

Документ подписан простой электронной подписью  
Информация о владельце:  
ФИО: Смирнов Сергей Николаевич  
Должность: врио ректора  
Дата подписания: 25.03.2025 16:40:48  
Уникальный программный ключ:  
69e375c64f7e975d4e8830e7b4fcc2ad1bf35f08

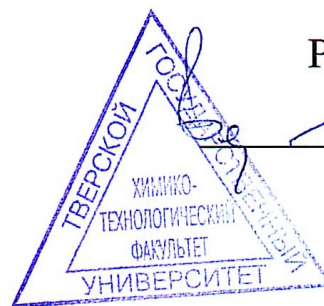
# МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ

Утверждаю:

Руководитель ООП

Феофанова М.А.

24 апреля 2024 г.



Рабочая программа дисциплины

## Кристаллохимия

Закреплена за кафедрой: **Физической химии**

Направление подготовки: **04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия**

Направленность (профиль): **Экспертная и медицинская химия: теория и практика.**

Квалификация: **Химик. Преподаватель химии**

Форма обучения: **очная**

Семестр: **7**

Программу составил(и):

*канд. хим. наук, доц., Русакова Н.П.*

Тверь, 2024

## 1. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ

### Цели освоения дисциплины (модуля):

Целью освоения дисциплины – сформировать у студента основные представления учения о кристаллах, привить ему навыки определения кристаллических структур.

### Задачи:

-обработка структурной информации, получаемой методами РСА и другими дифракционными методами, систематизация структурного материала,  
-выявление и интерпретация закономерностей, присущих строению кристаллических веществ, установление зависимости физических и химических свойств от структуры.

Кристаллохимия – наука о кристаллических структурах. Это важнейший раздел химии, базирующийся главным образом на данных рентгеноструктурного анализа (РСА), а также электронографии и нейтронографии.

### Содержание дисциплины «Кристаллохимия»:

- предмет и задачи кристаллохимии;  
- кристаллические структуры;  
- основы рентгеноструктурного анализа;  
- группы симметрии и структурные классы;  
- общая кристаллохимия (типы химических связей в кристаллах, систематика кристаллических структур, шаровые упаковки и кладки, кристаллохимические радиусы атомов, изоморфизм и полиморфизм);  
- избранные главы систематической кристаллохимии (простые вещества, бинарные и тернарные соединения, силикаты, органические вещества); обобщенная кристаллохимия.

## 2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ООП

Цикл (раздел) ОП: Б1.О

### Требования к предварительной подготовке обучающегося:

Дополнительные главы квантовой химии

Избранные главы физической химии

Квантовая механика и квантовая химия

Координационная химия

Стереохимия

Физико-химические методы исследования структуры органических соединений

Физическая химия

Органическая химия

Аналитическая химия

Физика

Строение вещества

Неорганическая химия

**Дисциплины (модули) и практики, для которых освоение данной дисциплины (модуля) необходимо как предшествующее:**

Дополнительные главы квантовой химии

Избранные главы физической химии

Физические методы исследования

## 3. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ

<b>Общая трудоемкость</b>	3 ЗЕТ
Часов по учебному плану	108
<b>в том числе:</b>	
аудиторные занятия	51
самостоятельная работа	37

#### 4. ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ, СООТНЕСЕННЫЕ С ПЛАНИРУЕМЫМИ РЕЗУЛЬТАТАМИ ОСВОЕНИЯ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ

ОПК-3.1: Применяет теоретические и полуэмпирические модели при решении задач химической направленности

- Уровень 1 основные приемы рентгенструктурного анализа, его математические основы и назначение, определение дальнего порядка кристаллов, постулаты квантовой механики, используемые при квантово-химических вычислениях структуры молекулы или кристалла  
основные кристаллографические системы и построение сингоний на них  
элементы и операции симметрии, трансляционные единицы и элементарные ячейки по Браве  
построение групп симметрии и их обозначение по Шенфлису и Могену  
выделение винтовых осей, плоскостей скольжения и симметрия пустот  
проекции сферические, стереографические, гномостереограммические, гномические, сетка Вульфа, планарный и полярный комплекс, отражение на проекциях элементов симметрии и т.д.
- Уровень 1 выделять в кристаллической ячейке элементы симметрии и саму кристаллографическую ячейку, элементарную ячейку  
представить геометрию молекулы и кристаллической ячейки для квантово-химических вычислений структуры методами *ab-initio*, РМ и т.д.  
определять кристаллографическую систему по ее базису  
работать с индексами Миллера для плоскостей кристалла и направлений  
выделить элементы симметрии кристалла, составить группу симметрии, обозначить в символикe Могена и Шенфлиса  
записать элементы и группу симметрии на стереографической и гномостереографической проекциях  
показать наличие в кристаллографической ячейке винтовой оси, плоскости скользящего отражения и т.д.
- Уровень 1 основами геометрии и геометрических построений, методами вычисления углов и сторон треугольников, правилами построения плоскостей трехмерной системы координат в двухмерном пространстве и т.д.  
основами оптики и понятиями о типах электромагнитного излучения и их особенностях  
основами квантовой механики, используемыми при вычислении структуры молекул и кристаллических структур, основами выбора функционалов и метода для построения квантово-химической модели элементарной ячейки

ОПК-6.3: Представляет результаты работы в виде тезисов доклада на русском и английском языке в соответствии с нормами и правилами, принятыми в химическом сообществе

- Уровень 1 основные этапы оформления научной информации в виде тезисов  
методы работы с основными браузерами и стандартным программным обеспечением, устанавливаемым на персональный компьютер  
основные правила работы с текстами, построения и согласования предложений  
используемую терминологию на русском и английском языках

- Уровень 1 оформить тезисы на бумажном и электронном носителе грамотно строить предложения на русском и английском языках
- Уровень 1 обширным словарным запасом и знанием русского и английского языка навыками создания и работы с документами на компьютере, оформления презентаций способностью чтения информации на английском и русском языках

ОПК-6.4: Готовит презентацию по теме работы и представляет ее на русском и английском языках

- Уровень 1 правила оформления и таймплейс представления презентации электронные базы данных, в том числе химической направленности, поисковые интернет-ресурсы
- Уровень 1 выделить цели, задачи, объекты, методы, содержание, выводы презентации отобрать иллюстрационный, графический и текстовый материал для презентации работать с интернет-ресурсами и электронными базами данных
- Уровень 1 навыками работы с графическими, текстовыми редакторами и редакторами изображений, пакетом PowerPoint умением осуществлять поисковые запросы на интернет-ресурсах и электронных базах данных грамотной речью и правильным изложением мысли на русском и английском языках

## 5. ВИДЫ КОНТРОЛЯ

Виды контроля в семестрах:	
зачеты	7

## 6. ЯЗЫК ПРЕПОДАВАНИЯ

Язык преподавания: русский.

## 7. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Код занят.	Наименование разделов и тем	Вид занятия	Семестр / Курс	Часов	Источники	Примечание
	Раздел 1. Введение					
1.1	Введение	Лек	7	2	Л1.1 Л1.2 Л1.3Л2.1 Л2.2 Л2.3 Л2.4 Л2.5	
	Раздел 2. Основы рентгеноструктурного анализа					
2.1	Основы рентгеноструктурного анализа	Лек	7	1		
2.2	Основы рентгеноструктурного анализа	Пр	7	4		
2.3	Основы рентгеноструктурного анализа	Ср	7	7		

	Раздел 3. Группы симметрии и структурные классы					
3.1	Группы симметрии и структурные классы	Лек	7	4		
3.2	Группы симметрии и структурные классы	Пр	7	4		
3.3	Группы симметрии и структурные классы	Ср	7	8		
	Раздел 4. Основы кристаллохимии					
4.1	Основы кристаллохимии	Лек	7	4		
4.2	Основы кристаллохимии	Пр	7	8		
4.3	Основы кристаллохимии	Ср	7	8		
	Раздел 5. Систематическая кристаллохимия					
5.1	Систематическая кристаллохимия	Лек	7	2		
5.2	Систематическая кристаллохимия	Пр	7	10		
5.3	Систематическая кристаллохимия	Ср	7	7		
	Раздел 6. Обобщенная кристаллохимия					
6.1	Обобщенная кристаллохимия	Лек	7	4		
6.2	Обобщенная кристаллохимия	Пр	7	8		
6.3	Обобщенная кристаллохимия	Ср	7	7		

### Список образовательных технологий

1	Дискуссионные технологии (форум, симпозиум, дебаты, аквариумная дискуссия, панельная дискуссия, круглый стол, фасилитированная и т.д.)
2	Информационные (цифровые) технологии
3	Технологии развития критического мышления
4	Технологии развития дизайн-мышления
5	Активное слушание

## 8. ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ТЕКУЩЕЙ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

### 8.1. Оценочные материалы для проведения текущей аттестации

Основные вопросы подготовки к модульной работе №1

1. История развития кристаллохимии
2. Дифракция рентгеновских лучей. Уравнение Лауэ. Методы получения

дифракционной картины. Автоматические дифрактометры. Уравнение Брэгга-Вульфа.

3. Рентгенография.
4. Нейтронография.
5. Электронография.
6. Кристаллографические проекции: сферическая, стереографическая.
7. Кристаллографические проекции: гномостереографическая, гномическая.
8. Ретикулярная плотность.
9. Пространственная решетка. Внутренняя симметрия кристалла.

Параллелепипед повторяемости.

10. Простые формы кристаллов
11. Плотнейшая упаковка шаров.
12. Энантиоморфизм. Анизотропия кристаллов.
13. Структура льда. Водородная связь. Вода
14. Открытые элементы симметрии и их сочетания с трансляциями.
15. Закрытые операции и элементы симметрии кристаллов.
16. Энергия решетки и цикл Борна-Габера.
17. Изоморфизм и полиморфизм.
18. Структуры бинарных соединений ( $\text{NaCl}$ ,  $\text{CsCl}$ ,  $\text{ZnS}$  (сфалерит),  $\text{ZnS}$  (вюртцит),  $\text{NiS}$ ,  $\text{BN}$ ,  $\text{CaF}_2$  (флюорит),  $\text{TiO}_2$  (рутил),  $\text{Cu}_2\text{O}$  (куприт),  $\text{FeS}_2$  (пирит)).
19. Фуллерены и нанотрубки. Кристаллическая структура?
20. Кристаллогенез в растворах
21. Кристаллогенез в расплавах
22. От чего зависит спайность кристалла?
23. Понятие кристаллической структуры. Основные модели (статические и динамические, дискретные и континуальные).
24. Симметрия молекул и внешней формы кристаллов. Кристаллографические точечные группы (32 кристаллических класса).
25. Винтовые оси. Плоскости скользящего отражения.
26. Структурные типы простых веществ (металлы и неметаллы)
27. Молекулярные кристаллы (органические соединения)
28. Структура координационных соединений. Координационное число и координационный многогранник
29. Жидкие кристаллы. Характеристика. Жидкокристаллическое состояние.
30. Симметрия внешней формы кристаллов. Кристаллографические точечные группы (кристаллические классы). Сингонии.
31. Плотнейшие шаровые упаковки и кладки.
32. Структурный тип перовскита.
33. Структурный тип шпинели.
34. Кристаллохимия силикатов.
35. Кристаллические состояния олова и его соединений
36. Кристаллические состояния серы и ее соединений
37. Аллотропные модификации углерода.
38. Молекулярные кристаллы (органические соединения). Межмолекулярное взаимодействие в атом-атомном представлении
39. Дефекты в кристаллах и их влияние на свойства кристаллов

Основные вопросы подготовки к модульной работе №2

1. Кристаллографические проекции: сетка Вульфа.
2. Одномерный ряд. Период идентичности.
3. Трансляция. Двумерная решетка. Виды параллелограммов.
4. Кристаллографические системы. Сингонии.
5. Элементарная ячейка. Типы решеток.
6. Символы узлов, рядов и плоскостей.
7. Энергия решетки. Уравнение Борна.

8. Доказать отсутствие в кристаллах осей 5-го порядка и порядков выше шестого. Квазикристаллы.

9. Координационное число и координационный многогранник.

10. Решетчатое строение графита.

11. Точечные группы симметрии решёток низших сингоний.

12. Точечные группы симметрии решёток средних сингоний.

13. Решётки высших сингоний и их точечные группы симметрии.

14. Правильные многогранники. Выделение в реальных кристаллах. Параметры

15. Энергия решетки. Уравнение Капустинского.

16. Чем определяется характер двумерной решетки?

17. Чем определяется элементарная ячейка и ее форма?

18. Примитивные элементарные ячейки, соответствующие кристаллографическим системам.

19. Типы химических связей в кристаллах. Ионные, атомные, молекулярные кристаллы. Металлы

20. Базы структурных данных. Использование рентгеноструктурных и кристаллохимических данных в химии, молекулярной биологии.

21. Решетки Бравэ. Пространственные группы.

22. Кристаллохимические радиусы. Металлические и ионные радиусы.

Ковалентные и ван-дер-ваальсовы радиусы.

23. Дефекты в кристаллах: вакансии

24. Дефекты в кристаллах: междоузлия

25. Дефекты в кристаллах: дислокации

26. Дефекты в кристаллах: деформации

27. Элементы симметрии и операции симметрии

28. Выращивание кристаллов – метод Чохральского

практические работы по темам № 1 - № 6

способ: на компьютере

результаты: презентация на русском и английском языках

3 работы (до 15 баллов каждая)

2.вид:

контрольная работа № 1 (до 10 баллов)

контрольная работа № 2 (до 10 баллов)

способ: традиционный

результаты: оформленные по заданию бумажные бланки с решениями

3.вид: вид: выполнение самостоятельной работы - до 12 баллов

способ: на компьютере

результаты: тезисы доклада на русском и английском языках, оформленные в соответствии с требованиями

4. вид: посещаемость - 0,5 балла - занятие

## 8.2. Оценочные материалы для проведения промежуточной аттестации

Вопросы к зачету.

1. Кристаллическая структура и способы ее моделирования.

2. Одномерный ряд, трансляция, период идентичности. Двумерная решетка.

3. Базы структурных данных. Использование рентгеноструктурных и кристаллохимических данных в химии, молекулярной биологии.

4. Стереохимический и кристаллоструктурный аспекты кристаллохимии.

5. Основы рентгеноструктурного анализа. Сравнение дифракционных методов изучения кристаллической структуры (рентгенография, нейтронография, электронография).

6. Симметрия внешней формы кристаллов. Кристаллографические точечные группы (кристаллические классы). Сингонии.

7. Внутренняя симметрия кристалла. Кристаллическая решетка. Элементарная ячейка. Трансляция. Винтовые оси. Плоскости скользящего отражения.
8. Решетки Бравэ. Пространственные группы.
9. Типы химических связей в кристаллах.
10. Плотнейшие шаровые упаковки и кладки.
11. Кристаллохимические радиусы. Металлические и ионные радиусы. Ковалентные и ван-дер-ваальсовы радиусы.
12. Координационное число и координационный многогранник
13. Структурные типы простых веществ и бинарных соединений.
14. Структурный тип перовскита.
15. Структурный тип шпинели.
16. Кристаллохимия силикатов.
17. Кристаллическая структура координационных соединений.
18. Молекулярные кристаллы (органические соединения).
19. Межмолекулярное взаимодействие в атом-атомном представлении (органические кристаллы).
20. Жидкокристаллическое состояние.

### 8.3. Требования к рейтинг-контролю

Рейтинг дисциплины - 100 баллов (зачет от 40 баллов)

1. практические работы по темам № 1 - № 6 - 3 работы (до 15 баллов каждая)
2. контрольная работа № 1 (до 10 баллов), контрольная работа № 2 (до 10 баллов)
3. выполнение самостоятельной работы - до 12 баллов
4. вид: посещаемость - 0,5 балла - занятие

## 9. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

### 9.1. Рекомендуемая литература

#### 9.1.1. Основная литература

Шифр	Литература
Л1.1	Филатов, Кривовичев, Бубнова, Систематическая кристаллохимия, Санкт-Петербург: Издательство Санкт-Петербургского государственного университета, 2019, ISBN: 978-5-288-05958-2, URL: <a href="https://znanium.com/catalog/document?id=373603">https://znanium.com/catalog/document?id=373603</a>
Л1.2	Филатов С.К., Кривовичев С.В., Общая кристаллохимия, Санкт-Петербург: Издательство Санкт-Петербургского государственного университета, 2018, ISBN: 978-5-288-05812-7, URL: <a href="https://znanium.com/catalog/document?id=333199">https://znanium.com/catalog/document?id=333199</a>
Л1.3	Басалаев Ю. М., Кристаллофизика и кристаллохимия, Кемерово: КемГУ, 2020, ISBN: 978-5-8353-2721-8, URL: <a href="https://e.lanbook.com/book/162600">https://e.lanbook.com/book/162600</a>

#### 9.1.2. Дополнительная литература

Шифр	Литература
Л2.1	Леонюк, Копорулина, Волкова, Мальцев, Кристаллография: зарождение, рост и морфология кристаллов, Москва: Юрайт, 2024, ISBN: 978-5-534-04738-7, URL: <a href="https://urait.ru/bcode/539170">https://urait.ru/bcode/539170</a>
Л2.2	Батаев, Батаев, Кристаллография. Формы кристаллических многогранников, Новосибирск: Новосибирский государственный технический университет (НГТУ), 2018, ISBN: 978-5-7782-3708-7, URL: <a href="https://znanium.com/catalog/document?id=396046">https://znanium.com/catalog/document?id=396046</a>



Л2.3	Батаев, Батаев, Кристаллография. Обозначение и вывод классов симметрии, Новосибирск: Новосибирский государственный технический университет (НГТУ), 2018, ISBN: 978-5-7782-3707-0, URL: <a href="https://znanium.com/catalog/document?id=396045">https://znanium.com/catalog/document?id=396045</a>
Л2.4	Батаев, Батаев, Лазуренко, Кристаллография. Методы проецирования кристаллов, Новосибирск: Новосибирский государственный технический университет (НГТУ), 2018, ISBN: 978-5-7782-3709-4, URL: <a href="https://znanium.com/catalog/document?id=396044">https://znanium.com/catalog/document?id=396044</a>
Л2.5	Батаев, Батаев, Веселов, Кристаллография. Индексирование граней и ребер кристаллов, Новосибирск: Новосибирский государственный технический университет (НГТУ), 2019, ISBN: 978-5-7782-3870-1, URL: <a href="https://znanium.com/catalog/document?id=396043">https://znanium.com/catalog/document?id=396043</a>

### 9.3.1 Перечень программного обеспечения

1	Adobe Acrobat Reader
2	OpenOffice

### 9.3.2 Современные профессиональные базы данных и информационные справочные системы

1	Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU (подписка на журналы)
2	Журналы American Institute of Physics (AIP)
3	БД INSPEC EBSCO Publishing
4	БД Scopus
5	БД Web of Science

## 10. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Аудит-я	Оборудование
5-310	Проектор Экран Компьютер (монитор, системный блок, клав., мышь) Доска - 1шт. Трибуна -1 шт. Комплект учебной мебели
5-311	Проектор Экран Компьютер (монитор, системный блок, клав., мышь) Доска - 1шт. Трибуна -1 шт. Комплект учебной мебели Стенд "Периодическая таблица

## 11. МЕТОДИЧЕСКИЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ОБУЧАЮЩИХСЯ ПО ОСВОЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ

Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

1) Рекомендуемая литература

а) Основная литература:

1. Басалаев, Ю.М. Кристаллофизика и кристаллохимия / Ю.М. Басалаев; Мин. обр. и науки РФ, ФГБОУ ВПО «Кемеровский государственный университет». – Кемерово: Кемеровский государственный университет, 2014. – 403 с.: ил. – Режим доступа: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=278304>

2. Урусов В.С., Ерёмин Н.Н. Кристаллохимия. Краткий Курс. МГУ, 2010, 256 с.– Электронный ресурс. - Режим доступа: <http://www.iprbookshop.ru/13343.html>

3. Пугачев, В.М. Кристаллохимия / В.М. Пугачев. – Кемерово: Кемеровский государственный университет, 2013. – 104 с. – Режим доступа: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=232461>.

б) Дополнительная литература:

1. Белов Н.П. Основы кристаллографии и кристаллофизики. Часть I. Введение в теорию симметрии кристаллов [Электронный ресурс]: учебное пособие. — СПб.: Университет ИТМО, 2009. — 45 с. — Режим доступа: <http://www.iprbookshop.ru/67480.html>

2. Строение вещества. Строение кристаллов [Электронный ресурс]: учебное пособие / А.М. Голубев [и др.]. — М.: Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана, 2010. — 36 с. — Режим доступа: <http://www.iprbookshop.ru/31270.html>

3. Куприянов М.Ф., Рудская А.Г., Кофанова Н.Б., Кабиров Ю.В., Разумная А.Г. Современные методы структурного анализа веществ. ЮФУ. 2009. 288 с. – Электронный ресурс. - Режим доступа: <http://www.iprbookshop.ru/47135.html>

4. Новоселов, К.Л. Основы геометрической кристаллографии / К.Л. Новоселов; – Томск: Издательство Томского политехнического университета, 2015. – 73 с.: ил., табл., схем. – Режим доступа: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=442772>

5. Ремпель, А.А. Нестехиометрия в твердом теле / А.А. Ремпель, А.И. Гусев. – Москва: Физматлит, 2018. – 638 с.: ил. – Режим доступа: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=485335>

Современные профессиональные базы данных и информационные справочные системы

- ЭБС «ZNANIUM.COM» [www.znanium.com](http://www.znanium.com);
- ЭБС «Университетская библиотека онлайн» <https://biblioclub.ru/>;
- ЭБС «Лань» <http://e.lanbook.com>

Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины

- Электронная образовательная среда ТвГУ <http://lms.tversu.ru>
- Научная библиотека ТвГУ <http://library.tversu.ru>
- Сайт о химии <http://www.xumuk.ru/>
- Сайт химического факультета МГУ <http://www.chem.msu.ru/rus/teaching/phys.html>

Методические материалы для обучающихся по освоению дисциплины

#### 1. Задания и контроль самостоятельной работы

Перед каждым практическим занятием необходима самостоятельная работа по подготовке к его выполнению по индивидуальным темам. Для этого обучающемуся предлагаются темы для самостоятельной проработки. Данные, которые будут получены в результате выполнения тем, будут использованы в практических работах. Все практические работы, не выполненные в аудиторные часы занятий, так же остаются в качестве домашнего задания. Срок выполнения – две недели, после чего максимальное количество баллов за соответствующее задание снижается в два раза.

#### 2. Методические указания по подготовке к практическим занятиям

Данный курс относится к обязательным дисциплинам и является важным для студентов, специализирующихся на всех кафедрах химико-технологического факультета. Специфика курса заключается в том, что все темы связаны между собой. Поэтому изучение каждой последующей нельзя начинать, не изучив предыдущую тему. Таким образом, изучать материал необходимо систематически и особо останавливаться на контроле знаний студентов.

В связи со значительным сокращением объема аудиторной нагрузки самостоятельная работа при изучении данного курса играет решающую роль. Вследствие этого в качестве усвоения пройденного материала студентам, задается домашнее задание, предлагаются контрольные работы в каждом модуле и на каждом новом занятии проводится экспресс-опрос. На занятиях также большое внимание уделяется написанию студентами тезисов докладов с целью проверки умения самостоятельно прорабатывать научную литературу и докладывать ее коллегам.

Тематическое наполнение дисциплины (для дополнительного самостоятельного изучения)

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Предмет и задачи кристаллохимии. Кристаллическая структура и способы ее моделирования. Тепловое движение атомов. Электронная плотность (топологический анализ). Базы структурных данных.

Стереохимический и кристаллоструктурный аспекты кристаллохимии. Использование рентгеноструктурных и кристаллохимических данных в химии, молекулярной биологии. Обобщенная кристаллохимия.

## 2. ОСНОВЫ РЕНТГЕНОСТРУКТУРНОГО АНАЛИЗА

Дифракция рентгеновских лучей. Уравнение Лауэ. Методы получения дифракционной картины. Автоматические дифрактометры. Уравнение Брэгга-Вульфа. Индексы узловых сеток. Межплоскостные расстояния. Интенсивность дифракционного луча. Структурная амплитуда. Формула электронной плотности.

Сравнение дифракционных методов изучения кристаллической структуры (рентгенография, нейтронография, электронография).

## 3. ГРУППЫ СИММЕТРИИ И СТРУКТУРНЫЕ КЛАССЫ

Симметричные операции и элементы симметрии. Поворотные и инверсионные оси. Международная номенклатура (символы Германа - Могена) и симметричные обозначения Шенфлиса. Точечные группы. Обычные и стереографические проекции. Симметрия молекул. Структурные классы и симметричные свойства молекул. Полярность и хиральность молекул. Энантиомеры. Многогранники. Изоэдры и их комбинации. Изогоны.

Трансляция. Параллелепипеды повторяемости. Кристаллическая решетка и ее симметрия. Элементарная ячейка. Кристаллографические точечные группы (кристаллические классы).

Зависимость физических свойств кристаллов от их симметрии. Свойства как тензоры 2-го ранга (электропроводность, диэлектрическая проницаемость, тепловое расширение и др. Пиро- и пьезоэлектрические свойства).

Винтовые оси. Плоскости скользящего отражения. Решетки Бравэ.

Пространственные группы симметрии (принцип их вывода). Структурные классы атомных и молекулярных кристаллов.

## 4. ОБЩАЯ КРИСТАЛЛОХИМИЯ

Типы химических связей в кристаллах. Гомо- и гетеродесмические структуры. Координационные, островные, цепочечные, слоистые, каркасные структуры. Координационное число (КЧ) и координационный многогранник (КМ) или полиэдр. Собственная симметрия КМ. Структурные типы.

Описание структур в терминах плотнейших шаровых упаковок (ПШУ) и плотнейших шаровых кладок (ПШК).

Термодинамика кристаллов. Расчет термодинамических функций.

Кристаллохимические радиусы атомов. Металлические и ионные радиусы. Ковалентные и ван-дер-ваальсовы радиусы.

Кристаллохимические явления. Изоструктурность. Изоморфизм. Полиморфизм., политипия. Морфотропия.

## 5. СИСТЕМАТИЧЕСКАЯ КРИСТАЛЛОХИМИЯ

Простые вещества. Типичные и аномальные структуры металлов. Особенности координации переходных и непереходных металлов. Кристаллические структуры неметаллов. Бинарные и тернарные соединения.

Структурные типы перовскита и шпинели.

Строение силикатов. Классификация структур силикатов.

Кристаллические структуры координационных соединений. Структуры соединений с полидентатными лигандами (комплексонаты, комплексы краун-эфиров).

Общая характеристика молекулярных кристаллов. Особенности органических кристаллов. Специфические межмолекулярные контакты. Водородная связь.

Гетеромолекулярные кристаллы. Кристаллогидраты. Клатраты. Молекулярные комплексы.

Межмолекулярное взаимодействие (МВ) в атом-атомном представлении (расчет энергии МВ для органических кристаллов).

## 6. ОБОБЩЕННАЯ КРИСТАЛЛОХИМИЯ

Конденсированные фазы с разной степенью упорядоченности. Дальний и ближний порядок. Кристаллы и квазикристаллы. Мезофазы.

Строение жидких кристаллов. Нематики, холестерики, смектики.

Жидкокристаллические полимеры.