

КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

Хімічний факультет

Кафедра аналітичної хімії



«ЗАТВЕРДЖУЮ»

Заступник декана
навчальної роботи

В.О. Павленко

т.р. с.м.х. 20 19 року

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

КРИСТАЛОХІМІЯ

для студентів

галузь знань **10 Природничі науки**
спеціальність **102 Хімія**
освітній рівень **“бакалавр”**
освітня програма **Хімія**
вид дисципліни **обов'язкова**

Форма навчання	денна
Навчальний рік	2019/2020
Семестр	III
Кількість кредитів ECTS	4
Мова викладання, навчання та оцінювання	українська
Форма заключного контролю	іспит

Викладач (лектор): **Алексєєв Сергій Олександрович**

Пролонговано: на **2020/2021** н.р. _____ (_____) «____» _____ 20__ р.


на **2021/2022** н.р. _____ (_____) «____» _____ 20__ р.

КИЇВ – 2019

Розробник: **Алексєєв Сергій Олександрович, доц., к.х.н., доц.**

ЗАТВЕРДЖЕНО

В.о.зав. кафедри аналітичної хімії



(підпис)

(О.Ю.Тананайко)

(прізвище та ініціали)

Протокол №6 від "09" квітня 2019 року

Схвалено науково-методичною комісією хімічного факультету Київського національного університету імені Тараса Шевченка

Протокол № 4 від "08" травня 2019 року

Голова науково-методичної комісії _____  _____ (О.С.Роїк)

1. Мета дисципліни – дати студентам поняття про симетрію об’єктів скінченного (молекули та кристалічні багатогранники) та нескінченного (кристалічні ґратки) розміру, про кристалічну структуру речовини та застосування вищезгаданих понять для опису властивостей речовин.

2. Попередні вимоги до опанування навчальної дисципліни:

1. Знання теоретичних основ та володіння практичними навичками з хімії, фізики, алгебри та геометрії на рівні програми ЗОШ.
2. Успішне опанування базових курсів загальної хімії, фізики та математики на рівні бакалаврату.

3. Анотація навчальної дисципліни. В рамках курсу «Кристалохімія» вивчається явище симетрії та основні поняття, що використовуються для опису симетрії і кристалічної структури речовини, зокрема – точкові та просторові групи симетрії. Розглядається застосування вищезгаданих понять для опису та прогнозування властивостей молекул та кристалічних речовин. Приділяється увага впливу симетрії молекул на їх коливання та утворення молекулярних орбіталей, причинам структуроутворення кристалів та впливу структури кристалу на оптичні, електричні та механічні властивості.

4. Завдання: розвиток теоретичних уявлень студентів про явище симетрії об’єктів скінченного та нескінченного розміру, та його вплив на властивості речовин. Формування у студентів практичних навичок визначення точкових та просторових груп симетрії та прогнозування пов’язаних із симетрією властивостей речовин.

5. Результати навчання за дисципліною:

Код	Результат навчання	Форми викладання і навчання	Методи оцінювання *	Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни
1. Знання				
1.1	Знати, які математичні наближення та абстракції використовуються для опису симетричної будови об’єктів скінченного та нескінченного розміру	лекції, лабораторні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	20
1.2	Знати, як симетрія молекули визначає її властивості у коливальних спектрах та будову молекулярних орбіталей	лекції, лабораторні, самостійні	ПтК-1, ПсК	5
1.3	Знати, які чинники зумовлюють утворення тої чи іншої кристалічної структури	лекції, лабораторні, самостійні	ПтК-2, ПсК	10
1.4	Знати, як структура кристалу та дефекти в ній впливають на властивості речовини	лекції, лабораторні, самостійні	ПтК-2, ПсК	10

1.5	Мати попереднє уявлення, які методи використовуються для визначення структури молекул та кристалів	лекції, лабораторні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	5
2. Вміння				
2.1	Визначати точкові групи симетрії моделей молекул та кристалічних багатогранників, правильні системи точок, будувати стереографічні проекції	лекції, практичні, самостійні	ПтК-1, ПсК	15
2.2	Встановлювати симетрію коливань та молекулярних орбіталей для найпростіших молекул	практичні, самостійні	ПтК-1, ПсК	5
2.3	Визначати просторові групи симетрії моделей кристалічних структур та знаходити кристалографічні індекси	лекції, лабораторні, самостійні	ПтК-2, ПсК	10
2.4	Знаходити взаємозв'язок «хімічний склад – структура – фізичні властивості» кристалічних сполук	лекції, лабораторні, самостійні	ПтК-2, ПсК	10
3. Комунікація				
3.1	Здатність виконувати передбачені навчальною програмою завдання та операції у співпраці з іншими виконавцями та використовувати сучасні інформаційно-комунікаційні технології для збору, аналізу, обробки та інтерпретації даних у галузі кристалохімії	лекції, лабораторні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2	5
4. Автономність та відповідальність				
4.1	Вміти самостійно виконувати домашні завдання, дотримуватися правил наукової етики та доброчесності, критично аналізувати отриману інформацію в галузі кристалохімії	лабораторні, самостійні	ПтК-1, ПтК-2, ПсК	5

*поточний контроль (активність під час практичних робіт **ПтК-1** та контроль самостійної роботи **ПтК-2**), підсумковий контроль **ПсК**

ПРН	РНД (код)											
	1.1	1.2	1.3	1.4	1.5	2.1	2.2	2.3	2.4	3.1	4.1	
Уміння Здійснювати критичний аналіз, оцінювати дані та синтезувати нові ідеї	+		+	+		+	+	+	+	+	+	
Здійснювати експериментальну роботу під керівництвом, з метою перевірки гіпотез та дослідження явищ і хімічних закономірностей						+	+	+	+	+	+	
Спроможність використовувати набуті знання та вміння для розрахунків, відображення та моделювання хімічних систем та процесів, обробки експериментальних даних.						+	+	+	+	+	+	
Виконувати комп'ютерні обчислення, що мають відношення до хімічних проблем, використовуючи стандартне та спеціальне програмне забезпечення, навички аналізу та відображення результатів.					+	+	+	+		+	+	
Працювати самостійно або в групі, отримати результат у межах обмеженого часу з наголосом на професійну сумлінність та наукову добросесність.						+	+	+	+	+	+	
Демонструвати знання та розуміння основних фактів, концепцій, принципів та теорій з хімії.	+	+	+	+	+	+	+	+	+			
Використовувати свої знання та розуміння на практиці для вирішення задач та проблем відомої природи.						+	+	+	+			
Готувати розчини та реагенти, планувати та здійснювати хімічні експерименти.												
Інтерпретувати експериментально отримані дані та співвідносити їх з відповідними теоріями в хімії.						+	+	+	+	+		
Здійснювати моніторинг та аналіз наукових джерел інформації та фахової літератури.	+	+	+	+	+					+	+	
Використовувати набуті знання та компетенції з хімії в прикладному полі, базові інженерно-технологічні навички.	+	+	+	+	+	+	+	+	+			
Комунікація Здатність до фахового спілкування в діалоговому режимі з колегами та цільовою аудиторією.						+	+	+	+	+	+	
Вміння коректно використовувати мовні засоби в професійній діяльності залежно від мети спілкування.						+	+	+	+	+	+	

ПРН	РНД (код)											
	1.1	1.2	1.3	1.4	1.5	2.1	2.2	2.3	2.4	3.1	4.1	
Вміння відображати результати своїх наукових досліджень у письмовому вигляді.						+	+	+	+	+	+	
Здатність до презентації результатів своїх досліджень.										+		
Здатність працювати в міждисциплінарній команді, мати навички міжособистісної взаємодії.										+	+	
Здатність використовувати сучасні інформаційно-комунікаційні технології при спілкуванні, а також для збору, аналізу, обробки, інтерпретації даних.						+	+	+	+	+		
Автономія та відповідальність Здатність вести професійну діяльність з найменшими ризиками для навколишнього середовища.										+	+	
Здатність діяти соціально відповідально та громадянсько свідомо на основі етичних міркувань.	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	
Здатність вчитись самостійно та самовдосконалюватися, нести відповідальність за власні судження та результати.	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	
Здатність приймати обґрунтовані рішення та рухатися до спільної мети.	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	

7. Схема формування оцінки

7.1. Форми оцінювання студентів:

3 семестр

- семестрове оцінювання

- 1.1. колоквиум (усна відповідь);
- 1.2. виконання домашньої самостійної роботи;
- 1.3. написання модульної контрольної роботи.

- підсумкове оцінювання

іспит.

7.2. Організація оцінювання (за формами контролю згідно з графіком навчального процесу):

	Змістовий модуль 1		Змістовий модуль 2		Підсумковий контроль (іспит)	
	Min. – 18 балів	Max. – 30 балів	Min. – 18 балів	Max. – 30 балів	Min. – 20 бали	Max. – 40 балів
Виконання домашньої самостійної роботи	5	10	5	10		
Усна відповідь (колоквиум)	5	10	5	10		
Модульна контрольна робота 1	5	10				
Модульна контрольна робота 2			5	10		
Підсумковий контроль (іспит)					24	40

До іспиту може бути допущений студент, який виконав усі обов'язкові види робіт, які передбачаються навчальним планом з дисципліни "Кристалохімія" (а саме: виконання зазначених у програмі домашніх самостійних робіт, здача колоквіумів та написання модульних контрольних робіт), і при цьому за результатами модульно-рейтингового контролю в семестрі отримав за змістові модуля сумарну оцінку в балах не менше 36 балів.

Для студентів, які набрали впродовж семестру кількість балів, меншу за критично-розрахунковий мінімум для допуску на іспит, дозволяється написання рефератів за темами домашніх самостійних робіт, або перескладання колоквіумів або МКР, за які отримано незадовільні оцінки, з дозволу деканату (за наявності поважної причини, що не дозволила вчасно та якісно виконати домашню роботу або підготуватися до МКР).

У випадку відсутності студента з поважних причин відпрацювання та перездачі КР здійснюються у відповідності до «Положення про організацію освітнього процесу у Київському національному університеті імені Тараса Шевченка» від 31 серпня 2018 року.

7.3. Шкала відповідності оцінок

Шкала відповідності

Відмінно / Excellent	90-100
Добре / Good	75-89
Задовільно / Satisfactory	60-74
Незадовільно з можливістю повторного складання / Fail	35-59
Незадовільно з обов'язковим повторним вивченням дисципліни / Fail	0-34

8. Структура навчальної дисципліни.

Тематичний план лекцій і лабораторних занять

№ теми	Назва теми	Кількість годин		
		лекції	Лабораторні	С/Р
<i>Змістовий модуль 1. Симетрія об'єктів скінченного розміру</i>				
1	Вступ до кристалохімії, елементи та операції симетрії	2	2	4
2	Стереографічні проекції та теореми складання елементів симетрії	2	2	4
3	Точкові групи симетрії	2	2	5
4	Правильні системи точок та прості форми	2	2	4
5	Матриці симетричних перетворень	2	2	4
6	Симетрія коливань молекули	2	2	5
7	Симетрія молекулярних орбіталей	2	3	4
	<i>Модульна контрольна робота 1</i>	1		
	<i>Всього</i>	15	15	30
<i>Змістовий модуль 2. Симетрія об'єктів нескінченного розміру (кристалічних ґраток)</i>				
8	Основні властивості кристалічних речовин та відкриті елементи симетрії	2	2	4
9	ґратки Браве та просторові групи симетрії	2	2	5
10	Правильні системи точок у кристалі та щільні упаковки	2	2	4
11	Кристалічні структури з різними типами хімічного зв'язку	1	2	4
12	Фізичні властивості кристалів	2	2	5
13	Дефекти в кристалах	2	2	4
14	Фізичні методи встановлення кристалічної структури	2	3	4
	<i>Модульна контрольна робота 2</i>	1		
	<i>Всього</i>	15	15	30
	ВСЬОГО	30	30	60

Загальний обсяг **120 год.**, у тому числі:

Лекцій – **30 год.**

Лабораторних – **30 год.**

Самостійна робота - **60 год.**

Контрольні запитання до підсумкового модулю (іспиту)

1. Основні властивості кристалічних речовин: анізотропія, багатогранність, симетрія.
2. Симетрія в природі.
3. Основні закони кристалохімії.
4. Елементи симетрії: вісь, центр, площина.
5. Точкові групи симетрії. Символи Шенфліса.
6. Міжнародна символіка точкових груп.
7. Стереографічні проекції.
8. Прості форми та їх комбінації.
9. Граничні типи симетрії та їх символіка.
10. Матриці симетричних перетворень.
11. Елементи теорії груп: звідні та незвідні зображення, формула зведення.
12. Симетрія коливань молекули.
13. Елементи симетрії нескінченних фігур.
14. Трансляційні групи симетрії. Гратки Браве.
15. Правила Браве. Категорії та сингонії.
16. Координатні системи в кристалі. Установка кристалів (вибір системи координат).
17. Просторові групи симетрії. Міжнародні символи просторових груп.
18. Правильні системи точок у кристалі.
19. Принцип симетрії Кюрі.
20. Індeksi площин просторової ґратки.
21. Щільні упаковки.
22. Кристалічна структура та структурний тип.
23. Системи кристалохімічних радіусів. Іонні, ковалентні, Ван-дер-Ваальсові.
24. Класифікація кристалічних структур по типу зв'язку.
25. Металічний зв'язок в кристалах. Структурні типи металів.
26. Кристали з ковалентним зв'язком. Зонна теорія.
27. Кристалохімія іонних сполук.
28. Енергія утворення іонних кристалів. Стала Маделунга.
29. Закономірності утворення іонних кристалів. Правила Полінга.
30. Стереохімія потрійних іонних сполук.
31. Молекулярні кристали. Правило Китайгородського.
32. Гомодесмічні та гетеродесмічні структури. Типи гетеродесмічних структур: молекулярні, ланцюгові, шаруваті, каркасні.
33. Фізичні властивості кристалів: оптичні властивості, піро- та п'єзоефект.
34. Дефекти в кристалах.
35. Властивості кристалів, зумовлені дефектами: електропровідність напівпровідників, іонна провідність, механічні властивості.
36. Ізоморфізм, тверді розчини.
37. Морфотропія, поліморфізм.
38. Рентгенофазовий аналіз. Рівняння Вульфа-Брега.
39. Рентгеноструктурний аналіз.
40. Порівняльна характеристика рентгеноструктурного аналізу, електроннографії та нейтронографії.

9. Рекомендована література:

Основна

1. Шевченко Л. Л. Кристалохімія. Підручник. – К.: Вища школа, 1993.
2. Шевченко Л. Л. Кристалохімія. Практикум. – К.: Вища школа, 1981.
3. Шаскольська М. П. Кристаллографія. – М.: Высшая школа, 1976.
4. Ogden J. Introduction to the molecular symmetry. – Oxford Chemistry Primers, 2001.

Додаткова

5. Зиман З. З. Основи структурної кристаллографії: Навчальний посібник для студентів вищих навчальних закладів. – Х.: ХНУ ім. В. Н. Каразіна, 2008. – 212 с.
6. Зоркий П. М. Симметрия молекул и кристаллических структур. – М.: МГУ, 1986.
7. Бокий Г. Б. Кристаллохимия. – М.: Наука, 1971.
8. Харгиттаи И., Харгиттаи М. Симметрия глазами химика. – М.: Мир, 1989.
9. Урусов В. С. Теоретическая кристаллохимия. – М.: МГУ, 1987.
10. Желудев И. С. Физика кристаллов и симметрия. – М.: Наука, 1987.
11. Китайгородский А. И. Молекулярные кристаллы. – М.: Наука, 1971.
12. Порай-Кошиц М. А. Основы структурного анализа химических соединений. – М.: Высшая школа, 1982.

Інтернет-ресурси

Таблиці характерів точкових груп

<http://symmetry.jacobs-university.de/>

Просторові групи

<http://img.chem.ucl.ac.uk/sgp/large/sgp.htm>

Кембріджська база даних кристалічних структур

<https://www.ccdc.cam.ac.uk/solutions/csd-system/components/csd/>

Завантаження ПО Diamond

<https://www.crystalimpact.com/diamond/download.htm>