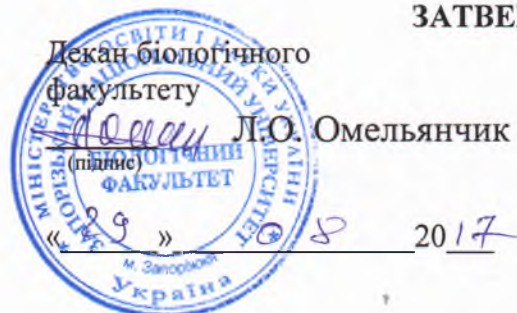


МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
ЗАПОРІЗЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
Кафедра хімії

ЗАТВЕРДЖУЮ



РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

ПП 3.04 «Кристалохімія»

Напрямок підготовки 6.040101 «Хімія»

Факультет біологічний

2017 – 2018 навчальний рік

Робоча програма «Кристалохімія» для студентів за напрямом підготовки 6.040101 «Хімія», 2017 р. – 10 с.

Розробник: Синяєва Н.П., к.х.н., ст. викладач

Робоча програма затверджена на засіданні кафедри хімії
Протокол від 29 серпня 2017 року № 1

Завідувач кафедри _____ О.А. Бражко
«29» _____ 2017 року

Схвалено науково-методичною радою біологічного факультету

Протокол від 29 серпня 2017 року № 1

Голова _____ В.В. Перетятко

1. Опис навчальної дисципліни

Найменування показників	Галузь знань, напрям підготовки, освітньо-кваліфікаційний рівень	Характеристика навчальної дисципліни	
		денна форма навчання	заочна форма навчання
Кількість кредитів – 1,5	Галузь знань 040101 Природничі науки Напрямок підготовки 6.040101 «Хімія»	Цикл професійної та практичної підготовки	
Модулів – 2	-	Рік підготовки:	
Змістових модулів – 2		3-й	–
Індивідуальне науково-дослідне завдання. реферат		Семестр	
Загальна кількість годин – 180		5-й	–
Тижневих годин для денної форми навчання: аудиторних – 2 самостійної роботи студента – 2	Освітньо-кваліфікаційний рівень: бакалавр	Лекції	
		16 год.	–
		Лабораторні	
		32 год.	–
		Самостійна робота	
		132 год.	–
		Індивідуальні завдання	
-		-	
		Вид контролю: залік	

Співвідношення кількості годин аудиторних занять до самостійної та індивідуальної роботи становить: для денної форми – 1:1.

2. Мета та завдання навчальної дисципліни

Курс «Кристалохімія» є необхідною складовою вивчення хімії. Він дає можливість вивчити основні поняття з кристалохімії, необхідні для розуміння про кристалічні структури, основи дифракційних методів, загальні принципи кристалічних структур, обговорення (з позиції термодинаміки) важливих кристалохімічних явищ, використання кристалохімічних даних для обговорення складу кристалів та опис особливостей різних класів хімічних сполук (по хімічній систематиці).

Курс «Кристалохімія» розрахований для студентів 3 курсу біологічного факультету денної форми навчання напряму підготовки 6.040101 «Хімія».

Курс складається з двох навчальних модулів: «Кристаліграфічні способи опису кристалів», «Кристалохімічні способи опису атомної будови кристалів».

Мета навчального курсу – сформувати у студентів основні поняття кристалохімічних способів опису атомної будови кристалів, властивості вільних атомів та зміну цих властивостей, уяву про хімічний зв'язок в кристалах, а також сучасні моделі, уяви про стійкість структурного типу.

Завдання навчальної дисципліни – вивчення способів опису і зображення атомної будови кристала, сил та енергії зщеплення атомів в кристалі, категорій кристалохімії, сучасних методів кристалохімічного прогнозування.

У результаті вивчення навчальної дисципліни студент повинен

знати:

- основні поняття в кристалохімії. Властивості кристалів.
- фактори, які визначають структуру кристалів. Просторові ґратки Браве.
- систематику кристалічних структур.
- типи хімічного зв'язку в кристалах.
- появи ізоморфізму, поліморфізму.
- кристалохімічні закономірності в періодичній системі Д.І. Менделєєва.
- кристалохімію інтерметалічних, неорганічних, органічних та складних сполук.

вміти:

- використовувати знання при вивченні складу хімічних сполук.
- визначати структурний клас та групи симетрії неорганічних сполук.
- накреслити проекцію структури сполуки.
- визначити в органічних, координаційних сполуках специфічні міжмолекулярні контакти.
- користуватися інформацією при ідентифікації сполук за рівняннями Лауе, Вульфа-Брегга.
- вміти використовувати інформацію рентгеноструктурного аналізу.

3. Програма навчальної дисципліни

Змістовий модуль I. Кристаліграфічні способи опису кристалів.

Тема 1. Вступ. Основні властивості кристалів.

Тема 2. Симетрія зовнішніх форм кристалів.

Тема 3. Геометрія зовнішніх форм кристалів. Просторові ґратки.

Тема 4. Методи дослідження кристалів. Фактори, що визначають структуру кристалів.

Змістовий модуль II. Кристалохімічні способи опису будови кристалів.

Тема 1. Типи хімічного зв'язку в кристалах. Кристалічні структури. Структурна гомологія.

Тема 2. Засоби зображення атомного складу кристала в термінах щільових кульових упаковок. Координаційні поліедри.

Тема 3. Періодичний закон та властивості атомів. Використання кристалохімічних даних для вивчення складу кристалів.

5. Теми лекційних занять

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
1	2	2
1	Вступ. Основні властивості кристалів.	2
2	Симетрія зовнішніх форм кристалів.	2
3	Геометрія зовнішніх форм кристалів. Просторові ґратки.	2
4	Методи дослідження кристалів. Фактори, що визначають структуру кристалів.	2
5	Типи хімічного зв'язку в кристалах. Кристалічні структури.	2
6	Структурна гомологія.	2
7	Засоби зображення атомного складу кристала в термінах щільових кулькових упаковок.	2
8	Періодичний закон та властивості атомів. Використання кристалохімічних даних.	2
	Всього	16

6. Теми лабораторних занять

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
1	2	3
1	Кристалічні структури твердих тіл. Основні формули та визначення параметрів кристалу	2
2	Вирощування кристалів з розчинів	2
3	Гномостереографічні проекції граней, прості символи граней	2
4	Ознайомлення з обладнанням рентгеноструктурного аналізу. Ідентифікація сполук	2
5	Повний опис кристалічного багатогранника	2
6.	Кулькові упаковки, проекції комірок, тип ґраток	2
7.	Виведення кристалохімічних формул сполук	2
8	Повний аналіз просторової структури. Ознайомлення з методами уточнення пробної структури кристала	2
	Всього	16

7. Самостійна робота

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
1	2	2
1	Вступ. Основні властивості кристалів.	2
2	Симетрія зовнішніх форм кристалів	2
3	Геометрія зовнішніх форм кристалів.	2
4	Методи дослідження кристалів.	4
5	Типи хімічного зв'язку в кристалах. Кристалічні структури. Структурна гомологія.	2
6	Засоби зображення атомного складу кристала в термінах щільових кулькових упаковок.	2
7	Періодичний закон та властивості атомів. Використання кристалохімічних даних для вивчення складу кристалів.	4
8	Кристалохімічні радіуси атомів. Металічні та іонні радіуси. Ковалентні та ван-дер-вальсові радіуси.	4
	Всього	22

8. Індивідуальні завдання

Для виконання індивідуального завдання студент повинен написати реферат на одну із тем.

Критерії оцінювання

виконання і захисту студентом індивідуального завдання (20 балів)

1. Цілісність, систематичність, логічна послідовність викладу матеріалу (4 бали).
2. Повнота розкриття питання; уміння формулювати власне відношення до проблеми, робити аргументовані висновки (6 балів).
3. Опрацювання сучасних наукових інформаційних джерел (1 бал).
4. Акуратність оформлення роботи (2 бали).
5. Захист виконаного індивідуального завдання (4 бали): **4 бали** – відповідь бездоганна за змістом, студент вільно володіє матеріалом, чітко і повно відповідає на запитання викладача, поставлених в ході відповіді студента; **3 бали** – відповідь розкрита, студент вільно володіє матеріалом, але містить деякі неточності та помилки; **2 бали** – відповідь повна, студент допускає помилки в основних питаннях; **1 бал** – студент в загальній формі розбирається у матеріалі, відповідь неповна, поверхова).
6. Надання роботи на електронному носії (3 бали): **3 бали** – презентація роботи; **2 бали** – електронний варіант тексту с рисунками та таблицями; **1 бал** – рукописний варіант роботи.

Теми рефератів

1. Загальні властивості кристалів.
2. Геометричні (стереохімічні) характеристики структури. Координаційне число, координаційні багатокутники.
3. Симетрія координаційних поліедрів. молекул та складних іонів.
4. Способи візуалізації кристалічних структур.
5. Поняття структурного типу, його характеристики. Ізоструктурність (ютипність), антиізоструктурність, гомотипія, гетеротипія.
6. Типи хімічного зв'язку в кристалах, основні їх характеристики.
7. Кристалохімічні радіуси. Поляризація іонів. Потенціальна енергія іонної ґратки. Стала Маделунга. Міжатомна відстань та міцність зв'язку, валентний напруг зв'язку.
8. Гомодесмічні та гетеродесмічні структури, структурні одиниці кристала. Структурні мотиви: молекулярні (островні), цепочечні (ланцюгові), слоїсті, каркасні, координаційні.
9. Методи вивчення кристалічної структури.
10. Кристалохімічні умови стійкості іонних кристалів (правила Магнуса, Гольдшмідта, Полінга, О'Киффа). Опис структур в термінах кульових упаковок.
11. Поняття про ізоморфізм. Основні типи твердих розчинів. Правила Вегарда, Ретгерса, Гольдшмідта. Нестехіометричні сполуки, дальтонида, бертоліди. Аномальний ізоморфізм. Епітаксія.
12. Поліморфізм, політипія. Гомологічні ряди структур. Види генезиса та родства структур. Класифікація структурних типів.
13. Найважливіші структури простих речовин – металів, неметалів. Правило Юм-Розері. Структурні типи бінарних сполук: NaCl, CsCl, ZnS (сфалерит, вюрцит); NiAs, PbO, CaF₂, FeS(пірит), TiO₂ (рутил); CdI₂, SiO₂ (9-кристобаліт). «Електронні» правила в ковалентних сполуках.
14. Молекулярні структури. Типи внутрішньо молекулярного та міжмолекулярного зв'язку, специфічні міжмолекулярні взаємодії. Структура льоду. Гидротита гідрогенозв'язані структури. Сольвати. Упаковка молекул в кристалі, правило Китайгородського.
15. Залежність різних властивостей кристала від його складу. Структура та механічні властивості: твердість, спайність, сегнетоупругість. Симетрія кристалу, його оптичні та електричні властивості. Поняття про магнітну структуру.

16. Сучасні джерела кристалохімічної інформації. Бази структурних та рентгенографічних даних.

17. Хімічні задачі, що рахують за допомогою структурного аналізу та кристалохімії.

9. Методи навчання

Для вивчення дисципліни «Кристалохімія» використовуються наступні методи навчання:

- словесні методи навчання: лекції, пояснення, бесіда;
- наочні методи навчання: ілюстрації, демонстрації, відео, презентації;
- практичні методи навчання: лабораторні роботи.

10. Методи контролю

Тестовий контроль, фронтальна контролююча бесіда, індивідуальне усне опитування, модульна контрольна робота, залік.

11. Розподіл балів, які отримують студенти

Поточний контроль знань			Залік	Сума
Контрольний модуль 1	Контрольний модуль 2	Індивідуальне завдання		
Змістовий модуль 1	Змістовий модуль 2			
30	30	20	20	100

Шкала оцінювання: національна та ECTS

ЗА ШКАЛОЮ ECTS	За шкалою університету	За національною шкалою	
		Екзамен	Залік
A	90 – 100 (відмінно)	5 (відмінно)	Зараховано
B	85 – 89 (дуже добре)	4 (добре)	
C	75 – 84 (добре)		
D	70 – 74 (задовільно)	3 (задовільно)	
E	60 – 69 (достатньо)		
FX	35 – 59 (незадовільно – з можливістю повторного складання)	2 (незадовільно)	Не зараховано
F	1 – 34 (незадовільно – з обов'язковим повторним курсом)		

Об'єктом рейтингового оцінювання знань студентів є програмний матеріал дисципліни, засвоєння якого перевіряється під час контролю. Критерії комплексного оцінювання доводяться до студентів на початку викладання навчальної дисципліни.

Максимально можлива бальна оцінка, яку може набрати студент за всі модулі дисципліни і екзамен, дорівнює **100 балам**.

Лабораторне заняття складається з двох частин. **Перша частина занять** – теоретична, включає різні форми виявлення ступеня засвоєння теоретичного матеріалу. **Друга частина** відводиться на виконання лабораторної роботи і оформлення звіту по ній.

Лабораторні роботи містять в собі індивідуальні (лабораторні або практичні) завдання з кожної теми модулю. За результатами виконання і захисту всіх лабораторних робіт студент одержує **бальну оцінку** за практикум з даного модулю, яка заноситься до **системи рейтингу (максимально 15 балів)**. Лабораторна робота за кожною темою модуля повинна бути оформлена у лабораторному журналі та здана викладачеві до встановленого планом терміну.

Виконана лабораторна робота комплексно оцінюється викладачем, враховуючи такі **критерії**:

- повнота розкриття питання;
- правильність відповідей (правильне, чітке, достатньо глибоке викладення теоретичних понять);
- ступінь усвідомлення програмного матеріалу і самостійність міркувань;
- новизна навчальної інформації; рівень використання наукових (теоретичних знань);
- вміння користуватися засвоєними теоретичними знаннями;
- акуратність виконання роботи;
- цілісність, систематичність, логічна послідовність, уміння формулювати висновки;
- правильне заповнення таблиць протоколів;
- акуратність оформлення роботи.

Результат виконання і захисту студентом кожної лабораторної роботи оцінюється окремо за такою шкалою (3 бали):

- відвідування аудиторних занять – **1 бал**;
- виконання всіх завдань лабораторної роботи повністю без помилок – **1 бал**;
- захист лабораторної роботи на занятті – **1 бал**.

Результат виконання домашньої самостійної підготовки до кожного лабораторного заняття оцінюється окремо за такою шкалою (7 балів):

- виконання письмової домашньої роботи – **3 бали**;
- відповіді на теоретичні питання на занятті – **3 бали**;
- активна участь, доповнення на занятті – **1 бал**.

Критерії оцінювання письмової домашньої роботи:

- **3 бали** виставляються студенту тоді, коли всі завдання виконані правильно, письмово відтворені у відповідності до вимог;
- **2 бали** виставляються студенту тоді, коли він виявляє розуміння основних понять, положень і фактів, проте завдання виконані не в повному обсязі або містять помилки;
- **1 бал** виставляється студенту тоді, коли домашня підготовка та завдання виконані частково;
- **0 бал** виставляється студенту тоді, коли домашнє завдання не виконано.

Критерії оцінювання відповіді на теоретичні питання на занятті:

- **3 бали** виставляються студенту тоді, коли його відповідь бездоганна за змістом, формою та обсягом. Це означає, що студент в повній мірі за програмою засвоїв увесь програмний матеріал, показує знання не лише основної, а й додаткової літератури, наводить власні міркування, робить узагальнюючі висновки, вдало наводить приклади;
- **2 бали** передбачає також високий рівень знань і навичок. При цьому відповідь повна, логічна, з елементами самостійності, але містить деякі неточності або пропуски в неосновних питаннях. Можливе слабке знання додаткової літератури, недостатня чіткість в визначенні понять;
- **1 бал** виставляється студенту тоді, коли він в загальній формі розбирається у матеріалі, але відповідь неповна, неглибока, містить неточності, робить помилки при формулюванні понять, відчуває труднощі, застосовуючи знання при наведенні прикладів.

– **0 балів** ставиться коли студент не знає значної частини програмного матеріалу, допускає суттєві помилки при висвітленні понять, на додаткові питання відповідає не по суті, робить велику кількість помилок в усній відповіді.

Тестові випробування складаються з 5 тестових завдань, які оцінюються по 1 балу кожний (5 балів).

До **семінарських занять** студенти оформлюють таблиці, де вони відображають основні характеристики основних кристалохімічних сполук: кристалічний стан, геометрію зовнішніх форм кристалів, просторові ґратки, кристалічну структуру, методи дослідження, відомості з теорії зв'язку (**15 балів**).

Бальна система стимулювання активності студентів (3 бали).

Ця система додаткових балів вводиться з метою заохочування студентів до планомірної, систематичної роботи по вивченню теоретичного матеріалу, передбаченого даною дисципліною на лекційних заняттях, передбачених програмою модуля.

Наприкінці вивчення модулю кожен студент виконує завдання поточного модульного контролю, за результати виконання одержує **бальну оцінку (12 балів)**, яка заноситься до **системи рейтингу**.

Результати виконання індивідуального завдання також заносяться до **системи рейтингу (20 балів)**.

Підсумковий модульний (семестровий) контроль у формі **заліку**.

Студентові, який не з'явився в продовж навчального семестру на поточний модульний контроль згідно із встановленим кафедрою графіком, **виставляється незалік з відповідного модуля**.

12. Методичне забезпечення

1. Курс лекцій з кристалохімії.
2. Словник з основними поняттями з кристалохімії.
3. Лабораторні роботи.
4. Плакати, презентації до тем лекцій.
5. Наочність: таблиці, схеми, рисунки.
6. Відеофільми.
7. Методичні розробки до написання індивідуального завдання.
8. Методичні розробки до самостійної роботи.
9. Тестові завдання.

13. Рекомендована література

Основна

1. В.С. Урусов, Н.Н. Еремін. Кристаллохимия (краткий курс). – М.: Изд. МГУ, 2010.
2. Остроумов М.Н. Амазонский камень. Минералогия, кристаллохимия, типоморфизм Остроумов М.Н., Платонов А.Н., Попов В.А. – М.: Политехника, 2008. – 272 с.
3. Егоров-Тисменко С.П. Кристаллография и кристаллохимия / Сергей Петрович Егоров-Тисменко. – М.: Университет, 2006. – 592 с.
4. Егоров-Тисменко Ю.К. Кристаллография и кристаллохимия. – М., 2005.
5. Артамонов В.А. Группы и их приложения в физике, химии, кристаллографии / В.А. Артамонов, Ю.Л. Словохотов – М.: Академия, 2005. – 268 с.

6. Зоркий П.М. Программа для анализа межмолекулярных контактов в органических кристаллах / П.М. Зоркий, А.А. Стукалин // Кристаллография. 2005, Т. 50, №2. – С. 369-375.
7. В.С. Урусов, Н.Н. Еремин. Кристаллохимия (краткий курс). – М.:Изд.МГУ, 2004.
8. Котельникова Е.Н. Кристаллохимия парафинов. Методы исследования, результаты, поведение в природе /Е.Н. Котельникова, С.К. Филатов. – М.: Нева, 2002. – 352 с.
9. Магарилл С.А. Кристаллохимия / Сергей Александрович Магарилл – М.: МГУ, 2001. – 174 с.
10. Бейдер Р. Атомы в молекулах. – М., 2001. – 156 с.

Додаткова

1. Неретин И.С. Кристаллохимия фуллеренов / И.С. Неретин, Ю.Л. Словохотов // Успехи химии, 2004, Т. 73. – С. 492-525.
2. Урусов В.С. Таусон В.Л., Акимов В.В. Геохимия твердого тела. – М., 1997.
3. Бокий Г.Б. Систематика природных силикатов / Георгий Борисович Бокий. – М.: Космосинформ, 1997. – 192 с.
4. Егоров-Тисменко Ю.К. Кристаллография / Егоров-Тисменко Ю.К., Литвинская Г.П., Загальская Ю.Г. – М.: МГУ, 1992. – 356 с.
5. Урусов В.С. Теоретическая кристаллохимия / Виталий Сергеевич Урусов – М.: МГУ, 1987. – 184 с.
6. Зоркий П.М. Симметрия молекул кристаллических структур. – М.: Изд. МГУ, 1986. – 232 с.
7. Загальская Ю.Г. Руководство к практическим занятиям по кристаллохимии / Загальская Ю.Г. Литвинская Г.П., Егоров-Тисменко Ю.К. – М.: МГУ, 1983. – 140 с.
8. Порай-Каниец М.А. Основы структурного анализа химических соединений / Михаил Алексеевич Порай-Кашиц – М.: Высшая школа, 1982. – 238 с. Пущаровский Д.Ю. Структура и свойства кристаллов. – М., 1982.

14. Інформаційні ресурси

1. <http://www.chem.msu.ru/rus/cryst/crychem/posobiya.htm>
- http://ru.nfau.in.ua/?page_id=3746 - Электронная библиотека Химического факультета МГУ
2. <http://cryst.geol.msu.ru> – Кафедра кристаллографии и кристаллохимии МГУ
3. http://ximfak.narod.ru/1_kurs/kristalloximia.htm - Електронна бібліотека Хімфаку ННГУ