

Минобрнауки России
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ВОРОНЕЖСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИНЖЕНЕРНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ»

УТВЕРЖДАЮ
Проректор по учебной работе

_____ Василенко В.Н.

" 26 " мая 2022 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Кристаллохимия

(наименование дисциплины)

Специальность
**18.05.02 Химическая технология материалов
современной энергетики**

специализация № 3
**Технология теплоносителей и радиозекология ядерных
энергетических установок**

Квалификация выпускника
Инженер

Разработчик _____ Козадерова О. А. _____
(подпись) (дата) (Ф.И.О.)

СОГЛАСОВАНО:

Заведующий кафедрой НХиХТ _____
(наименование кафедры, являющейся ответственной за специальность)

_____ Нифталиев С.И. _____
(подпись) (дата) (Ф.И.О.)

1. Цели и задачи дисциплины

Целями освоения дисциплины «Кристаллохимия» является:

- формирование системы знаний по кристаллохимии: изучение фундаментальных понятий, представлений и физико–химических моделей, используемых при описании структуры химических соединений в кристаллическом состоянии.
- формирование общекультурных компетенций обучающегося.

Задачи дисциплины – сформировать у обучающегося способности осуществлять

- сбор и анализ литературы по заданной тематике; исследовать состав, строения и свойства кристаллических веществ, создавать и разрабатывать новые перспективные материалы, решать фундаментальные и прикладные задачи в химической технологии;
- сбор и анализ информации с использованием открытых источников (кристаллографических баз данных)

Объектами профессиональной деятельности являются:

- руды, концентраты и вторичное сырье, содержащее уран, цирконий, радиоактивные элементы, редкие металлы ядерного назначения, их химические соединения и материалы на их основе.

2. Перечень планируемых результатов обучения, соотнесенных с планируемыми результатами освоения образовательной программы

В результате изучения учебной дисциплины обучающийся должен:

№ п/п	Код компетенции	Содержание компетенции	В результате изучения учебной дисциплины обучающийся должен:		
			знать	уметь	владеть
1	ОК-1	- способности представить современную картину мира на основе целостной системы естественнонаучных и математических знаний, ориентироваться в ценностях бытия, жизни, культуры;	фундаментальные понятия и методологию кристаллохимии основные законы кристаллохимии, методы анализа и моделирования кристаллических веществ	применять теоретические основы кристаллохимии для анализа экспериментальных данных исследовать кристаллические вещества	навыками применения теоретических основ кристаллохимии в профессиональной деятельности. методами анализа и грамотного решения теоретических и практических проблем кристаллохимии

3. Место дисциплины в структуре ОП ВО

3.1. Дисциплина кристаллохимия относится к блоку 1 ОП и ее части: базовой.

Изучение дисциплины основано на знаниях умениях и навыках, полученных при изучении обучающимися дисциплин *Математика, Физика, Общая химия, Неорганическая химия.*

Дисциплина является предшествующей для дисциплин: *Технология теплоносителей ядерных энергетических установок, Химическая технология редких и редкоземельных элементов, Производственная практика, преддипломная практика.*

4. Объем дисциплины и виды учебной работы

Общая трудоемкость дисциплины составляет **4** зачетные единицы.

Виды учебной работы	Всего часов	Семестр
		6
	акад. ч	акад. ч
Общая трудоемкость дисциплины	144	144
Контактная работа, в т. ч. аудиторные занятия:	55	55
Лекции	18	18
<i>в том числе в форме практической подготовки</i>	-	-
Лабораторные занятия	36	36
<i>в том числе в форме практической подготовки</i>	36	36
Консультации текущие	0,9	0,9
Виды аттестации (зачет)	0,1	0,1
Самостоятельная работа:	89	89
Проработка материалов по конспекту лекций	$36 \text{ ч} \cdot 0,5 \text{ ч} = 18$	18
Проработка материала по учебнику	$17,5 \text{ п.л.} \cdot 2 \text{ ч} = 35$	35
Оформление лабораторных работ	$18 \text{ с} \cdot 2 = 36 \text{ ч}$	36

5 Содержание дисциплины, структурированное по разделам с указанием отведенного на них количества академических часов и видов учебных занятий

5.1 Содержание разделов дисциплины

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела	Трудоемкость раздела, часы
1	Теоретические основы кристаллохимии.	<p>Введение. Кристаллография и кристаллохимия. Предмет и задачи кристаллохимии. Основные аспекты кристаллохимии: стереохимический, кристаллоструктурный, характеристика химических связей, зависимость свойств кристаллов от их строения. Многообразие кристаллических структур. Кристаллохимия как часть химии и кристаллографии.</p> <p>Закрытые операции и элементы симметрии. Теоремы о сочетаниях закрытых элементов симметрии. Кристаллографические точечные группы симметрии. Международные символы и символы Шенфлиса. Единичные и полярные направления. Стереографические проекции кристаллов. Трансляции. Кристаллографические системы координат. Сингонии. Элементарная ячейка. Кристаллическая решетка. Решетки Бравэ.</p> <p>Открытые операции и элементы симметрии. Пространственные группы симметрии. Общие и частные правильные системы точек. Узловые ряды и узловые сетки. Межплоскостные расстояния. Миллеровские индексы. Число формульных единиц и рентгеновская плотность. Координационное число и координационный полиэдр.</p>	56
2	Описание, систематика и анализ кристаллических структур	<p>Структурные типы. Полиэдрический метод изображения структур. Представление о теории плотнейших шаровых упаковок. Простейшие структурные типы и соотношения между ними. Описание структур в терминах шаровых упаковок и кладок. Семейства кристаллических структур. Островные, цепочечные, слоистые и каркасные структуры. Кристаллоструктурные характеристики атомов и химических связей. Основные типы кристаллохимических радиусов атомов (ионные, ковалентные, металлические, орбитальные, ван-дер-ваальсовы). Систематика кристаллических структур по типу связи.</p> <p>Основы рентгено-структурного анализа. Дифракция рентгеновских лучей. Уравнение Брэгга-Вульфа. Основные методы рентгенографии. Основы рентгенофазового анализа. Этапы анализа структуры кристалла. Представление о методах определения координат атомов. Современные источники кристаллоструктурной информации.</p> <p>Структуры простых веществ. Основные структурные типы. Структура воды, углекислого газа. Кристаллохимия урана, тория, плутония. Кристаллохимия редких элементов (литий, бериллий, галлий, индий, германий, ванадий, титан, молибден, вольфрам, редкоземельные элементы, инертные газы). Строение реальных кристаллов. Важнейшие типы дефектов. Влияние дефектов кристаллов на их свойства.</p>	87

5.2 Разделы дисциплины и виды занятий

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Лекции, час	Л час	СРО, час
1	Теоретические основы кристаллохимии.	9	9	38
2	Описание, систематика и анализ кристаллических структур	9	27	51

5.2.1 Лекции

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Тематика лекционных занятий	Трудоемкость, час
1	Теоретические основы кристаллохимии.	Введение в кристаллохимию.	1
		Основные понятия структурной кристаллографии. Описание решетки кристалла.	2
		Пространственные группы симметрии. Операции и элементы симметрии.	2
		Определение координат атомов в элементарной ячейке кристалла.	1
		Определение параметров решетки и симметрии кристалла. Методы изображения кристаллических структур.	2
		Основные типы кристаллохимических радиусов атомов. Систематика кристаллических структур по типу связи.	1
2	Описание, систематика и анализ кристаллических структур	Основы рентгено-структурного анализа. Дифракция рентгеновских лучей в кристалле. Современные источники кристаллоструктурной информации	1
		Структуры простых веществ. Типы изоморфизма. Твердые растворы. Типы полиморфизма. Политипия.	1
		Структуры бинарных соединений. Интерметаллиды. Структуры соединений металлов с неметаллами. Особенности координации переходных и непереходных металлов.	1
		Важнейшие структурные типы тернарных соединений. Островные структуры солей кислородсодержащих кислот.	1
		Кристаллохимия редких элементов (литий, бериллий, галлий, индий, германий, ванадий, титан, молибден, вольфрам, редкоземельные элементы, инертные газы)	1
		Органическая кристаллохимия	2
		Строение реальных кристаллов.	2

5.2.2 Практические занятия не предусмотрены

5.2.3 Лабораторный практикум

№	Наименование раздела дисциплины	Наименование практических работ	Трудоемкость, час
1	Теоретические основы кристаллохимии	Точечные группы симметрии. Стереографические проекции кристаллов.	4
		Сингонии. Элементарная ячейка. Кристаллическая решетка. Решетки Бравэ. Открытые операции и элементы симметрии.	3
		Пространственные группы симметрии.	2
2	Описание, систематика и анализ кристаллических структур	Современные источники кристаллоструктурной информации. Важнейшие компьютерные базы кристаллоструктурных данных	3
		Определение индексов Миллера грани, узлового ряда, вершин кристаллических многогранников. Плотнейшие шаровые упаковки. Описание структур в терминах шаровых упаковок.	4
		Структуры простых веществ и бинарных соединений. Важнейшие структурные типы и соотношения между ними. Распознавание кристаллических структур.	4
		Кристаллохимия редких элементов (литий, бериллий, галлий, индий, германий, ванадий, титан, молибден, вольфрам, редкоземельные элементы, инертные газы)	4
		Органическая кристаллохимия	4
		Строение реальных кристаллов.	4
		Особенности радиолиза твердых тел	4

5.2.4 Самостоятельная работа обучающихся (СРО)

№ п/п	Наименование раздела дисциплины	Вид СРО	Трудоемкость, час
1	Теоретические основы кристаллохимии	Проработка материалов по конспекту лекций	9
		Проработка материала по учебнику	20
		Оформление лабораторных работ	9
2	Описание, систематика и анализ кристаллических структур	Проработка материалов по конспекту лекций	9
		Проработка материала по учебнику	15
		Оформление лабораторных работ	27

6 Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

6.1 Основная литература

1. Козадерова О. А., Нифталиев С. И. Основы кристаллохимии [Текст] : учеб . пособие / О. А. Козадерова, С. И. Нифталиев. – Воронеж : ВГУИТ, 2015. – 103 с.
2. Козадерова О. А., Нифталиев С. И. Основы кристаллохимии [Электронный документ] : учеб . пособие / О. А. Козадерова, С. И. Нифталиев. – Воронеж : ВГУИТ, 2015. – 103 с. Режим доступа: <http://biblos.vsu.ru/ProtectedView/Book/ViewBook/1100>.
3. Мюллер, У. Структурная неорганическая химия [Текст] / У. Мюллер; пер. с англ. А. М. Самойлова, Е. С. Рембезы ; под ред. А. М. Ховива. - Долгопрудный : Интеллект, 2010. - 352 с.

6.2 Дополнительная литература

4. Ярославцев, А. Б. Химия твердого тела. [Текст] / А. Б. Ярославцев. – М. : Научный мир, 2009. - 169 с
5. Кнотько, А. В. Химия твердого тела [Текст] : учебное пособие для студ., обуч. по спец. "Химия" (гриф УМО) / А. В. Кнотько, И. А. Пресняков, Ю. Д. Третьяков. - М. : Академия, 2006. - 304 с.
6. Егоров-Тисменко. Ю.К. Кристаллография и кристаллохимия [Текст] / Ю.К. Егоров-Тисменко – М.: Университет. 2005. - 589 с.
7. Пронкин, Н.С. Обеспечение безопасности хранилищ радиоактивных отходов предприятий ядерного топливного цикла : учебное пособие / Н.С. Пронкин, Р.Б. Шарафутдинов, В.И. Савандер. — Москва : НИЯУ МИФИ, 2011. — 232 с. Текст : электронный // Электронно-библиотечная система «Лань» : [сайт]. — URL: <https://e.lanbook.com/book/75762> — Режим доступа: для авториз. пользователей.
8. Пронкин, Н.С. Регулирование безопасности обращения с радиоактивными отходами : учебное пособие / Н.С. Пронкин, Р.Б. Шарафутдинов, Н.И. Гераскин. — Москва : НИЯУ МИФИ, 2011. — 264 с. Текст : электронный // Электронно-библиотечная система «Лань» : [сайт]. — URL: <https://e.lanbook.com/book/75763> — Режим доступа: для авториз. пользователей.

6.3 Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы обучающихся

1. Козадерова, О. А. Кристаллохимия [Электронный ресурс] : задания для самостоятельной работы обучающихся для студентов, обучающихся по специальности 18.05.02 - Химическая технология материалов современной энергетики очной формы обучения / О. А. Козадерова, С. И. Нифталиев; ВГУИТ, Кафедра неорганической химии и химической технологии. - Воронеж, 2019. - 20 с. – Режим доступа : <http://biblos.vsu.ru/ProtectedView/Book/ViewBook/5088>

6.4 Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины

Наименование ресурса сети «Интернет»	Электронный адрес ресурса
«Российское образование» - федеральный портал	https://www.edu.ru/
Научная электронная библиотека	https://elibrary.ru/defaultx.asp?
Национальная исследовательская компьютер-	https://niks.su/

ная сеть России	
Информационная система «Единое окно доступа к образовательным ресурсам»	http://window.edu.ru/
Электронная библиотека ВГУИТ	http://biblos.vsu.ru/megapro/web
Сайт Министерства науки и высшего образования РФ	https://minobrnauki.gov.ru/
Портал открытого on-line образования	https://npoed.ru/
Электронная информационно-образовательная среда ФГБОУ ВО «ВГУИТ»	https://education.vsu.ru/

6.5 Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины

Методические указания для обучающихся по освоению дисциплин (модулей) в ФГБОУ ВО ВГУИТ [Электронный ресурс] : методические указания для обучающихся на всех уровнях высшего образования / М. М. Данылиев, Р. Н. Плотникова; ВГУИТ, Учебно-методическое управление. - Воронеж : ВГУИТ, 2016. – Режим доступа : <http://biblos.vsu.ru/ProtectedView/Book/ViewBook/4288>

Освоение закрепленных за дисциплиной компетенций осуществляется посредством изучения теоретического материала на лекциях, практических занятиях, выполнения практических работ. Учебно-методический комплекс дисциплины размещен в Электронной информационно-образовательной среде ВГУИТ <http://education.vsu.ru/enrol/index.php?id=787>

6.6 Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине, включая перечень программного обеспечения и информационных справочных систем

Используемые виды информационных технологий:

- «электронная»: персональный компьютер и информационно-поисковые (справочно-правовые) системы;
- «компьютерная» технология: персональный компьютер с программными продуктами разного назначения (ОС Windows; MS Office);
- «сетевая»: локальная сеть университета и глобальная сеть Internet.

Microsoft Windows 7 (64 - bit)	Microsoft Windows Professional 7 Russian Upgrade Academic OPEN 1 License No Level #47881748 от 24.12.2010 г. http://eopen.microsoft.com
Microsoft Office Professional Plus 2010	Microsoft Office Professional Plus 2010 Russian Academic OPEN 1 License No Level #48516271 от 17.05.2011 г. http://eopen.microsoft.com
Microsoft Office 2007	Microsoft Office 2007 Russian Academic OPEN No Level #44822753 от 17.11.2008 http://eopen.microsoft.com
Microsoft Office 2010	Microsoft Office 2010 Russian Academic OPEN 1 License No Level #47881748 от 24.12.2010 г. http://eopen.microsoft.com
Microsoft Office Professional Plus 2013	Microsoft Office Professional Plus 2013 Russian Academic OPEN 1 License No Level #61280574 от 06.12.2012 г. http://eopen.microsoft.com
AdobeReaderXI	(бесплатное ПО) https://acrobat.adobe.com/ru/ru/acrobat/pdf-reader/volumedistribution.htm

- Тестовые задания в Электронной информационно-образовательной среде ВГУИТ <http://education.vsu.ru/>

7 Материально-техническое обеспечение дисциплины

1. Аудитория № 020 кафедры неорганической химии и химической технологии, предназначенная для проведения лекционных и практических занятий, оснащенная мультимедийной техникой: мультимедийный проектор Ben Q MW 519; сетевой коммутатор для подключения к компьютерной сети (Интернет);

2. Таблицы:

- 2.1. Периодическая система элементов Д. И. Менделеева
- 2.2. Электроотрицательность элементов
- 2.3. Таблица растворимости кислот, оснований, солей
- 2.4. Стандартные электродные потенциалы металлов
- 2.5. Плакаты по свойствам атомов химических элементов.

3. Модели пространственного строения молекул и кристаллических решеток.

4. Коллекция природных минералов, образцов простых и сложных веществ по каждой группе периодической системы химических элементов.

5. Аудитория № 39 кафедры неорганической химии и химической технологии для самостоятельной работы, оснащенная комплектами мебели для учебного процесса, компьютерами со свободным доступом в Интернет.

8 Оценочные материалы для промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине (модулю)

8.1 **Оценочные материалы** (ОМ) для дисциплины (модуля) включают в себя:

- перечень компетенций с указанием этапов их формирования в процессе освоения образовательной программы;
- описание показателей и критериев оценивания компетенций на различных этапах их формирования, описание шкал оценивания;
- типовые контрольные задания или иные материалы, необходимые для оценки знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций в процессе освоения образовательной программы;
- методические материалы, определяющие процедуры оценивания знаний, умений, навыков и (или) опыта деятельности, характеризующих этапы формирования компетенций.

8.2 Для каждого результата обучения по дисциплине (модулю) определяются показатели и критерии оценивания сформированности компетенций на различных этапах их формирования, шкалы и процедуры оценивания.

ОМ представляются отдельным комплектом и **входят в состав рабочей программы дисциплины (модуля)**.

Оценочные материалы формируются в соответствии с П ВГУИТ «Положение об оценочных материалах».

Документ составлен в соответствии с требованиями ФГОС ВО по специальности 18.05.02 – «Химическая технология материалов современной энергетики».

**АННОТАЦИЯ
К РАБОЧЕЙ ПРОГРАММЕ
ДИСЦИПЛИНЫ
«Кристаллохимия»**

Процесс изучения дисциплины направлен на формирование следующих компетенций :
- способности представить современную картину мира на основе целостной системы естественнонаучных и математических знаний, ориентироваться в ценностях бытия, жизни, культуры (ОК-1);

В результате освоения дисциплины студент должен:

Знать основные теоретические положения кристаллохимии; основные законы кристаллохимии, методы анализа и моделирования кристаллических веществ.

Уметь применять полученные знания для анализа экспериментальных данных, в том числе при разработке мероприятий по защите окружающей среды; исследовать кристаллические вещества.

Владеть навыками решать практические задачи и проводить научно-исследовательские работы с использованием основных теоретических положений и законов кристаллохимии; методами анализа и грамотного решения теоретических и практических проблем кристаллохимии.

Содержание разделов дисциплины.

Введение. Кристаллография и кристаллохимия. Предмет и задачи кристаллохимии. Основные аспекты кристаллохимии: стереохимический, кристаллоструктурный, характеристика химических связей, зависимость свойств кристаллов от их строения. Многообразие кристаллических структур. Кристаллохимия как часть химии и кристаллографии.

Закрытые операции и элементы симметрии. Теоремы о сочетаниях закрытых элементов симметрии. Кристаллографические точечные группы симметрии. Международные символы и символы Шенфлиса. Единичные и полярные направления. Стереографические проекции кристаллов. Трансляции. Кристаллографические системы координат. Сингонии. Элементарная ячейка. Кристаллическая решетка. Решетки Бравэ.

Открытые операции и элементы симметрии. Пространственные группы симметрии. Общие и частные правильные системы точек. Узловые ряды и узловые сетки. Межплоскостные расстояния. Миллеровские индексы. Число формульных единиц и рентгеновская плотность. Координационное число и координационный полиэдр. Собственная симметрия координационных полиэдров, молекул и сложных ионов.

Структурные типы. Полиэдрический метод изображения структур. Представление о теории плотнейших шаровых упаковок. Простейшие структурные типы и соотношения между ними. Описание структур в терминах шаровых упаковок и кладок. Семейства кристаллических структур. Островные, цепочечные, слоистые и каркасные структуры. Кристаллоструктурные характеристики атомов и химических связей. Основные типы кристаллохимических радиусов атомов (ионные, ковалентные, металлические, орбитальные, ван-дер-ваальсовы). Систематика кристаллических структур по типу связи.

Основы рентгено-структурного анализа. Дифракция рентгеновских лучей. Уравнение Брэгга-Вульфа. Основные методы рентгенографии. Основы рентгенофазового анализа. Этапы анализа структуры кристалла. Представление о методах определения координат атомов. Современные источники кристаллоструктурной информации.

Структуры простых веществ. Основные структурные типы. Структура воды, углекислого газа. Кристаллохимия урана, тория, плутония. Кристаллохимия редких элементов (литий, бериллий, галлий, индий, германий, ванадий, титан, молибден, вольфрам, редкоземельные элементы, инертные газы). Строение реальных кристаллов. Важнейшие типы дефектов. Влияние дефектов кристаллов на их свойства.