

Документ подписан простой электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Ястребов Олег Александрович
Должность: Ректор
Дата подписания: 29.05.2024 15:21:29
Уникальный программный ключ:
ca953a01204891083f939673076ef1a989aae18a

**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 МССН 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

Дисциплина «Кристаллохимия и основы рентгеноструктурного анализа» входит в программу бакалавриата «Химия» по направлению 04.03.01 «Химия» и изучается в 7 семестре 4 курса. Дисциплину реализует Кафедра общей и неорганической химии. Дисциплина состоит из 6 разделов и 21 тема и направлена на изучение основ современной кристаллохимии и рентгеноструктурного анализа.

Целью освоения дисциплины является изучение основ современной кристаллохимии: пониманию 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, установления структуры и исследования свойств и реакционной способности химических соединений под руководством специалиста более высокой квалификации	ПК-4.2 Владеет навыками использования современных методов и аппаратуры для изучения химических процессов, строения и свойств химических соединений;

3. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ОП ВО

Дисциплина «Кристаллохимия и основы рентгеноструктурного анализа» относится к обязательной части блока 1 «Дисциплины (модули)» образовательной программы высшего образования.

В рамках образовательной программы высшего образования 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*
ОПК-1	Способен анализировать и интерпретировать результаты химических экспериментов, наблюдений и измерений	Неорганическая химия; Аналитическая химия; Органическая химия; Физическая химия; Химическая технология; Строение вещества; Основы квантовой химии; Высокомолекулярные соединения; Компьютерные технологии в химии; 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;
ПК-1	Способен использовать полученные знания теоретических основ фундаментальных разделов химии при решении профессиональных задач	Учебная практика; Неорганическая химия; Аналитическая химия; Органическая химия; Физическая химия; Химическая технология; История химии; Строение вещества; Основы квантовой химии; Высокомолекулярные соединения; <i>Введение в химию координационных соединений**;</i> <i>Основы нанохимии**;</i> <i>Химия лекарственных веществ**;</i>	Научно-исследовательская работа; Преддипломная практика; Избранные главы химии; Экспериментальные методы исследования в химии;
ПК-4	Способен использовать современные методы синтеза, установления структуры и исследования свойств и реакционной	Неорганическая химия; Органическая химия; Аналитическая химия; Физическая химия;	Научно-исследовательская работа; Преддипломная практика; Экспериментальные методы исследования в химии;

Шифр	Наименование компетенции	Предшествующие дисциплины/модули, практики*	Последующие дисциплины/модули, практики*
	способности химических соединений под руководством специалиста более высокой квалификации		

* - заполняется в соответствии с матрицей компетенций и СУП ОП ВО

** - элективные дисциплины /практики

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 образовательной программы высшего образования для очной формы обучения.

Вид учебной работы	ВСЕГО, ак.ч.		Семестр(-ы)
			7
<i>Контактная работа, ак.ч.</i>	108		108
Лекции (ЛК)	36		36
Лабораторные работы (ЛР)	72		72
Практические/семинарские занятия (СЗ)	0		0
<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

Номер раздела	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела (темы)		Вид учебной работы*
Раздел 1	Симметрия и морфология кристалла	1.1	Понятие о кристаллическом веществе. Кристаллохимия и ее связь с другими науками. Закон постоянства углов. Гониометрия. Стереографические проекции кристаллов.	ЛК
		1.2	Сетка Вульфа. Закон рациональности отношений параметров. Символы граней.	ЛК, ЛР
		1.3	Тема 1.3. Симметрия кристаллических многогранников. 32 точечные группы симметрии	ЛК, ЛР
		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	2.1	Понятие пространственной (кристаллической) решетки. Узел, узловой ряд, узловая сетка, узловая решетка. Трансляция. Элементарная ячейка.	ЛК
		2.2	Четырнадцать типов пространственных решеток Бравэ. Индексы и символы узлов, узловых рядов, узловых сеток. Кристаллическая решетка и кристаллическая структура	ЛК, ЛР
		2.3	Симметрия в кристаллическом пространстве. Федоровские (пространственные) группы симметрии	ЛК, ЛР
		2.4	Правильные системы эквивалентных точек. Подсчет числа формульных единиц в ячейке. Координационное число и координационный полиэдр (многогранник). Тетра- и октаэдрические пустоты	ЛК, ЛР
		2.5	Тема 2.5. Плотнейшие шаровые упаковки – гексагональная и кубическая. Структурные типы	ЛК, ЛР
Раздел 3	Основы рентгеноструктурного анализа	3.1	Рентгеновские лучи. Дифракция рентгеновских лучей. Индексы узловых сеток. Межплоскостные расстояния	ЛК
		3.2	Уравнение Лауэ. Уравнение Вульфа-Брэгга. Методы рентгенографии.	ЛК, ЛР
		3.3	Рентгенофазовый анализ.	ЛК, ЛР
Раздел 4	Полиморфизм. Изоморфизм	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	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.	ЛК

Номер раздела	Наименование раздела дисциплины	Содержание раздела (темы)		Вид учебной работы*
			Системы с эвтектикой. Твердые растворы. Ограниченные твердые растворы	
		5.2	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 и координационным числом, правило Магнуса. Поляризация ионов, ее влияние на межатомные расстояния и координацию. Основные структурные типы бинарных ионных соединений. Структуры двойных оксидов и двойных галогенидов. Структурные типы шпинели, перовскита, пироклора. Особенности структур со сложными ионами. Структуры нитратов, карбонатов, сульфатов. Кристаллохимия силикатов. Структуры кристаллогидратов	ЛК, ЛР
		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	ЛК, ЛР
		5.4	Ван-дер-ваальсовы и водородные связи в кристаллах. 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	ЛК, ЛР
Раздел 6	Физико-химические свойства кристаллов	6.1	Тема 6.1. Особенности механических свойств кристаллических тел: твердость, упругость. Пьезоэлектричество. Пироэлектричество.	ЛК
		6.2	Магнитные свойства кристаллов. Оптические свойства кристаллов	ЛК, ЛР
		6.3	Идеальные и реальные кристаллы. Дефекты в кристаллах. Точечные дефекты. Дислокации	ЛК, ЛР
		6.4	Кристаллохимические закономерности в периодической системе Д.И. Менделеева	ЛК, ЛР

* - заполняется только по **ОЧНОЙ** форме обучения: ЛК – лекции; ЛР – лабораторные работы; СЗ – практические/семинарские занятия.

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, Рентгеновские дифрактометры для поликристаллических исследований Tongda TD-3700, TDM-20, ДРОН-7, компьютеры. Пакет программ для расчета кристаллохимических характеристик, разработанных в лаборатории рентгенографии и кристаллохимии РУДН.
Для самостоятельной работы	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

* - аудитория для самостоятельной работы обучающихся указывается **ОБЯЗАТЕЛЬНО!**

7. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

Основная литература:

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

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

3. Словохотов Ю.Л. Основы кристаллохимии: учебное пособие / Словохотов Ю.Л. – М.: «КДУ», «Добросвет», 2021. – ISBN 978-5-91304-875-2. - doi: 10.31453/kdu.ru.91304.0051 URL: <https://bookonline.ru/node/4550/>

Дополнительная литература:

1. Егоров-Тисменко Ю.К. Кристаллография и кристаллохимия : 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

3. Лобанов Лабораторный практикум по курсу "Рентгендифракционные методы в неорганической химии" : 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

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

5. 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

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 «Троицкий мост»

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.elsevier.com/locate/scopus/>

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

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

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

* - все учебно-методические материалы для самостоятельной работы обучающихся размещаются в соответствии с действующим порядком на странице дисциплины **в ТУИС!**

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.

* - ОМ и БРС формируются на основании требований соответствующего локального нормативного акта РУДН.

РАЗРАБОТЧИК:

<hr/> <i>Должность, БУП</i>	<hr/> <i>Подпись</i>	<hr/> Лобанов Николай Николаевич <i>Фамилия И.О.</i>
-----------------------------	----------------------	--

РУКОВОДИТЕЛЬ БУП:

<hr/> Заведующий кафедрой <i>Должность БУП</i>	<hr/> <i>Подпись</i>	<hr/> Хрусталеv Виктор Николаевич <i>Фамилия И.О.</i>
---	----------------------	---

РУКОВОДИТЕЛЬ ОП ВО:

<hr/> Заведующий кафедрой <i>Должность, БУП</i>	<hr/> <i>Подпись</i>	<hr/> Хрусталеv Виктор Николаевич <i>Фамилия И.О.</i>
--	----------------------	---