

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки  
Ордена Трудового Красного Знамени  
Институт химии силикатов им. И.В. Гребенщикова  
Российской академии наук  
(ИХС РАН)

199034, Санкт-Петербург  
наб. Макарова д. 2  
тел.: (812) 328-07-02  
факс: (812) 328-22-41  
E-mail: [ichsran@isc.nw.ru](mailto:ichsran@isc.nw.ru)

ИНН 7801019101  
КПП 780101001  
ОГРН 1037800041399



УТВЕРЖДАЮ  
Директор ИХС РАН, д.т.н.

И.Ю. Кручинина  
«30» декабря 2020 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

«КРИСТАЛЛОХИМИЯ»

Б1.В.ДВ.2 (1)

**Направление подготовки:** 04.06.01 Химические науки

**Направленность подготовки:** Физическая химия

**Квалификация:** Исследователь. Преподаватель-исследователь

**Форма обучения:** Очная

Вариативная часть ООП (дисциплины по выбору)  
Трудоёмкость в зачётных единицах: 6  
Форма промежуточной аттестации: дифференцированный зачет

Санкт-Петербург  
2020

Рабочая программа дисциплины (модуля) (РП) составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВО, на основании ООП ВО и учебных планов ИХС РАН по направлению подготовки: 04.06.01 Химические науки  
направленность подготовки: Физическая химия

## 1. Цели изучения дисциплины

**Цель дисциплины** – закрепление аспирантами теоретических основ и практических навыков по кристаллохимии. Кристаллохимия является составной частью известного триединства «состав-структура-свойства» и изучает связь различных физических и физико-химических свойств веществ с их кристаллическим строением и различными термодинамическими условиями формирования, в первую очередь в условиях высоких температур. Цель дисциплины – знакомство с теоретическими концепциями строения кристаллических веществ и с экспериментальными методами, на которых базируется кристаллохимия.

### Задачи изучения дисциплины

В первую очередь кристаллохимия рассматривает геометрическое строение кристаллов и молекул, описываемое такими основными параметрами как параметры элементарной ячейки, симметрия, координаты атомов, длины химических связей, валентные углы, координационные числа, конформации и конфигурации молекул и т.п. Необходимая для кристаллохимии информация базируется на данных таких экспериментальных методов, как рентгеновский структурный анализ в области больших и малых углов, нейтронография, электронография, спектроскопия комбинационного рассеяния, ИК спектроскопия, УФ и фотоэлектронная спектроскопия, резонансные методы (ЯМР, ЭПР и т.д.), а также типичных физико-химических методов. В задачи данного курса входит освоение аспирантом следующих знаний:

- понимание основных закономерностей строения кристаллического вещества;
- понятие о симметрии кристаллов; индексы кристаллографических граней, типы решеток, сингонии; точечные и пространственные группы кристаллов;
- понятие об основных силах взаимодействия между атомами и молекулами (атомные, ионные, молекулярные и другие типы кристаллов);
- классификация химических соединений разных классов – цепочечные, каркасные и слоистые структуры на примере силикатов, боратов и др.;
- полиморфизм, изоморфизм, морфотропия;
- методы порошковой и монокристалльной дифракции рентгеновских лучей, нейтронов, синхротронного излучения;
- методы порошковой и монокристалльной дифракции в экстремальных (*t-p-x*) условиях – терморентгенография, высокое давление;
- работа с монокристалльными и порошковыми базами данных;
- знание техники безопасности при работе с источниками ионизирующего излучения.

## 2. Место дисциплины в структуре образовательной программы

2.1. Учебная дисциплина (модуль) «КРИСТАЛЛОХИМИЯ» относится к Вариативной части Блока 1 «Дисциплины(модули)» и является дисциплиной осваиваемой аспирантами по выбору.

2.2. Трудоёмкость освоения дисциплины составляет 6 зачетных единиц (з.е.) или 216 академических часов (час), в том числе:

- 22 час аудиторных занятий и 194 часа самостоятельной работы.

2.3. Изучение дисциплины опирается на знания, умения и навыки, приобретенные при изучении дисциплин:

- неорганическая химия;
- органическая химия;
- физическая химия;
- химия твердого тела;
- рентгенофазовый (качественный и количественный) анализ;

- основы рентгеноструктурного анализа;
- физико-химические методы анализа.

### 3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения учебной дисциплины

#### Формируемые учебной дисциплиной знания, умения, навыки

Код компетенции	Знания, умения, владения	
УК-1: способность к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях	<i>Знать</i>	Строение кристаллического вещества материалов
	<i>Уметь</i>	пользоваться физико-химическими основами строения веществ при характеристике структуры и свойств новых веществ
	<i>Владеть</i>	навыками работы с научной литературой с целью определения направления исследования и решения специализированных задач
ПК-1 Способность и готовность к самостоятельному проведению научно-исследовательской работы и получению научных результатов в области неорганической и физической химии неорганических соединений.	<i>Знать</i>	Методы исследования строения кристаллического вещества материалов, области применения этих методов
	<i>Уметь</i>	Выбирать оптимальные методы исследования для решения разных задач кристаллохимии – поиск новых химических соединений, характеристика их структуры и свойств.
ПК-4 способность получать, обрабатывать, анализировать, систематизировать научно-техническую информацию по теме исследования, выбирать и обосновывать методики и средства решения поставленных задач	<i>Знать</i>	Методы обработки больших массивов дифракционных данных и их интерпретации
	<i>Владеть</i>	Современными способами обработки данных и их интерпретации

### 4. Структура и содержание дисциплины (модуля)

#### 4.1. Разделы (модули) и темы дисциплины и виды занятий

№ п/п	Наименование темы (раздела)	Трудоемкость по видам учебной работы (час.)				Формы самостоятельной работы*/	
		Всего	Очная форма обучения				
			ЛЗ	ПЗ	С		СР
1	Общая кристаллохимия	40	4			36	РЛ
2	Высокотемпературная кристаллохимия	36	2	1	1	32	РИР, РЛ
3	Методы терморентгенографии и термического анализа	18	1	1		16	ИЗ
4	Кристаллохимическая интерпретация данных термического	35	1	1	1	32	РИР, РЛ, ИЗ

	расширения						
5	Основы кристаллохимии высоких температур и давлений	18	1		1	16	РИР, РЛ
6	Исследования фазовых равновесий «твердая фаза – твердая фаза», «твердая фаза – жидкая фаза» и построение фазовых диаграмм методом терморентгенографии	36	1	1	2	32	ИЗ
7	Исследование твердых растворов в тройных системах	18	1	1		16	ИЗ
8	Итоговый контроль (в том числе подготовка к зачету)	15	1			14	
Итого:		216	12	5	5	194	

\*/ формы самостоятельной работы: Выполнение комплексных расчетно-исследовательских работ (РИР) Выполнение отдельных исследовательских заданий (ИЗ) Работа с нормативными документами, литературой (РЛ)  
Примечание: ЛЗ – лекционное занятие, ПЗ – практические занятия, С – семинары, СР – самостоятельная работа обучающихся.

#### 4.2. Содержание лекционных занятий:

№ п/п	Содержание	Кол-во уч. часов
1	Тема: Общая кристаллохимия: - Атомное строение кристаллов - Атом и химическая связь в кристаллах - Принципы формирования и описания кристаллических структур, номенклатура Международ. Союза кристаллографов - Морфотропия, изоморфизм, полиморфизм - Структурная систематика силикатов (1 и 2 главы кристаллохимии силикатов по Н.В. Белову) - Кристаллохимия соединений с анионоцентрированными тетраэдрами - Кристаллохимия боратов	4
2	Тема: Высокотемпературная кристаллохимия - Определения, вводные замечания - Принципы высокотемпературной кристаллохимии	2
3	Тема: Метод терморентгенографии - Аппаратура, методики и возможности терморентгенографии в сопоставлении с другими in situ методами, в частности с термическим анализом - Определение главных значений тензора термического расширения.	1
4	Тема: Кристаллохимическая интерпретация данных термического расширения: - Анализ температурной зависимости параметров решетки - Зависимость величины термического расширения от прочности	1

	химических связей. - Структурный механизм термического расширения	
5	Тема: Основы кристаллохимии высоких температур и давлений - Принципы кристаллохимии высоких температур и давлений	1
6	Тема: Исследования фазовых равновесий «твердая фаза – твердая фаза», «твердая фаза – жидкая фаза» методом терморентгенографии: - Особенности исследования и построения двойных фазовых диаграмм по кристаллохимическим данным	1
7	Тема: Исследование твердых растворов в тройных системах - Исследование областей существования твердых растворов (однофазные и двухфазные области) - Применение кристаллохимического подхода для триангуляции тройных систем с твердыми растворами	1
	Итого:	11

#### 4.3. Перечень тем лекционных занятий

№ п/п	Наименование темы	Трудоемкость, ч.	Формируемые компетенции	Методы преподавания
1	Общая кристаллохимия. Описание кристаллических структур; номенклатура Международ. Союза кристаллографов	4	ОПК-1, ПК-1, ПК-4	Чтение лекций с использованием презентаций
2	Высокотемпературная кристаллохимия	2		
3	Методы терморентгенографии и термического анализа	1		
4	Кристаллохимическая интерпретация данных термического расширения	1		
5	Основы кристаллохимии высоких температур и давлений	1		
6	Исследования фазовых равновесий «твердая фаза – твердая фаза», «твердая фаза – жидкая фаза» и построение фазовых диаграмм методом	1		
7	Исследование твердых растворов в тройных системах	1		

#### 4.4. Содержание тем семинаров, практических занятий

п/п	Наименование темы и содержание	Трудоемкость, ч.	Формируемые компетенции	Методы преподавания
1	Высокотемпературная кристаллохимия	2	ОПК-1, ПК-1, ПК-4	ПЗ, С
2	Методы терморентгенографии и термического анализа: Аппаратура, расчетные работы параметров тензора термического расширения	1	УК-1, ОПК-1, ПК-1, ПК-4	ПЗ
3	Кристаллохимическая интерпретация данных термического расширения:	2	УК-1, ОПК-1, ПК-1, ПК-4	ПЗ, С

	Анализ полученных параметров тензора термического расширения; сопоставление со структурой			
4	Основы кристаллохимии высоких температур и давлений	1	ОПК-1, ПК-1, ПК-4	С
5	Исследования фазовых равновесий «твердая фаза – твердая фаза», «твердая фаза – жидкая фаза» и построение фазовых диаграмм методом терморентгенографии	3	УК-1, ОПК-1, ПК-1, ПК-4	ПЗ, С
6	Исследование твердых растворов в тройных системах	1	ОПК-1, ПК-1, ПК-4	ПЗ

#### 4.5. Перечень заданий для самостоятельной работы

№ п/п	Содержание	Кол-во уч. часов	Формируемые компетенции
1	Оформление лабораторного журнала, оформление результатов для статей	4	УК-1, ОПК-1, ПК-1, ПК-4
2	Расчет эксперимента и расчетные работы	18	УК-1, ОПК-1, ПК-1, ПК-4
3	Работа с научной литературой и базами (ICSD, ICDD) в т.ч. подготовка выступлений на семинарах	172	УК-1, ОПК-1, ПК-1

#### 5. Оценочные средства промежуточной аттестации

Контроль знаний аспирантов осуществляется в форме *дифференцированного зачета (зачета с оценкой)*, который является формой промежуточной аттестации аспиранта.

На зачете задаются 2 вопроса из перечня контрольных вопросов.

Для промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине образован фонд оценочных средств в виде контрольных вопросов.

Вопросы по курсу «Кристаллохимия»

1. Понятие о точечной и пространственной симметрии кристаллов
2. Типы химической связи в кристаллах: ионная, ковалентная, металлическая, водородная, вандерваальсова. Почему именно валентные электроны определяют в значительной степени кристаллическую структуру?
3. Смысл терминов – степень окисления атома, валентность элемента и электроотрицательность в определении Поллинга.
4. Гибридизация электронных облаков по Поллингу. Примеры. Роль гибридизации в стереохимии.
5. Неподделенные электронные пары, их роль в стереохимии.
6. Основные понятия и термины описания кристаллической структуры.
7. Принципы кристаллохимии: плотнейшая упаковка, пять правил Л. Поллинга
8. Почему хим. соединение понижается устойчивость при объединении к. полиэдров через ребра и грани?
9. Почему разнообразие структурных единиц в кристалле стремится к минимуму?
10. Почему образуются химические связи в кристаллах?
11. Выбор критериев для вывода крист.-хим. явлений? М.б. существуют иные более удачные критерии?
12. Аналогичный вопрос по систематике полиморфных превращений.
13. Что послужило основанием для введения нулевой координационной сферы при систематике полиморфных превращений?
14. Почему связи С–С в слое графита прочнее чем в алмазе?

15. Типы изоморфных замещений, размерные критерии, роль 15%-критерия Гольдшмита, его недостаточность.
16. Фактор структурного разнообразия изоморфных замещений, количественная характеристика ионов и позиций, в которых происходит замещение.
17. Решающие факторы замещения.
18. Морфотропия. Что восхитило Н.В. Белова в морфотропном ряду диоксидов четырехвалентных центральных атомов?
19. Логика формирования морфотропных рядов боратов и нитратов на базе карбонатного кальцит-арагонитового морфотропного ряда.
20. Частота встречаемости ОЛТР в кристаллах различных сингоний. Причины.
21. Причины подобия или антиподобия деформаций различной природы, например термических и барических деформаций.
22. Что общего у кристаллических структур алмаза, боразона и двойных алмазоподобных полупроводников?
23. Как Вы думаете, почему именно валентные электроны определяют в значительной степени кристаллическую структуру?
24. Чем определяется кристаллическая структура интерметаллидов различного типа: фаз упорядочения, электронных структур, фаз Лавеса?
25. Чем определяется тугоплавкость и сверхтвердость фаз внедрения в металлы маленьких атомов H, B, C, N?
26. К. ч. кремния в фазах кремнезема?
27. Систематика кислородных соединений по степени окисления центральных атомов треугольных и тетраэдрических радикалов и по степени их полимеризации. Как в систематике проявляются возможности полимеризации и прочностные свойства кислородных соединений?
28. Чем определяется прочность ортосиликатов? Примеры.
29. Диортосиликаты, структура куспидина. Создание «второй главы» кристаллохимии силикатов с крупными катионами Н.В. Беловым.
30. Кольцевые силикаты.
31. Пироксены. Что является стержнем пироксенов: пироксеновая цепочка тетраэдров  $SiO_4$  или цепочка октаэдров  $MO_6$ , принцип приспособляемости.
32. Слоистые силикаты, построение из трех типов сеток. Примеры.
33. Возможно ли образование каркасных силикатов?
34. Каркасные алюмосиликаты как производные от кремнезема. Типы каркасных алюмосиликатов. Определение Al-Si упорядочения в тетраэдрах  $TO_4$ . Алюмосиликаты ВТ и НТ.
35. Почему полевые шпаты не являются ионными обменниками (цеолитами)?
36. Уникальные черты кристаллохимии боратов

Результаты зачета определяются оценками **«отлично»**, **«хорошо»**, **«удовлетворительно»**, **«неудовлетворительно»** :

- для оценки «отлично» - наличие глубоких и исчерпывающих знаний в объеме пройденного программного материала, правильные и уверенные действия по применению полученных знаний на практике, грамотное и логически стройное изложение материала при ответе, знание дополнительных источников информации;
- для оценки «хорошо» - наличие твердых и достаточно полных знаний программного материала, незначительные ошибки при освещении заданных вопросов, правильные действия по применению знаний на практике, четкое изложение материала;
- для оценки «удовлетворительно» - наличие твердых знаний пройденного материала, изложение ответов с ошибками, уверенно исправляемыми после дополнительных вопросов, необходимость наводящих вопросов, правильные действия по применению знаний на практике;



- для оценки «неудовлетворительно» - наличие грубых ошибок в ответе, непонимание сущности излагаемого вопроса, неумение применять знания на практике, неуверенность и неточность ответов на дополнительные и наводящие вопросы.

## **6. Образовательные технологии по дисциплине**

**6.1.** В процессе обучения применяются следующие образовательные технологии: лекции с использованием презентаций, метод малых групп.

**6.2.** При осуществлении образовательного процесса по дисциплине используются следующие информационно-телекоммуникационные технологии:

Лекции занятия проводятся с использованием компьютерной презентационной программы PowerPoint, практические занятия – с использованием специальных программ (ТТТ, РТТ, Vesta, ToposPro). Программы ТТТ, РТТ для расчета параметров тензора термического расширения и его графического представления являются авторскими, они разработаны в ЛСХО ИХС РАН.

## **7. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины**

### **7.1. Основная литература:**

1. Уэллс. А. Структурная неорганическая химия в 3-х т. Москва. Мир. 1987-1988. 1 т.- 408 с., 2 т. - 695с., 3т. – 564 с.
2. Бубнова Р.С., Кржижановская М.Г. Филатов С.К. Практическое руководство по терморентгенографии поликристаллов Ч. 1. Осуществление эксперимента и интерпретация полученных данных: учеб. пособие. СПб.: С.-Петербург. гос. ун-т, 2011.
3. Бубнова Р.С., Филатов С.К. Терморентгенография поликристаллов. Часть II. Определение количественных характеристик тензора термического расширения Учебное пособие. СПб: Изд-во СПбГУ, 2013. 143 с.
4. Филатов С.К., Кривовичев С.В, Бубнова Р.С. Общая кристаллохимия: учебник. СПб: изд-во С.-Петерб. ун-та, 2018. 276 с.  
Филатов С.К., Кривовичев С.В., Бубнова Р.С. Общая кристаллохимия: учебник [Электронный ресурс] – Раздел «Химия» – Издательство СПбГУ (Санкт-Петербургский государственный университет), 2018 г. – 276 с. –<https://e.lanbook.com/book/109482>.
5. Басалаев Ю.М. Кристаллофизика и кристаллохимия [Электронный ресурс] – Раздел «Физика – Кем ГУ (Кемеровский государственный университет)», 2014 г. – 403 с. – <https://e.lanbook.com/book/61407>.
6. Пугачев В.М. Кристаллохимия [Электронный ресурс] – коллекция «Химия» – (КемГУ) – Кемеровский государственный университет, 2013 г. –104 с. – <https://e.lanbook.com/book/44382>.

### **7.2. Дополнительная литература**

1. Бубнова Р.С., Филатов С.К. Высокотемпературная кристаллохимия боратов и боросиликатов. СПб.: Наука, 2008.
2. Урусов В.С., Еремин Н.Н. Атомистическое компьютерное моделирование структуры и свойств неорганических кристаллов и минералов, их дефектов и твердых растворов. М.: ГЕОС, 2012.
3. Пригожин И., Дефэй Р. Химическая термодинамика / пер. с англ. 2-е изд. М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2010.
4. Иванов-Шиц А.К., Мурин И.В. Ионика твердого тела: В 2 т. Том 1. — СПб.: Изд-во С.-Петербург. ун-та, 2010. — 616 С.
5. Иванов-Шиц А.К., Мурин И.В. Ионика твердого тела: В 2 т. Том 2. — СПб.: Изд-во С.-Петербург. ун-та, 2010. — 1000 С.

[www.iza-structure.org/databases/](http://www.iza-structure.org/databases/)  
[www.icdd.com/](http://www.icdd.com/)  
[www.iucr.org/](http://www.iucr.org/)  
[www.iucr.org/resources/other-directories/software](http://www.iucr.org/resources/other-directories/software)  
[www.chemsoc.ru/](http://www.chemsoc.ru/)  
[www.nanohub.org/](http://www.nanohub.org/)  
[www.materialsproject.org/](http://www.materialsproject.org/)  
[www.materialsproject.org/wiki/index.php/Materials Explorer Manual](http://www.materialsproject.org/wiki/index.php/Materials_Explorer_Manual)

## **8. Материально-техническое обеспечение дисциплины.**

Материально-технической базой, обеспечивающей проведение занятий, являются аудитории ИХС РАН (конферен-зал и выставочный зал), которые оснащены видеопроекционным оборудованием для презентаций, экраном, WiFi, компьютером с доступом к сети Интернет, а также помещение для самостоятельной работы, оснащенное компьютерами с доступом в Интернет.

### **Программное обеспечение**

1. Программа для ЭВМ: Определение тензора термического расширения кристаллических веществ методом терморентгенографии – TetaToTensor. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2011615363 / В. А. Фирсова, Р. С. Бубнова, С. Н. Волков, С. К. Филатов; заявитель и правообладатель Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Ордена Трудового Красного Знамени Институт химии силикатов им. И.В. Гребенщикова Российской академии наук (ИХС РАН) дата 23 мая 2011 г.

2. Программа для ЭВМ: Исследование термических преобразований кристаллической структуры по данным терморентгенографии – RietToTensor. Свидетельство № 2018663287 Российская Федерация, вторая версия: свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ / В. А. Фирсова, Р. С. Бубнова, С. Н. Волков, С. К. Филатов; заявитель и правообладатель Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Ордена Трудового Красного Знамени Институт химии силикатов им. И.В. Гребенщикова Российской академии наук (ИХС РАН) - № 2018615098; заявл. 21.05.2018; зарегистр. 24.10.2018.

3. VESTA LICENSE Version 3, 2006, Academic license

4. ToposPro (free for non-commercial use, URL: <http://topospro.com>)