

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
ЛЬВІВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ імені ІВАНА ФРАНКА



КРИСТАЛОХІМІЯ

ПРОГРАМА
нормативної навчальної дисципліни

підготовки **бакалавра**

напряму підготовки **102 Хімія**

(Шифр за ОПП ПП 2.07)

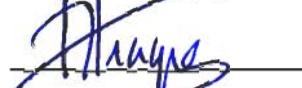
Львів – 2017 рік

Розробник програми: член-кореспондент НАН України, доктор хімічних наук, професор, професор кафедри неорганічної хімії Гладишевський Р.Є.

Програма затверджена на засіданні кафедри неорганічної хімії

Протокол № 18/6 від “20” червня 2017 р.

Завідувач кафедри неорганічної хімії

 Р.Є. Гладишевський

“20” червня 2017 р.

Схвалено методичною комісією хімічного факультету

Протокол № 65 від “20” червня 2017 р.

Голова методичної комісії хімічного факультету

 М.Д. Обушак

“20” червня 2017 р.

Схвалено Вченою радою хімічного факультету

Протокол № 25 від “27” червня 2017 р.

Голова Вченої ради хімічного факультету

 Я.М. Каличак

“27” червня 2017 р.

1. МЕТА ТА ЗАВДАННЯ НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Завданням загального курсу “Кристалохімія” для студентів хімічного факультету є здобуття майбутніми спеціалістами знань у галузі кристалографії та кристалохімії. Серед фундаментальних природничих наук кристалографія, як наука про кристалічну речовину, міститься між мінералогією, фізикою і хімією, тоді як кристалохімія поєднує кристалографію та хімію.

Лекційний курс складається із трьох основних частин: основи кристалографії, методи дослідження структури кристалів, основні поняття кристалохімії. В результаті вивчення курсу студент повинен **знати**:

- основні кристалографічні поняття та закони;
- найпоширеніші кристали в природі, основні методи вирощування кристалів;
- елементи симетрії та правила їх додавання;
- точкові групи;
- сингонії;
- кристалографічні проекції;
- правила установки кристалів;
- прості форми кристалів;
- елементи симетрії кристалічного простору;
- гратки Браве;
- просторові групи симетрії;
- методи дослідження структури кристалів;
- основи рентгеноструктурного аналізу;
- методи порошку та монокристалу;
- основні поняття кристалохімії;
- поняття структурного типу;
- тверді розчини;
- типи хімічного зв’язку в кристалах;
- принцип найщільнішої упаковки атомів;
- структури простих речовин-неметалів;
- структури металів;
- основи кристалохімії неорганічних сполук;
- основи кристалохімії органічних сполук;
- залежності властивостей кристалічних речовин від їх структури.

Лабораторні заняття присвячені вирощуванню кристалів, визначенню елементів симетрії кристалічних многогранників, встановленню простих форм кристалів, побудові кристалографічних проекцій, розрахунку порошкограм простих речовин з використанням фахових програм, аналізу кристалічних структур простих речовин і сполук. В результаті проведення лабораторних занять студент повинен **вміти**:

- вирощувати кристали солей;
- визначати елементи симетрії кристалічних многогранників, встановлювати їх вид симетрії, сингонію та категорію;
- встановлювати прості форми та їх комбінації;
- вимірювати кути між гранями кристалу;
- будувати стереографічні проекції елементів симетрії та гномостереографічні проекції граней кристалу;
- готувати зразки для отримання дифракційної картини рентгенівським методом порошку;
- індексувати рентгенограми простих речовин кубічної сингонії;
- встановлювати тип гратки Браве;
- визначати параметри елементарної комірки;
- аналізувати кристалічні структури простих речовин і неорганічних сполук (визначати сингонію, тип гратки Браве, символ Пірсона, координати атомів, міжатомні відстані та координаційні многогранники за моделлю);

- володіти міжнародною символікою.

Передбачається також самостійне вивчення студентами окремих питань програми. Контроль поточної успішності (три контрольні роботи) проводиться після основних частин лекційного курсу. Вивчивши курс, студенти складають іспит.

Матеріал курсу “Кристалохімія” складає один модуль, який розділено на два змістові модулі.

2. ІНФОРМАЦІЙНИЙ ОБСЯГ НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Змістовий модуль 1. Основи кристалографії: вирощування кристалів, визначення елементів симетрії кристалічних многогранників, встановлення простих форм кристалів, побудова кристалографічних проекцій (12 лекційних і 7 лабораторних годин). Види контролю: лабораторні заняття – 3 (3×2 бали), домашнє завдання – 1 (1×4 бали), контрольна робота – 1 (1×30 балів). Максимальна сума балів – 40.

Тема 1. Предмет і завдання кристалохімії. Аморфні і кристалічні речовини. Властивості кристалічного стану речовини. Монокристали і полікристали. Структура, гратка, елементарна комірка. Близькій і дальній порядок. Рідкі кристали. Нанокристали. Кристали в природі. Реальна будова кристалів, типи дефектів. Закон сталості двогранних кутів кристала (Роме-де-Ліль). Основні методи вирощування кристалів (лабораторні, промислові). Застосування кристалів. Симетрія кристалів. Операції симетрії. Елементи симетрії: центр симетрії (інверсії), площа симетрії, осі симетрії (елементарний кут обертання, порядок осі), інверсійні осі. Правила додавання елементів симетрії. Теорема Ейлера. Одиничний та симетрично-рівні напрями.

Тема 2. Точкові групи. Виведення точкових груп симетрії. Символи точкових груп: повна сукупність елементів симетрії, Германа-Могена, Шенфліса. Види симетрії. Сингонії: триклінна, моноклінна, ромбічна, тетрагональна, тригональна, гексагональна, кубічна. Категорії сингоній.

Тема 3. Кристалографічні проекції. Кристалічний комплекс: прямий і полярний. Гномостреографічна проекція граней кристала. Стереографічна проекція елементів симетрії. Побудова (гномо)стереографічної проекції. Сітка Вульфа. Кристалографічні напрями. Правила установки кристалів.

Тема 4. Морфологія кристалів. Прості форми кристалів (відкриті, закриті) та їхні комбінації. Виведення простих форм. Загальна та окремі прості форми. Розподіл простих форм за категоріями сингоній. Закон раціональних відношень параметрів (Гаюї). Закон послідовності розвитку граней (Браве). Символи граней.

Тема 5. Симетрія структури кристалів. Трансляції. Форма елементарної комірки кожної сингонії. Гратки Браве (примітивні, базоцентровані, об'ємоцентровані, гранецентровані). Правила вибору граток Браве. Розподіл граток Браве за сингоніями. Координати вузлів гратки.

Тема 6. Елементи симетрії кристалічних структур (площини ковзного відбиття, гвинтові осі). Правила додавання елементів симетрії кристалічних структур. Правила вибору початку системи координат. Просторові групи. Символ Германа-Могена. Міжнародні кристалографічні таблиці. Правильна система точок. Загальне та окремі положення атомів. Кратність положення.

Змістовий модуль 2. Методи дослідження структури кристалів: розрахунок порошкограм простих речовин та основні поняття кристалохімії: аналіз кристалічних структур простих речовин і сполук (20 лекційних і 9 лабораторних годин). Види контролю: лабораторні заняття – 3 (3×2 бали), домашнє завдання – 1 (1×4 бали), контрольна робота – 1 (1×30 балів), тест – 1 (1×10 балів), усне опитування – 1 (1×10 балів). Максимальна сума балів – 60.

Тема 7. Методи дослідження структури кристалів. Індекси Міллера. Систематичні погашення. Рентгенівське проміння. Способи одержання рентгенівського проміння. Рентгенівські лампи. Монохроматичне та поліхроматичне випромінювання. Умови Лауе. Закон Брегга-Вульфа. Рентгенофазовий та рентгеноструктурний аналізи. Обернена гратка.

Тема 8. Методи рентгеноструктурного аналізу. Методи монокристалу та полікристалу. Метод Лауе. Метод обертання. Гоніометричні методи Вайсенберга та прецесії. Метод Дебая-Шерера. Автоматичні дифрактометри. Розшифровка кристалічної структури (електронна густина, метод Паттерсона, прямі методи). Уточнення структури методом Рітвельда.

Тема 9. Основні поняття кристалохімії. Структурний тип. Ізоструктурні сполуки. Опис кристалічної структури (кількість атомів в елементарній комірці, число формульних одиниць в комірці, символ Пірсона). Координати атомів. Координаційне число, координаційний многогранник. Міжатомні відстані, валентні кути.

Тема 10. Ізоморфізм, поліморфізм, морфотропія. Тверді розчини (заміщення, включення, віднімання).

Тема 11. Типи кристалічних структур. Тип хімічного зв'язку в кристалах (ковалентний, іонний, металічний, ван дер Ваальса, водневий). Правила Полінга. Гомодесмічні та гетеродесмічні структури. Радіуси атомів.

Тема 12. Принцип найщільнішої упаковки атомів. Кубічна та гексагональна найщільніша упаковка. Кубооктаедр та антикубооктаедр. Коефіцієнт щільності упаковки. Пустоти в найщільнішій упаковці (октаедричні, тетраедричні).

Тема 13. Кристалічні структури простих речовин. Структури неметалів (інертні гази, I₂, Se, As, С-алмаз). Зміна структури по групах періодичної системи (правило Юм-Розери). Структури металів (Cu, W, Mg та їхні похідні).

Тема 14. Кристалохімія неорганічних сполук. Класифікації за стехіометрією та природою компонентів. Структури бінарних галогенідів, оксидів, сульфідів (типи NaCl, CsCl, ZnS, NiAs, CaF₂, CdI₂, TiO₂, FeS₂, BiF₃). Правило Грімма-Зоммерфельда. Інтерметалічні сполуки (типи AlB₂, MgCu₂, Cu₃Au, Cr₃Si, CaCu₅). Складні оксиди (типи CaTiO₃, MgAl₂O₄). Алюмосилікати, цеоліти. Взаємозв'язки між структурами.

Тема 15. Кристалохімія органічних сполук. Структури з невеликими кулеподібними молекулами (метан, етилен, ацетилен, іодоформ, сечовина, уротропін). Структури з видовженими молекулами (насичені вуглеводні C_nH_{2n+2}). Структури з пласкими молекулами (бенzen, наftalін, антрацен). Структури з великими складними молекулами.

Тема 16. Залежність властивостей кристалічних речовин від їхньої структури. Принцип Неймана. Еластичність, твердість, спайність. Піро- та п'єзоелектричні ефекти. Енантіоморфізм, оптична активність. Індекси рефракції, подвійне заломлення. Електропровідність.

3. РЕКОМЕНДОВАНА ЛІТЕРАТУРА

Основна

1. Р.Є. Гладишевський, *Кристалохімія. Конспект лекцій (електронна версія)*, Навчальний портал хімічного факультету Львівського національного університету імені Івана Франка (2015).
2. Л.Л. Шевченко, *Кристалохімія*, Вища школа, Київ (1993) – 174 с.
3. Г.Б. Бокий, *Кристаллохимия*, Наука, Москва (1971) – 400 с.
4. Г.М. Попов, И.И. Шафрановский, *Кристаллография*, Высшая школа, Москва (1972) – 352 с.
5. М.П. Шаскольская, *Кристаллография*, Высшая школа, Москва (1984) – 376 с.

Додаткова

1. В.І. Павлишин, *Основи кристалохімії мінералів*, Видавничий центр “Київський університет”, Київ (1998) – 320 с.
2. В.С. Урусов, *Теоретическая кристаллохимия*, Издательство Московского университета, Москва (1987) – 275 с.
3. Л.Л. Шевченко, *Кристалохімія. Практикум*, Вища школа, Київ (1981) – 136 с.

4. Г.Б. Бокий, М.А. Порай-Кошиц, *Рентгеноструктурный анализ*, Т. I, Издательство МГУ, Москва (1964) – 490 с.
5. М.А. Порай-Кошиц, *Практический курс рентгеноструктурного анализа*, Т. II, Издательство МГУ, Москва (1960) – 632 с.
6. Е. Парте, *Елементи неорганічної структурної хімії*, Світ, Львів (1993) – 104 с.
7. А.И. Китайгородский, *Органическая кристаллохимия*, Издательство Академии наук СССР, Москва (1955) – 558 с.
8. *International Tables for Crystallography*, Vol. A, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht (2002) – 911 p.

Інформаційні ресурси

1. P. Villars, K. Cenzual, *Pearson's Crystal Data – Crystal Structure Database for Inorganic Compounds*, ASM International, Materials Park (OH) (2016).
2. K. Brandenburg, *Diamond – Crystal and Molecular Structure Visualization – Demonstration Version 3.2i*, Crystal Impact, Bonn (2001).

4. ФОРМА ПІДСУМКОВОГО КОНТРОЛЮ УСПІШНОСТІ НАВЧАННЯ

Підсумковий контроль успішності навчання здійснюється у формі іспиту. Рейтингова система передбачає оцінювання п'яти видів роботи в балах. Максимальна кількість балів за курс “Кристалохімія” без іспиту – 50. Студент, який отримав позитивні оцінки по всіх видах контролю, допускається до складання іспиту. Максимальна кількість балів при оцінюванні знань студента на іспиті становить 50 балів.

5. ЗАСОБИ ДІАГНОСТИКИ УСПІШНОСТІ НАВЧАННЯ

Для діагностики успішності навчання застосовуються:

- комплекти завдань для контрольних робіт,
- завдання для теоретичного захисту лабораторних робіт,
- екзаменаційні білети,
- електронна база тестових завдань для проведення контрольних опитувань, іспитів та контрольних замірів знань студентів.