

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Ястребов Олег Александрович
Должность: Ректор
Дата подписания: 29.05.2023 14:18:39
Уникальный программный ключ:
ca953a0120d891083f939673078ef1a9834ae78a

**Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования
«Российский университет дружбы народов имени Патриса Лумумбы»**

Факультет физико-математических и естественных наук

(наименование основного учебного подразделения (ОУП)-разработчика ОП ВО)

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

КРИСТАЛЛОХИМИЯ И ОСНОВЫ РЕНТГЕНОСТРУКТУРНОГО АНАЛИЗА

(наименование дисциплины/модуля)

Рекомендована МСН для направления подготовки/специальности:

04.03.01 Химия

(код и наименование направления подготовки/специальности)

Освоение дисциплины ведется в рамках реализации основной профессиональной образовательной программы высшего образования (ОП ВО):

Химия

(наименование (профиль/специализация) ОП ВО)

2023 г.

1. ЦЕЛЬ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Целью освоения дисциплины «Кристаллохимия и основы рентгеноструктурного анализа» является изучение основ современной кристаллохимии: понимание законов симметрии, кристаллического строения, основных понятий кристаллохимии, законов геометрической кристаллографии, решеток Браве, кристаллохимических особенностей основных типов химических соединений, полиморфизма и политипизма, изоморфизма, кристаллохимических закономерностей, основных принципов рентгендифракционных исследований в кристаллах, формирование научного мировоззрения, теоретической подготовки специалистов и приобретение практических навыков, способность видеть области применения этих законов, четко понимать их принципиальные возможности при решении конкретных задач.

2. ТРЕБОВАНИЯ К РЕЗУЛЬТАТАМ ОСВОЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

Освоение дисциплины «Кристаллохимия и основы рентгеноструктурного анализа» направлено на формирование у обучающихся следующих компетенций (части компетенций):

Таблица 2.1. Перечень компетенций, формируемых у обучающихся при освоении дисциплины (результаты освоения дисциплины)

Шифр	Компетенция	Индикаторы достижения компетенции (в рамках данной дисциплины)
ОПК-1	Способен анализировать и интерпретировать результаты химических экспериментов, наблюдений и измерений	ОПК-1.1. Систематизирует и анализирует результаты химических экспериментов, наблюдений, измерений, а также результаты расчетов, свойств веществ и материалов; ОПК-1.2. Предлагает интерпретацию результатов собственных экспериментов и расчетно-теоретических работ с использованием теоретических основ традиционных и новых разделов химии.
ОПК-3	Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	ОПК-3.1. Применяет теоретические и полуэмпирические модели при решении задач химической направленности; ОПК-3.2. Использует стандартное программное обеспечение при решении задач химической направленности.
ПК-1	Способен использовать полученные знания теоретических основ фундаментальных разделов химии при решении профессиональных задач	ПК-1.1. Понимает основные принципы, законы, методологию изучаемых химических дисциплин, теоретические основы физических и физико-химических методов исследования; ПК-1.2. Использует фундаментальные химические понятия в своей профессиональной деятельности; ПК-1.3. Интерпретирует полученные результаты, используя базовые понятия химических дисциплин.
ПК-4	Способен использовать современные методы синтеза,	ПК-4.2. Владеет навыками использования современных методов и аппаратуры для

установления структуры и исследования свойств и реакционной способности химических соединений под руководством специалиста более высокой квалификации	изучения химических процессов, строения и свойств химических соединений.
---	--

3. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОП ВО

Дисциплина «Кристаллохимия и основы рентгеноструктурного анализа» относится к вариативной компоненте блока Б.1. ОП ВО.

В рамках ОП ВО обучающиеся также осваивают другие дисциплины и/или практики, способствующие достижению запланированных результатов освоения дисциплины «Кристаллохимия и основы рентгеноструктурного анализа»:

Таблица 3.1. Перечень компонентов ОП ВО, способствующих достижению запланированных результатов освоения дисциплины

Шифр	Наименование компетенции	Предшествующие дисциплины/модули, практики	Последующие дисциплины/модули, практики
Общепрофессиональные компетенции			
ОПК-1	Способен анализировать и интерпретировать результаты химических экспериментов, наблюдений и измерений	Неорганическая химия Аналитическая химия Органическая химия Физическая химия Химическая технология Основы квантовой химии Компьютерные технологии в химии Химические основы биологических процессов Учебная практика	Избранные главы химии Экспериментальные методы исследования в химии Научно-исследовательская работа Преддипломная практика
ОПК-3	Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники	Информатика Основы квантовой химии Компьютерные технологии в химии	Научно-исследовательская работа Преддипломная практика
Профессиональные компетенции (научно-исследовательская деятельность)			
ПК-1	Способен использовать полученные знания теоретических основ фундаментальных разделов химии при решении профессиональных задач	Неорганическая химия Аналитическая химия Органическая химия Физическая химия Химическая технология История химии Основы квантовой химии Химические основы биологических процессов Химия лекарственных веществ Основы нанохимии	Избранные главы химии Экспериментальные методы исследования в химии Научно-исследовательская работа Преддипломная практика

		Введение в химию координационных соединений Учебная практика	
ПК-4	Способен использовать современные методы синтеза, установления структуры и исследования свойств и реакционной способности химических соединений под руководством специалиста более высокой квалификации	Неорганическая химия Аналитическая химия Органическая химия Физическая химия	Экспериментальные методы исследования в химии Научно-исследовательская работа Преддипломная практика

4. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ И ВИДЫ УЧЕБНОЙ РАБОТЫ

Общая трудоемкость дисциплины «Кристаллохимия и основы рентгеноструктурного анализа» составляет 5 зачетных единиц.

Таблица 4.1. Виды учебной работы по периодам освоения ОП ВО для **ОЧНОЙ** формы обучения

Вид учебной работы	ВСЕГО, ак.ч.	Семестр(-ы)			
		7			
<i>Контактная работа, ак.ч.</i>	108	108			
в том числе:					
Лекции (ЛК)	36	36			
Лабораторные работы (ЛР)	72	72			
Практические/семинарские занятия (СЗ)					
<i>Самостоятельная работа обучающихся, ак.ч.</i>	36	36			
<i>Контроль (экзамен/зачет с оценкой), ак.ч.</i>	36	36			
Общая трудоемкость дисциплины	ак.ч.	180	180		
	зач.ед.	5	5		

5. СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Таблица 5.1. Содержание дисциплины (модуля) по видам учебной работы

Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела (темы)	Вид учебной работы
Раздел 1. Симметрия и морфология кристалла	Тема 1.1. Понятие о кристаллическом веществе. Кристаллохимия и ее связь с другими науками. Закон постоянства углов. Гониометрия. Стереорафические проекции кристаллов.	ЛК
	Тема 1.2. Сетка Вульфа. Закон рациональности отношений параметров. Символы граней.	ЛК, ЛР
	Тема 1.3. Симметрия кристаллических многогранников. 32 точечные группы симметрии	ЛК, ЛР

Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела (темы)	Вид учебной работы
	Тема 1.4. Сингонии, категории и точечные группы симметрии. Простые формы и комбинации. Установка кристаллов. Реальные формы. Реальные формы природных и искусственных кристаллов	ЛК, ЛР
Раздел 2. Учение о кристаллических структурах	Тема 2.1. Понятие пространственной (кристаллической) решетки. Узел, узловой ряд, узловая сетка, узловая решетка. Трансляция. Элементарная ячейка.	ЛК
	Тема 2.2. Четырнадцать типов пространственных решеток Бравэ. Индексы и символы узлов, узловых рядов, узловых сеток. Кристаллическая решетка и кристаллическая структура	ЛК, ЛР
	Тема 2.3. Симметрия в кристаллическом пространстве. Федоровские (пространственные) группы симметрии	ЛК, ЛР
	Тема 2.4. Правильные системы эквивалентных точек. Подсчет числа формульных единиц в ячейке. Координационное число и координационный полиэдр (многогранник). Тетра- и октаэдрические пустоты	ЛК, ЛР
	Тема 2.5. Плотнейшие шаровые упаковки – гексагональная и кубическая. Структурные типы	ЛК, ЛР
Раздел 3. Основы рентгеноструктурного анализа	Тема 3.1. Рентгеновские лучи. Дифракция рентгеновских лучей. Индексы узловых сеток. Межплоскостные расстояния	ЛК
	Тема 3.2. Уравнение Лауэ. Уравнение Вульфа-Брэгга. Методы рентгенографии.	ЛК, ЛР
	Тема 3.3. Рентгенофазовый анализ.	ЛК, ЛР
Раздел 4. Полиморфизм. Изоморфизм	Тема 4.1 Полиморфизм, различные типы полиморфизма. Структурная классификация типов полиморфизма. Изоморфизм и изоструктурность. Изоморфное замещение. Условия изоморфизма. Условие В.М. Гольдшмита. Изо- и гетероизоморфизм. Сверхструктуры	ЛК, ЛР
Раздел 5. Химическая связь и кристаллическая структура	Тема 5.1. Металлическая связь в кристаллах. Металлическая связь. Основные структурные типы металлов: медь, магний, альфа-железо. Применение теории шаровой плотнейшей упаковки для описания структур. Аномальные металлические структуры. Связь кристаллической структуры металлов с их физическими свойствами. Сплавы. Интерметаллические соединения. Классификация кристаллических структур интерметаллических соединений и сплавов. Системы с эвтектикой. Твердые растворы. Ограниченные твердые растворы	ЛК

Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела (темы)	Вид учебной работы
	<p>Тема 5.2. Ионная связь в кристаллах. Ионная связь. Энергия ионных структур. Применение теории плотнейших шаровых упаковок для описания ионных структур. Правило Полинга. Ионные радиусы. Зависимость между соотношением ионных радиусов и координационным числом, правило Магнуса. Поляризация ионов, ее влияние на межатомные расстояния и координацию.</p> <p>Основные структурные типы бинарных ионных соединений. Структуры двойных окислов и двойных галогенидов.</p> <p>Структурные типы шпинели, перовскита, пироклора. Особенности структур со сложными ионами. Структуры нитратов, карбонатов, сульфатов. Кристаллохимия силикатов. Структуры кристаллогидратов</p>	ЛК, ЛР
	<p>Тема 5.3. Ковалентная связь в кристаллах. Природа ковалентной связи. Энергии связей. Длины связей, валентные углы. Ковалентные радиусы. Координационное число в ковалентных структурах. Типичные ковалентные структуры: алмаз, графит. Кубический и гексагональный нитрид бора и т.п</p>	ЛК, ЛР
	<p>Тема 5.4. Ван-дер-ваальсовы и водородные связи в кристаллах.</p> <p>Природа ван-дер-ваальсовой связи. Водородная связь, ее особенности. Энергии ван-дер-ваальсовой и водородной связей. Ван-дер-ваальсовы (межмолекулярные) радиусы. Молекулярные структуры. Молекулярные кристаллические структуры простых веществ. Принцип плотнейшей упаковки в молекулярных кристаллах. Понятия о дипольных структурах. Жидкие кристаллы</p>	ЛК, ЛР
Раздел 6. Физико-химические свойства кристаллов	<p>Тема 6.1. Особенности механических свойств кристаллических тел: твердость, упругость. Пьезоэлектричество. Пирозлектричество.</p>	ЛК
	<p>Тема 6.2. Магнитные свойства кристаллов. Оптические свойства кристаллов</p>	ЛК, ЛР
	<p>Тема 6.3. Идеальные и реальные кристаллы. Дефекты в кристаллах. Точечные дефекты. Дислокации а</p>	ЛК, ЛР
	<p>Тема 6.4. Кристаллохимические закономерности в периодической системе Д.И. Менделеева</p>	ЛК, ЛР

6. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Таблица 6.1. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Тип аудитории	Оснащение аудитории	Специализированное учебное/лабораторное оборудование, ПО и материалы для освоения дисциплины (при необходимости)
Лекционная	Аудитория для проведения занятий лекционного типа, оснащенная комплектом специализированной мебели; доской (экраном) и техническими средствами мультимедиа презентаций.	
Лаборатория	Аудитория для проведения лабораторных работ, индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации, оснащенная комплектом специализированной мебели и оборудованием.	Наборы многогранников, решеток Браве и кристаллических решеток, Рентгеновский дифрактометр для поликристаллических исследований ДРОН-7, компьютеры
Компьютерный класс	Компьютерный класс для проведения занятий, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации, оснащенная персональными компьютерами, доской (экраном) и техническими средствами мультимедиа презентаций.	Пакет программ для расчета кристаллохимических характеристик, разработанных в лаборатории рентгенографии и кристаллохимии РУДН.
Для самостоятельной работы обучающихся	Аудитория для самостоятельной работы обучающихся (может использоваться для проведения семинарских занятий и консультаций), оснащенная комплектом специализированной мебели и компьютерами с доступом в ЭИОС.	Лаборатория рентгенографии и кристаллохимии 115, 117

7. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Основная литература

1. Егоров-Тисменко Ю.К. Кристаллография и кристаллохимия [Текст] : Учебник для вузов / Ю.К. Егоров-Тисменко. - М. : КДУ, 2005. - 592 с. : ил. - ISBN 5-98227-095-4 : 550.00.

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

http://biblioclub.ru/index.php?page=book_red&id=278304

Дополнительная литература

1. Пугачев В.М. Кристаллохимия: учебное пособие / В.М. Пугачев. - Кемерово : Кемеровский государственный университет, 2013. - 104 с. - ISBN 978-5-8353-1322-8

http://biblioclub.ru/index.php?page=book_red&id=232461

2. Лобанов Н.Н. Лабораторный практикум по курсу "Рентгендифракционные методы в неорганической химии" [Текст] : Для студентов-химиков 5 курса / Н.Н. Лобанов, В.П. Полякова. - М. : Изд-во РУДН, 2007. - 118 с. : ил. - ISBN 978-5-209-02725-6 : 80.00.

3. Урусов В.С. Теоретическая кристаллохимия [Текст] : Учебник для вузов / В.С. Урусов. - М. : Изд-во МГУ, 1987. - 272 с. : ил. - 0.85.

4. Бокий Г.Б. Кристаллохимия [Текст] / Г.Б. Бокий. - 3-е изд., перераб. и доп. - М. : Наука, 1971. - 400 с. - 2.34.

5. Асланов Л.А. Структуры веществ [Текст] / Л.А. Асланов. - М. : Изд-во МГУ, 1989. - 161 с. - ISBN 5-211-01403-0 : 0.55.

Ресурсы информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»:

1. ЭБС РУДН и сторонние ЭБС, к которым студенты университета имеют доступ на основании заключенных договоров:

- Электронно-библиотечная система РУДН – ЭБС РУДН <http://lib.rudn.ru/MegaPro/Web>

- ЭБС «Университетская библиотека онлайн» <http://www.biblioclub.ru>

- ЭБС Юрайт <http://www.biblio-online.ru>

- ЭБС «Консультант студента» www.studentlibrary.ru

- ЭБС «Лань» <http://e.lanbook.com/>

- ЭБС «Троицкий мост»

- Большая Научная Библиотека (<http://sci-lib.com/>)

- Каталог химических ресурсов на CHEMPORT.RU

(http://www.chemport.ru/catalog_tree.php)

- Список библиотек (доступ с ПК РУДН) (<http://www.rad.pfu.edu.ru/licenzirovannye-resursy/tehicheskie-i-estestvennye-nauki>)

- Электронная библиотека РФФИ (<http://www.elibrary.ru>)

- International Union of Crystallography <http://www.iucr.org>

2. Базы данных и поисковые системы:

- электронный фонд правовой и нормативно-технической документации <http://docs.cntd.ru/>
- поисковая система Яндекс <https://www.yandex.ru/>
- поисковая система Google <https://www.google.ru/>
- реферативная база данных SCOPUS <http://www.elsevierscience.ru/products/scopus/>

Учебно-методические материалы для самостоятельной работы обучающихся при освоении дисциплины/модуля:

<https://esystem.rudn.ru/enrol/index.php?id=1428>

1. Курс лекций по дисциплине «Кристаллохимия и основы рентгеноструктурного анализа».

2. Лабораторный практикум по дисциплине «Кристаллохимия и основы рентгеноструктурного анализа».

3. Методические указания для обучающихся по освоению дисциплины.

При изучении дисциплины «Кристаллохимия и основы рентгеноструктурного анализа» предполагается посещение студентами лекций, выполнение расчётно-графических и лабораторных работ, написание тестов. В конце семестра проводится промежуточный контроль в виде письменного экзамена.

8. ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ И БАЛЛЬНО-РЕЙТИНГОВАЯ СИСТЕМА ОЦЕНИВАНИЯ УРОВНЯ СФОРМИРОВАННОСТИ КОМПЕТЕНЦИЙ ПО ДИСЦИПЛИНЕ

Оценочные материалы и балльно-рейтинговая система оценивания уровня сформированности компетенций (части компетенций) по итогам освоения дисциплины «Кристаллохимия и основы рентгеноструктурного анализа» представлены в Приложении к настоящей Рабочей программе дисциплины.

РАЗРАБОТЧИКИ:

Доцент кафедры
неорганической химии

Должность, БУП



Подпись

Лобанов Н.Н.

Фамилия И.О.

РУКОВОДИТЕЛЬ БУП:

Кафедра неорганической химии

Наименование БУП



Подпись

Хрусталеv В.Н.

Фамилия И.О.

РУКОВОДИТЕЛЬ ОП ВО:

Заведующий кафедрой
неорганической химии

Должность, БУП



Подпись

Хрусталеv В.Н.

Фамилия И.О.