.
54. NaCl-подобные структуры. Примеры.
55. Структуры полиморфных модификаций углерода.
56. Фуллерены, их геометрические особенности.

7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

а) основная литература:

- 1) Урусов В.С., Еремин Н.Н. «Кристаллохимия. Краткий курс» М., Изд-во МГУ, 2010, 258 стр.
- 2) Загальская Ю.Г., Литвинская Г.П., Егоров-Тисменко Ю.К. Руководство к практическим занятиям по кристаллохимии, М. изд-во МГУ, 1983, 167 стр.
- 3) Зоркий П.М. Симметрия молекул и кристаллических структур, МГУ, 1986.
- 4) Бокий Г.Б. Кристаллохимия. М., Наука, 1973.
- 5) Вест А., Химия твердого тела, М., Мир, 1988; т.1.

б) дополнительная литература:

- 1) Ворошилов Ю.В. Павлишин В.И. «Основы кристаллографии и кристаллохимии. Рентгенография кристаллов» Киев, КНТ, 2011. 568 стр.
- 2) Егоров-Тисменко Ю.К. «Кристаллография и кристаллохимия», М, изд-во Книжный дом «Университет», 2005, с.520
- 3) Современная кристаллография, т. 2. Структура кристаллов. /Ред. Б.К. Вайнштейн. М., Наука, 1979.
- 4) Урусов В.С. Теоретическая кристаллохимия. М., МГУ, 1987.
- 5) Доливо-Добровольская Е.М., Доливо-Добровольский В.В., Пространственные группы симметрии (федоровские группы). Практическое руководство. СПбГУ, 2011.
- 6) Егоров-Тисменко Ю.К., Литвинская Г.П., Теория симметрии кристаллов, М.: ГЕОС, 2000.

в) программное обеспечение и Интернет-ресурсы:

- <http://cryst.geol.msu.ru/courses/crchem/index2.php> - официальная страница курса;
- <http://database.iem.ac.ru/minicryst/> - база данных кристаллических структур МИНКРИСТ;
- <http://www.shapesoftware.com/> - программное обеспечение для визуализации кристаллов и кристаллических структур;
- <http://rruff.geo.arizona.edu/AMS/amcsd.php> - база данных кристаллических структур American Mineralogist.

8. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Для проведения занятий: интерактивных лекций-визуализаций, презентаций рефератов на семинарах – используется LCD проектор. Семинарские занятия проводятся с моделями кристаллических структур, расчетные занятия – в компьютерном классе с выходом в Интернет. Консультации к зачету и дополнительные занятия проводятся с моделями в практикуме лаборатории кристаллохимии. Учебные материалы, лекции в pdf-формате и компьютерные иллюстрации для подготовки к зачету расположены на сайте <http://cryst.geol.msu.ru/courses/crchem/index2.php>

9. Краткое содержание дисциплины (аннотация)

Принципы выделения кристаллохимии как науки об атомном строении кристаллов из наук о твердом веществе. Связь кристаллохимии с родственными науками. Зарождение основных идей (XVI - XVII вв.). Химическая кристаллография (конец XVIII - начало XX вв.). Основные задачи кристаллохимии. Алгоритм вывода точечных групп симметрии с использованием символики А.Шенфлиса. Различные способы представления симметрических операций (модельный, координатный, матричный). Основные положения теории групп. Координатные системы в кристаллографии, категории, сингонии. Распределение 32-х кристаллографических классов по трем категориям и шести сингониям - шести кристаллографическим координатным системам, отражающим основные особенности кристаллов: симметрию и анизотропию. Международные обозначения точечных классов (групп) симметрии - символика Германна-Могена. Основное отличие кристаллического вещества от аморфного - трехмерная периодичность расположения материальных частиц; ее геометрическое выражение - пространственная решетка. Основные свойства кристаллов как следствие их решетчатого строения. Симметрия кристаллических структур. Симметрия квазикристаллов. Пространственная решетка. Типы решеток Браве. Представление об элементах симметрии кристаллических структур - трансляционных элементах симметрии - плоскостях скользящего отражения и винтовых осях, их взаимодействиях. Общие представления о 230 пространственных группах симметрии. Принципы их вывода. Правильные системы точек и их характеристики. Основные понятия и термины кристаллохимии: координационное число (КЧ), координационный многогранник (КМ), число формульных единиц (Z). Типы химической связи и их реализация в кристаллических структурах. Гомодесмические и гетеродесмические структуры. Геометрический характер структур. Структурные мотивы: координационный, островной, цепочечный, слоистый и каркасный. Кристаллохимические радиусы: металлические, ионные, ковалентные, ван-дер-ваальсовы. Геометрические пределы устойчивости ионных структур. Плотнейшие шаровые упаковки Структурные единицы кристалла, мотив структуры. Полиэдрическое изображение кристаллических структур (метод Полинга-Белова). Структурный тип, понятия изоструктурности, антиизоструктурности, изотипности, гомеотипности, структурный класс. Кристаллохимические формулы. Параллелоэдры Федорова, области и многогранники Дирихле-Вороного. Свойства атомов, важные для кристаллохимии. Строение электронных оболочек, их форма и протяженность. Электронные конфигурации элементов и Периодическая система элементов Менделеева. Орбитальные радиусы атомов и ионов. Потенциалы ионизации и сродство к электрону. Валентное состояние и гибридизация орбиталей. Орбитальные электроотрицательности, Поляризуемость атомов и ионов. Магнитные свойства атомов и ионов. Кислотно-основные свойства атомов и ионов. Химическая связь в кристаллах. Основные типы химической связи: ионная, ковалентная, металлическая, вандерваальсова, водородная. Потенциальная кривая химической связи. Ионная модель, энергия решетки. Энергия сцепления кристаллов. Энергия ионной решетки. Постоянная Маделунга. Уравнения Борна. Термохимический цикл Борна-Габера. Понятие об энергии атомизации как универсальной характеристике энергии сцепления атомов в кристаллах. Структуры типичных ионных кристаллов. Основы теории кристаллического по-

ля. Электронная структура переходных элементов. Расщепление энергии d- и f-уровней в кристаллическом поле различной симметрии. Понятие об энергии предпочтения координации. Ковалентная связь и типичные ковалентные структуры. Связи, промежуточные между ионными и ковалентными. Степень ионности связи и ее структурное влияние. Зонная энергетическая структура кристалла: диэлектрики, полупроводники, и металлы. Металлическая связь и ее структурные свойства. Переход от металлической к ковалентной связи и «переходные» структуры. Остаточная (Ван-дер-ваальсова) связь. Диполь-дипольные и ион-дипольные взаимодействия. Слоистые структуры. Водородная связь. Общий взгляд на природу химической связи в кристаллах. Размеры и форма атомов в кристаллах. Атомные (металлические и ковалентные) радиусы. Ван-дер-ваальсовы (межмолекулярные) радиусы. Ионные радиусы. Геометрические пределы устойчивости ионных структур. Зависимость ионных радиусов от заряда, координационного числа и спинового состояния. Распределение электронной плотности и «кристаллические» радиусы атомов. Понятие об эффективных зарядах атомов в кристаллах и методах их определения. Поляризуемость ионов в кристалле.

Разработчик

МГУ им. М.В. Ломоносова, Геологический ф-т, кафедра кристаллографии и кристаллохимии. Профессор Еремин Н.Н. тел. 939-3875 peremin@geol.msu.ru

Эксперты:

(место работы)

(занимаемая должность)

(инициалы, фамилия)