

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ
ИНСТИТУТ ХИМИИ ДАЛЬНЕВОСТОЧНОГО ОТДЕЛЕНИЯ
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК
(ИХ ДВО РАН)

УТВЕРЖДАЮ
Директор ИХ ДВО РАН

_____ академик РАН В.И. Сергиенко
« ___ » _____ 2015 г.

ПРОГРАММА КУРСА

ОСНОВЫ КРИСТАЛЛОХИМИИ

Для аспирантов, проходящих обучение по направлению подготовки

04.06.01 - Химические науки

Направленность (профиль) подготовки 02.00.04 физическая

Квалификация (степень) выпускника: **Исследователь. Преподаватель-исследователь**

Форма обучения **очная**

Владивосток 2015 г.

1. Цели и задачи курса

Дисциплина «Основы кристаллохимии» предназначена для обучения аспирантов основам кристаллохимии и структурной химии для получения современных знаний об атомарном строении кристаллов, являющихся фундаментом для интерпретации экспериментального и теоретического материала в области кристаллохимии, рентгеноструктурного анализа, физики и химии твердого тела. Освоение данной дисциплины дает представление о связи кристаллической структуры и функциональных свойств неорганических материалов для осуществления прогнозирования и создания перспективных материалов для новой техники.

2. Требования к уровню усвоения содержания курса

Аспиранты, завершившие изучение данной дисциплины, должны:

- **иметь представление:** о месте кристаллохимии в системе химических и физических наук и о роли кристаллохимических факторов в создании условий для возникновения перспективных функциональных свойств материалов;
- **знать:** основные кристаллохимические понятия и законы, определяющие кристаллическую структуру соединений, элементы и операции симметрии кристаллов, структурную систематику неорганических кристаллов и основные классы современных неорганических функциональных материалов;
- **уметь:**(1) самостоятельно описывать кристаллические структуры соединений на основе экспериментальных данных рентгеноструктурного анализа, включаемых в cif-файл (состав соединения, параметры элементарной ячейки, пространственная группа симметрии и координаты атомов);
(2) оценивать перспективность неорганических соединений для выявления функциональных свойств по их кристаллической структуре;
(3) пользоваться программами для расчета геометрических характеристик (межатомных расстояний и углов) и для создания рисунков кристаллических структур;
(4) уметь работать с базой данных неорганических кристаллических структур ICSD;

3. Объем дисциплины и виды учебной работы

Изучение дисциплины «Основы кристаллохимии» аспирантами построено на базе лекций и практических занятий (семинаров).

Курс лекций включает в себя шесть разделов:

1. Предмет и задачи кристаллохимии
2. Структурная кристаллография: симметрия кристаллов
3. Общая кристаллохимия: основные стереохимические характеристики структуры; факторы, определяющие структуру кристаллов
4. Основные категории кристаллохимии: изоморфизм, морфотропия, полиморфизм.
5. Описательная кристаллохимия
6. Особенности кристаллических структур материалов для технологии будущего. Роль кристаллохимических факторов в создании условий для возникновения специфических свойств материалов.

Практические занятия посвящены трем темам:

1. Обучение работе с таблицами пространственных групп симметрии и геометрическими программами, входящими в комплекс SHELX, для расчета межатомных расстояний и углов, и рисования кристаллических структур.
2. Обучение работе с базой данных неорганических кристаллических структур ICSD.
3. Обучение написанию статей в журналы типа Acta Crystallographica Section C и E на основе экспериментальных данных рентгеноструктурного анализа о кристаллической структуре, включаемых в cif-файл (состав соединения, параметры элементарной ячейки, пространственная группа симметрии и координаты атомов).

Содержание курса аналогично курсу, читаемому в МГУ, НГУ и ведущих зарубежных университетах.

4. Система контроля знаний студента

Для контроля усвоения дисциплины учебным планом предусмотрен итоговый зачет и курсовая работа, написанная в виде статьи в журнал Acta Crystallographica Section C или E с использованием экспериментальных данных рентгеноструктурного анализа, включаемых в cif файл кристаллической структуры (состав соединения, параметры элементарной ячейки, пространственная группа симметрии и координаты атомов).

5. Содержание дисциплины

5.1. Новизна курса. Помимо фундаментальных представлений кристаллохимии в курс включена информация об особенностях кристаллических структур перспективных материалов для технологии будущего: высокотемпературных сверхпроводников, магнетиков (мультиферроиков, хиральных магнитных солитонов, низкоразмерных магнетиков), сегнетоэлектриков, метаматериалов и фотонных кристаллов, ионных проводников, топологических изоляторов и др. Рассматривается роль кристаллохимических факторов в создании условий для возникновения специфических свойств этих материалов.

5.2. Тематический план курса (распределение часов)

N	Наименование разделов	Количество часов			Всего
		Лекции	Практика	Сам. работа	
1	Предмет и задачи кристаллохимии	2			2
2	Структурная кристаллография.	4	2	4	10
3	Общая кристаллохимия	4	2	4	10
4	Основные категории кристаллохимии	2			2
5	Описательная кристаллохимия	2		2	4
6	Кристаллические структуры перспективных материалов для технологии будущего	4	6	4	14
7	Обучение работе с таблицами пространственных групп симметрии и геометриче-		2	4	6

	скими программами, входящими в комплекс SHELX, для расчета межатомных расстояний и углов, и рисования кристаллических структур.				
8	Обучение работе с базой данных неорганических кристаллических структур ICSD.		4	8	12
9	Обучение написанию статей в журналы типа Acta Crystallographica Section C и E на основе экспериментальных данных рентгеноструктурного анализа о кристаллической структуре, включаемых в cif-файл (состав соединения, параметры элементарной ячейки, пространственная группа симметрии и координаты атомов).		2	10	12
	Итого по курсу	18	18	36	72

Содержание курса аналогично курсу, читаемому в МГУ, НГУ и ведущих зарубежных университетах.

5.3. Содержание разделов

Предмет и задачи кристаллохимии

Исторический экскурс: основные вехи развития структурных представлений в XIX веке; выдающиеся ученые в области структурной кристаллографии и кристаллохимии. Предмет и задачи кристаллохимии. Взаимоотношение кристаллохимии и смежных наук.

Структурная кристаллография

Кристалл и кристаллическая решетка. Симметрия, операции и элементы симметрии. Точечные группы симметрии, их обозначение, классификация и изображение. Пространственные группы симметрии: трехмерная решетка, сингонии, группы Браве; число и номенклатура пространственных групп. Правильные системы точек пространственных групп.

Общая кристаллохимия

Основные структурные параметры. Основные стереохимические характеристики структуры. Координационные числа и координационные многогранники. Тепловое движение атомов. Упорядоченные и разупорядоченные структуры. Собственная симметрия группы атомов в кристалле. Структурный тип, изоструктурность (изотипность), антиизоструктурность, гомеотипия, гетеротипия. Типы химической связи в кристаллах. Электроотрицательность. Кристаллохимические радиусы. Поляризация атомов и ионов. Энергия сцепления кристалла (потенциальная энергия ионной решетки, константа Моделунга). «Десятичная» классификация структур. Структурные мотивы. Структурообразующие факторы (стехиометрический фактор,

фактор химической связи, размерный фактор). Критерии устойчивости ионных структур (правила Полинга, сумма валентных усилий). Принцип максимальной равномерности и принцип плотной упаковки. Плотнейшие и плотные упаковки шаров. Плотнупакованные структуры.

Основные категории кристаллохимии

Изоморфизм (твердые растворы замещения, эмпирические правила изоморфизма, изоваэнтный и гетероваэнтный изоморфизм, влияние температуры и давления на изоморфизм). Нестехиометрические соединения (дальтони́ды и бертолли́ды). Аномальный изоморфизм. Фрагментарные структуры. Эпитаксия. Морфотропия. Полиморфизм (структурная классификация полиморфных переходов, сверхструктуры, тенденции изменения структур при полиморфных переходах). Политипизм.

Описательная кристаллохимия

Структуры простых веществ (металлов, неметаллов), структуры неорганических соединений (оксидов, силикатов, сульфидов). Структуры молекулярных соединений (упаковка молекул в кристалле, правила Китайгородского, разупорядочение в молекулярных структурах). Жидкие кристаллы. Кристаллы с водородными связями. Молекулярные комплексы и соединения включения (сольваты, аддукты, молекулы-контейнеры). Супрамолекулярная химия. Пористые керамические и гибридные материалы (оксид кремния SiO_2 и его модификации, кристаллические силикаты, алюмосиликаты (цеолиты). мезопористые цеолиты, пористые координационные полимеры, структурные особенности, классификация и характеристика пористых материалов.

Кристаллические структуры перспективных материалов для технологии будущего

Кристаллические структуры высокотемпературных сверхпроводников, магнетиков (мультиферроиков, хиральных магнитных солитонов, низкоразмерных магнетиков), сегнетоэлектриков, метаматериалов и фотонных кристаллов, ионных проводников, топологических изоляторов и др. Роль кристаллохимических факторов в создании условий для возникновения специфических свойств этих материалов.

Основная литература

1. International Tables for Crystallography. Vol. A: Space-group Symmetry / Ed. Th. Hahn. Dordrecht (Holland): D. Reidel Publishing Company, 1983.
2. Солодовников С.Ф. Основы кристаллохимии (учебное пособие). Новосибирск: изд-во НГУ, 2012.
3. Солодовников С.Ф. Основные термины и понятия структурной кристаллографии и кристаллохимии. Словарь-пособие. Новосибирск: ИНХ СО РАН, 2005.
4. Бокий Г.Б. Кристаллохимия. М., Наука, 1971. (3-е издание)
5. Кребс Г. Основы кристаллохимии неорганических соединений, М., Мир, 1971
6. Вест А. Химия твердого тела. Теория и приложения: М.: Мир, 1988; т.1, гл. 6-9.
7. Белов Н. В. Структура ионных кристаллов и металлических фаз. М.: Изд-во АН СССР, 1947

Дополнительная литература

8. Современная кристаллография, в 4-х т./ Под ред. Б. К. Вайнштейна. М., Наука, 1979.
9. Урусов В.С., Еремин Н.Н. «Кристаллохимия. Краткий курс» М., Изд-во МГУ, 2010.
10. Чупрунов Е.В., Хохлов А.Ф., Фаддеев М.А. Кристаллография. М., Изд. физ.-мат. лит-ры, 2000.
11. Уэллс А. Структурная неорганическая химия, в 3-х т. М.: Мир, 1987.
12. Китайгородский А.И. Молекулярные кристаллы, М., Наука, 1971 г., гл. 1 и 2
13. Макаров Е.С. Изоморфизм атомов в кристаллах, М., Атомиздат, 1973.
14. Пирсон У. Кристаллохимия и физика металлов и сплавов, в 2-х т. М.: Мир, 1977.
15. Киперт Д. Неорганическая стереохимия. М.: Мир, 1985.

Программу разработала
с.н.с., к.х.н.

Л.М. Волкова