



Основная профессиональная образовательная программа
04.03.01 Химия
(Медицинская и фармацевтическая химия)

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации

ИВАНОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

Кафедра фундаментальной и прикладной химии

ОДОБРЕНО:

Руководитель ОП

Л.Б. Кочетова Л.Б. Кочетова
(подпись)

« 1 » сентября 2021 г.

Рабочая программа дисциплины
Кристаллохимия

Уровень высшего образования:	бакалавриат
Квалификация выпускника:	бакалавр
Направление подготовки:	04.03.01 Химия
Направленность (профиль) образовательной программы:	Медицинская и фармацевтическая химия

Иваново



Основная профессиональная образовательная программа
04.03.01 Химия
(Медицинская и фармацевтическая химия)

1. Цели освоения дисциплины

Целью освоения дисциплины Кристаллохимия является фундаментальная подготовка бакалавров направления подготовки 04.03.01 «Химия», владеющих теоретическими основами кристаллохимии, фундаментальными основами и базовыми закономерностями формирования кристаллической структуры, способами ее моделирования; имеющего общее представление о свойствах атомов и основных факторах, определяющих структуру кристалла; понимающего связь пространственного расположения атомов, молекул, ионов в кристаллических веществах с природой химического взаимодействия частиц, а также зависимость структуры кристаллических веществ от их физико-химических свойств.

2. Место дисциплины в структуре ОП

Дисциплина «Кристаллохимия» относится к обязательной части образовательной программы. Преподавание дисциплины, базируется на научном материале ранее пройденных студентами дисциплин: «Общая и неорганическая химия», «Квантовая механика и квантовая химия», «Математика», «Физика», «Аналитическая химия», «Органическая химия», «Физическая химия» и «Информатика и информационные технологии в химии». В дисциплине рассматриваются фундаментальные основы и базовые закономерности кристаллической структуры и способы ее моделирования; основы рентгеноструктурного анализа; группы симметрии и структурные классы; общая кристаллохимия (типы химических связей в кристаллах, систематика кристаллических структур, шаровые упаковки и кладки, кристаллохимические радиусы атомов, изоморфизм и полиморфизм); избранные главы систематической кристаллохимии (простые вещества, бинарные и тернарные соединения, силикаты, органические вещества); обобщенная кристаллохимия, характеризующие состояние индивидуальных веществ и многокомпонентных систем, а также их фазовые и химические превращения под действием различных факторов. Методологической основой дисциплины являются законы геометрической кристаллографии и основного экспериментального метода – рентгеноструктурного анализа.

Для освоения данной дисциплины обучающийся должен:

Знать: основные понятия и фундаментальные законы химии; классификацию, физико-химические свойства неорганических и органических веществ.

Уметь: пользоваться справочной и научной литературой, проводить анализ получаемых зависимостей.

Иметь: навыки расчетных методов определения параметров, физико-химических свойств различных веществ и материалов.

Освоение дисциплины необходимо как предшествующее изучению дисциплин Основы биотехнологии, Основы медицинской и фармацевтической химии, прохождению производственной практики, научно исследовательской работы.

3. Планируемые результаты обучения по дисциплине

3.1. Компетенции, формированию которых способствует дисциплина

При освоении дисциплины формируются следующие компетенции в соответствии с ФГОС ВО по данному направлению подготовки:

общепрофессиональные (ОПК):

- Способен анализировать и интерпретировать результаты химических экспериментов, наблюдений и измерений (ОПК-1);

- Способен проводить с соблюдением норм техники безопасности химический эксперимент, включая синтез, анализ, изучение структуры и свойств веществ и материалов, исследование процессов с их участием (ОПК-2).



Основная профессиональная образовательная программа
04.03.01 Химия
(Медицинская и фармацевтическая химия)

3.2. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с индикаторами достижения формируемых компетенций

В результате освоения дисциплины обучающийся должен:

Знать: - основные законы естественных наук и их применения при описании кристаллических структур (ОПК-1); основные понятия теории симметрии кристаллов и текстур, знать систематику кристаллов по категориям, сингониям, решёткам Бравэ, точечным и пространственным группам, систематику материальных и полевых тензоров (ОПК-1); важнейшие неорганические структурные типы: координацию компонентов, симметрию, связность структуры, связь с более простыми типами (включая плотнейшие упаковки), условия существования, значение в материаловедении (ОПК-1).

Уметь: описывать кристаллические структуры, опираясь на свойства и строение изучаемых систем (ОПК-2); применять законы естественных наук для описания кристаллических многогранников (ОПК-1); использовать в образовательном процессе разнообразные ресурсы, в том числе и потенциал других учебных предметов (ОПК-2); определять симметрию кристаллического многогранника, строить стереографическую проекцию модели (ОПК-1). Иметь: представления о основных понятиях, о структурных типах, правильных системах точек, изоструктурности, полиморфизме, политипии и морфотропии, плотнейших упаковках одинаковых сфер (ОПК-1).

4. Объем и содержание дисциплины

Объем дисциплины составляет 2 зачетных единицы (72 академических часа).

4.1. Содержание дисциплины по разделам (темам), соотнесенное с видами и трудоемкостью занятий лекционно-семинарского типа

Объем иной контактной работы и самостоятельной работы обучающегося по дисциплине указан в учебном плане образовательной программы.

№ п/п	Разделы (темы) дисциплины	Семестр	Виды занятий, их объем (в ак. часах, по очной форме обучения)		Формы текущего контроля успеваемости (по очной форме обучения) Формы промежуточной аттестации
			Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа	
1	Введение. Предмет и задачи кристаллохимии.	7	2	4 <i>практ. занятие</i>	входной контроль, проверка опорных сигналов к разделу
2	Основы рентгеноструктурного анализа.	7	2	4 <i>практ. занятие</i>	проверка опорных сигналов к разделу
3	Группы симметрии и структурные классы.	7	4	4 <i>практ. занятие</i> 4 <i>лабор. занятие</i>	проверка опорных сигналов к разделу, отчет по лабораторной работе
4	Общая кристаллохимия.	7	4	4 <i>практ. занятие</i> 4 <i>лабор. занятие</i>	проверка опорных сигналов к разделу, отчет по лабораторной работе
5	Обобщенная кристаллохимия.	7	4	4 <i>лабор. занятие</i>	проверка опорных сигналов к разделу, отчет по лабораторной работе
Итого за семестр:			16	28	Зачет



4.2. Развернутое описание содержания дисциплины по разделам (темам)

Введение. Предмет и задачи кристаллохимии.

1. Кристаллическая структура и способы ее моделирования (статические и динамические, дискретные модели). Деформационная электронная плотность. Локальные и тотальные структурные характеристики. Базы структурных данных. Кристаллохимия как часть химии.

2. Основы рентгеноструктурного анализа

Основные этапы истории и перспективы развития рентгеноструктурного анализа. Дифракция рентгеновских лучей. Интенсивность дифракционного луча. Уточнение кристаллической структуры. Сравнение дифракционных методов изучения кристаллической структуры (рентгенография, нейтронография, электронография).

3. Группы симметрии и структурные классы

Точечные группы. Симметрические операции и элементы симметрии. Поворотные и инверсионные оси. Семейства точечных групп. Категории. Предельные точечные группы. Зеркально-поворотные оси и символы Шенфлиса. Изображение расположения элементов симметрии с помощью обычной и стереографической проекции.

Кристаллическая решетка и кристаллическая структура. Симметрия решетки. Кристаллографические координатные системы. Элементарная ячейка.

Зависимость физических свойств кристаллов от их симметрии. Свойства, описываемые тензорами второго ранга (электропроводность, диэлектрическая проницаемость, тепловое расширение и др.). Пиро- и пьезоэлектрические свойства. Оптические свойства кристаллов. Энантиоморфизм.

Открытые элементы симметрии кристаллических структур. Винтовые оси. Плоскости скользящего отражения. Типы решеток (типы Бравэ). Структуры Бравэ и структуры Федорова. Истинная и случайная симметрия решетки.

Зависимость физических свойств кристаллов от их симметрии. Свойства, описываемые тензорами второго ранга (электропроводность, диэлектрическая проницаемость, тепловое расширение и др.). Пиро- и пьезоэлектрические свойства. Оптические свойства кристаллов. Энантиоморфизм.

4. Общая кристаллохимия.

Типы химической связи в кристаллах. Характер кристаллической структуры. Координационные (моноклинные), островные, цепочечные, слоистые, каркасные структуры. Описание структур в терминах плотнейших шаровых упаковок (ПШУ) и плотнейших шаровых кладок (ПШК). Координационные числа, координационные полиэдры и пустоты в ПШУ и ПШК. Слоистость ПШУ.

Кристаллохимические радиусы атомов. Металлические и ионные радиусы. Коэффициент плотности упаковки металлических и ионных кристаллов. Ковалентные и ван-дер-ваальсовы радиусы; их использование для построения моделей молекул и изучения конформации молекул. Пространственные напряжения в молекулах. Коэффициент плотности упаковки молекулярных кристаллов.

Кристаллохимические явления. Изоструктурность. Изоморфизм. Типы изоморфизма. Твердые растворы замещения, внедрения и вычитания.



Основная профессиональная образовательная программа
04.03.01 Химия
(Медицинская и фармацевтическая химия)

5. Обобщенная кристаллохимия

Конденсированные фазы с различной степенью упорядоченности. Кристаллы с частичной неупорядоченностью. Микродвойникование, полисинтетические сростки. Доменные структуры. Элементы ближнего, среднего и дальнего порядка в жидкостях.

5. Образовательные технологии

Чтение лекций по данной дисциплине рекомендуется проводить с использованием мультимедийных презентаций.

Мультимедийная презентация, выполненная средствами программы Microsoft PowerPoint позволяет преподавателю четко структурировать материал лекции, экономить время, затрачиваемое на изображение с использованием мела и доски схем, написание формул и других сложных объектов, что дает возможность увеличить объем излагаемого материала. Кроме того, презентация позволяет очень хорошо иллюстрировать лекцию не только схемами и рисунками, которые есть в учебных пособиях, но и полноцветными фотографиями, рисунками, портретами ученых и т.д. Мультимедийная презентация позволяет отобразить физические и химические процессы в динамике, что позволяет значительно улучшить восприятие материала студентами. Студентам предоставляется возможность копирования презентаций для выполнения самостоятельной работы, подготовки к текущему, промежуточному и итоговому контролю - зачету.

При работе в малочисленных группах целесообразно использовать диалоговую форму проведения лекционных занятий с использованием элементов практических занятий, постановкой и решением проблемных и ситуационных заданий и т.д.

В рамках лекционных занятий заслушиваются и обсуждаются подготовленные студентами реферативные работы.

Практические работы: Используется технология проведения практических работ в традиционной форме – на моделях кристаллических решеток, в сочетании с виртуальными изображениями моделей кристаллических. Активно-деятельный подход к обучению студентов кристаллохимии реализуется в индивидуальном выполнении практических работ и многовариантном характере заданий. Отчеты выполняются студентами в простой письменной форме, а также в электронном варианте.

При проведении лабораторного практикума необходимо создать условия для максимально самостоятельного выполнения студентами лабораторных работ. Поэтому при проведении лабораторного занятия преподавателю рекомендуется:

- Проведение экспресс-опроса (в устной или тестовой форме) по теоретическому материалу, необходимому для выполнения работы (с оценкой).
- Проверка планов выполнения лабораторных работ, подготовленных студентом в рамках самостоятельной работы (с оценкой).
- Оценка работы студента в лаборатории и полученных им результатов (с оценкой).
- Проверка отчета о выполненной лабораторной работе (с оценкой).

Лабораторные занятия (работы) проводятся после изучения определенного раздела. Это занятия, контролирующие знания, умения и навыки.

При защите лабораторной работы студент должен уметь объяснять цели, задачи, ход проведения работы, ее результаты, сделанные выводы, а также основные конструктивные особенности используемого оборудования.

Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине: технологии смешанного обучения.

6. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся



Основная профессиональная образовательная программа
04.03.01 Химия
(Медицинская и фармацевтическая химия)

Самостоятельная работа студента предполагает самостоятельную подготовку теоретических разделов и изучение методических материалов при подготовке к лабораторным работам, оформлении отчетов по проделанным лабораторным работам, теоретическую подготовку к контрольным работам в форме собеседования по вопросам раздела.

Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов при изучении дисциплины «Кристаллохимия» представлено методическими разработками кафедры фундаментальной и прикладной химии Ивановского государственного университета.

Для текущего контроля знаний используется контрольных задания по темам лабораторного практикума.

7. Характеристика оценочных средств для текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине

Система контроля по курсу включает: входной контроль (тест на знание студентом основ химии); текущий контроль и промежуточный контроль по курсу – зачет.

Качество освоения студентом материала дисциплины оценивается на зачете, который проходит по смешанной устно-письменной форме.

Текущий контроль предполагает проведение проверочных контрольных работ, а также результаты выполнения лабораторного практикума. Перед каждой лабораторной работой ведется опрос-допуск к лабораторной работе. Студент обязан показать знания необходимого теоретического материала и методик выполнения работы. После каждой лабораторной работы студент пишет отчет и защищает его перед преподавателем.

В качестве промежуточного контроля используется традиционная система проведения зачета с оценкой по билету при устно-письменном индивидуальном опросе, которая включает вопросы разделов курса и практическое задание.

Критерии оценки зачета:

- оценка «отлично» выставляется студенту, если полностью раскрыто содержание вопросов билета и правильно выполнено задание;
- оценка «хорошо» выставляется студенту, если один из вопросов раскрыт частично;
- оценка «удовлетворительно» выставляется студенту, если дан полный ответ только на один из предложенных вопросов или имеются существенные неточности в ответах на оба вопроса, а также не полностью выполнено задание;
- оценка «неудовлетворительно» выставляется студенту, если ответы на вопросы отсутствуют или если даны ошибочные ответы на каждый вопрос и не выполнено задание.

8. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины **Основная литература**

1. Егоров-Тисменко Ю.К. Кристаллография и кристаллохимия: учебник/ под ред. академика В.С. Урусова.-М.: КДУ, 2010.-588с.

2. Басалаев, Ю.М. Кристаллофизика и кристаллохимия : учебное пособие / Ю.М. Басалаев ; Министерство образования и науки Российской Федерации, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Кемеровский государственный университет». - Кемерово : Кемеровский государственный университет, 2014. - 403 с. : ил. - Библиогр. в кн. - ISBN 978-5-8353-1712-7; [Электронный ресурс]. - URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=278304>



Основная профессиональная образовательная программа
04.03.01 Химия
(Медицинская и фармацевтическая химия)

3. Пугачев, В.М. Кристаллохимия : учебное пособие / В.М. Пугачев. - Кемерово : Кемеровский государственный университет, 2013. - 104 с. - ISBN 978-5-8353-1322-8 ; [Электронный ресурс]. - URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=232461>
4. Томилин, В.И. Физическое материаловедение. В 2 частях : учебное пособие / В.И. Томилин, Н.П. Томилина, В.А. Бахтина. - Красноярск : Сибирский федеральный университет, 2012. - Ч. 1. Пассивные диэлектрики. - 280 с. - ISBN 978-5-7638-2510-7 ; [Электронный ресурс]. - URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=229343>
5. Брагина, В.И. Кристаллография, минералогия и обогащение полезных ископаемых : учебное пособие / В.И. Брагина ; Министерство образования и науки Российской Федерации, Сибирский Федеральный университет. - Красноярск : Сибирский федеральный университет, 2012. - 152 с. : ил., схем., табл. - Библиогр. в кн. - ISBN 978-5-7638-2647-0 ; [Электронный ресурс]. - URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=363881>

Дополнительная литература

1. Кристаллография и минералогия : лабораторный практикум / Министерство образования и науки Российской Федерации, Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Северо-Кавказский федеральный университет» ; авт.-сост. Е.Ю. Туманова, К.В. Уманжинова. - Ставрополь : СКФУ, 2016. - 87 с. : ил. - Библиогр. в кн. ; [Электронный ресурс]. - URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=458060>
2. Аникина, В.И. Основы кристаллографии и дефекты кристаллического строения : практикум / В.И. Аникина, А.С. Сапарова. - Красноярск : Сибирский федеральный университет, 2011. - 146 с. - ISBN 978-5-7638-2195-6 ; То же [Электронный ресурс]. - URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=229366>

Ресурсы информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»:

Система электронной поддержки образовательного процесса «Мой университет» <https://uni.ivanovo.ac.ru>

Профессиональные базы данных и информационно-справочные системы:

ЭБС «Университетская библиотека онлайн» www.biblioclub.ru

Электронная библиотека ИвГУ <http://lib.ivanovo.ac.ru>

Электронный каталог НБ ИвГУ <http://lib.ivanovo.ac.ru/index.php/ek>

Программное обеспечение: операционная система Microsoft Windows, пакет офисных программ Microsoft Office и LibreOffice, интернет-браузер Internet Explorer, Мой университет.

Химический каталог: химические ресурсы Рунета <http://www.ximicat.com/>

Портал фундаментального химического образования России <http://www.chemnet.ru>

ХуМуК: сайт о химии для химиков <http://www.xumuk.ru/>

Химический сервер <http://www.Himhelp.ru>.

www.biblioclub.ru

<http://lib.ivanovo.ac.ru>

9. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Учебные аудитории:

- для проведения занятий лекционного типа с комплектом специализированной учебной мебели и техническими средствами обучения, служащими для предоставления учебной информации большой аудитории;
- для проведения занятий семинарского типа, консультаций, текущего контроля и



Основная профессиональная образовательная программа
04.03.01 Химия
(Медицинская и фармацевтическая химия)

промежуточной аттестации с комплектом специализированной учебной мебели и техническими средствами обучения;

Лаборатория, оснащенная лабораторным оборудованием, комплектом специализированной учебной мебели и техническими средствами обучения.

Помещение для самостоятельной работы, оснащенное комплектом специализированной учебной мебели, компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в ЭИОС.

Демонстрационное оборудование и учебно-наглядные пособия для занятий лекционного типа, обеспечивающие тематические иллюстрации (демонстрационное оборудование (модели, макеты, демонстрационные устройства; электронные пособия (презентации), печатные пособия (таблицы, схемы).



Основная профессиональная образовательная программа
04.03.01 Химия
(Медицинская и фармацевтическая химия)

Автор(ы) рабочей программы дисциплины: доцент кафедры фундаментальной и прикладной химии, к.х.н. Дорофеева Ю.С.

Программа рассмотрена и утверждена на заседании кафедры фундаментальной и прикладной химии

«31» августа 2021 г., протокол № 1

Программа обновлена
протокол заседания кафедры № _____ от «_____» _____ 20__ г.
Согласовано:
Руководитель ОП _____ Л.Б. Кочетова
(подпись)

Программа обновлена
протокол заседания кафедры № _____ от «_____» _____ 20__ г.
Согласовано:
Руководитель ОП _____
(подпись)

Программа обновлена
протокол заседания кафедры № _____ от «_____» _____ 20__ г.
Согласовано:
Руководитель ОП _____
(подпись)