

Аннотация к курсу «Кристаллохимия»

В курсе «Кристаллохимия» рассматриваются общие принципы строения кристаллов и классификации кристаллических структур, представления о связи между структурой кристаллов и природой химического взаимодействия атомов, о связи структуры с физико-химическими свойствами кристаллических веществ и о современных задачах кристаллохимии как науки.

Цель изучения дисциплины – формирование у слушателей представления о строении кристаллов, о связи его с физико-химическими свойствами кристаллов и природой химического взаимодействия.

Задачи дисциплины

Рассмотреть основные законы и понятия в области кристаллохимии, на основании чего сформировать у слушателей понятийный аппарат по фундаментальным вопросам кристаллохимии.

Дисциплина вносит вклад в формирование следующих компетенций:

Способность к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях (УК-1).

Готовность участвовать в работе российских и международных исследовательских коллективов по решению научных и научно-образовательных задач (УК-3).

Способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий (ОПК-1).

Способность к самостоятельному проведению научно-исследовательской работы и получению научных результатов, удовлетворяющих установленным требованиям к содержанию диссертаций на соискание ученой степени кандидата химических наук по направленности неорганическая химия (ПК-1).

Способность формулировать проблемы и задачи научного исследования; получать новые достоверные факты на основе научного анализа эмпирических данных; обобщать полученные результаты в контексте ранее накопленных в науке знаний; формулировать выводы и практические рекомендации на основе репрезентативных и оригинальных результатов исследований (ПК-2)

В результате освоения дисциплины (модуля) аспиранты должны

- **иметь представление:** о месте кристаллохимии в системе химических наук и ее роли в исследовании и изучении материи;

- **знать:** простейшие группы самосовмещений, закрытые элементы симметрии, взаимосвязь между элементами симметрии, операциями симметрии, международную символику и символику Шенфлиса для обозначения точечных групп, точечные группы низшей, средней и высшей категории, Координатные системы кристаллов, кристаллографические точечные группы, открытые элементы симметрии, трехмерные группы трансляций- решетки Браве, обозначения пространственных групп симметрии, обозначения узлов, рядов, плоскостей, правила определения числа формульных единиц, типы плотных и плотнейших упаковок, соотношение определенных по геометрии пустот, возможных в плотных и плотнейших упаковках, положение тетраэдрических и октаэдрических пустот в гексагональной и кубической кладках, основные структурные типы металлов, неметаллов, бинарных соединений (типы NaCl, CsCl, ZnS(сфалерит .вюрцит), флюорита и антифлюорита, рутила, корунда).

- **владеть:** практическими навыками исследования кристаллических структур.

- **уметь:** уметь осуществлять симметрические преобразования геометрическим и алгебраическим способами, определять точечную группу конечной фигуры, молекулы с определенной геометрией по набору закрытых элементов симметрии, изобразить проекцию элементов симметрии; определять все элементы симметрии соответствующие

определенной точечной группе, определить кристаллографический класс, сингонию, точечную группу кристалла, определять тип элементарной ячейки(решетки Браве), определять положение узла, ряда плоскости в кристаллической решетке по их обозначениям; определять число формульных единиц в кристаллической структуре и рассчитывать рентгенографическую плотность, определять положение тетраэдрических и октаэдрических пустот в гексагональной и кубической кладка, изобразить проекцию структуры, определить пространственную группу для изученных структур, тип координационного полиэдра, рассчитать рентгенографическую плотность и число формульных единиц.

Дисциплина относится к курсам по выбору аспиранта. Трудоёмкость освоения дисциплины составляет 3 зачетных единицы (з.е.) или 108 академических часа, в том числе 2 ч аудиторных занятий и 106 час самостоятельной работы. Форма контроля – зачет. Дисциплина имеет теоретический характер. В программе подготовки аспиранта программа направлена формирование теоретических основ кристаллохимии.

Изучение дисциплины опирается на знания, умения и навыки, приобретенные при изучении химических дисциплин в объеме программ подготовки бакалавриата и магистратуры по направлению “Химия”: общая и неорганическая химия, физическая химия, физико-химические методы исследования, химия твердого тела.

СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Введение.

Предмет и задачи кристаллохимии. Представление о кристалле. Законы роста кристалла, закон постоянства углов, закон рациональных отношений. Понятие об «идеальном кристалле». Реальные кристаллы. *Методы получения кристаллов.*

Раздел 1 Основы геометрической кристаллографии.

Тема 1

Понятие о симметрии. Закрытые элементы симметрии и симметрические преобразования.

Понятие о симметрии. Элементы симметрии и симметрические преобразования. Элементы математической теории групп. Циклические группы. Простейшие группы самосовмещений. Закрытые операции симметрии и их описание с помощью матриц преобразования координат Элементы симметрии как циклические группы. Взаимодействие операций и элементов симметрии. Таблица умножения – взаимосвязь между операциями симметрии в группе.

Тема 2

Точечные группы симметрии и их международная символика и символика Шенфлиса

Точечные группы симметрии и их международная символика и символика Шенфлиса. Системы эквивалентных позиций. Единичные и полярные направления. Представление группы. Семейства точечных групп низшей, средней и высшей категорий. Понятие о простой форме.

Тема3. Кристаллографические точечные группы. Сингонии и категории. 32 кристаллографические точечные группы. Координатные системы кристаллов.

Тема 4. Открытые операции симметрии, элементы симметрии

Открытые операции симметрии, элементы симметрии и их взаимодействие. Трансляции Двумерные и трехмерные группы трансляций. Решетки Браве. Пространственные группы. Кратность и симметрия эквивалентных позиций. Индексы

узлов, рядов, сеток. Решетка и структура. Число формульных единиц в ячейке. Рентгенографическая плотность.

Раздел 2. Методы исследования кристаллической структуры вещества. Основы рентгеноструктурного анализа.

Тема 5.

Дифракция рентгеновских лучей. Условия Лауэ. Уравнение Вульфа-Брэгга. Методы рентгенографии: метод Лауэ, метод вращения, метод порошка. Рентгенофазовый анализ.

Раздел 3. Основные понятия, представления кристаллохимии.

Тема 6 . Теория плотнейших упаковок

Эффективные радиусы атомов и ионов (ионные, ковалентные, металлические, ван-дер-ваальсовы). Условность кристаллохимических радиусов.

Химическая связь в кристаллах: ковалентная, ионная, металлическая. Ван-дер-Ваальсово взаимодействие. Межатомное расстояние и кратность связи. Систематика кристаллических структур по типу связи. Гомо- и гетеродесмические структуры..

Энергия кристаллической решетки. Энергия ионных, ковалентных, металлических кристаллических структур. Энергия решетки с межмолекулярными связями.

Плотность упаковки. Теория плотнейших упаковок. Кубическая и гексагональные кладки. Тип пустот в плотнейших упаковках

Раздел 4 Важнейшие понятия кристаллохимии.

Тема 7

Представление структур в виде: расположения атомов в вершинах шаровых кладок; с помощью координационных многогранников. Структурные типы и изоструктурность.. Основные, цепочные, слоистые, каркасные, координационные структуры. Морфотропия Морфотропные ряды. Изо- и гетеровалентный изоморфизм. Изодиморфизм. Структуры вычитания и внедрения. Классификация полиморфных превращений.

Тема 8. Полиморфизм. Классификация полиморфных превращений. Влияние внешних условий на устойчивость полиморфных модификаций

Раздел 5 Избранные главы систематической кристаллохимии

Тема 9 Кристаллохимия простых веществ и бинарных соединений.

Основные структурные типы металлов (Cu, α -Fe, Mg). Связь структуры с физическими свойствами. Структуры простых веществ-неметаллов. Соединения со структурой алмаза, графита. Координация атомов. Изменение характера структуры по группам Периодической таблицы.

Структурные соединения металлов с неметаллами (AX), описываемые в терминах шаровых упаковок и кладок. Факторы, определяющие выбор структурного типа. Роль типа химической связи

Тема 10 Кристаллохимия тройных соединений, силикатов, органических соединений.

Структурный тип перовскита. Сегнетоэлектрические свойства веществ с искаженной структурой. Структурный тип шпинели. Нормальная и обращенная шпинель. Структура типа K_2NiF_4 . Основные представления о кристаллохимии силикатов. Представление о кристаллохимии органических соединений.