



Кристалохімія

Робоча програма навчальної дисципліни (Силабус)

Реквізити навчальної дисципліни

Рівень вищої освіти	<i>Перший (бакалаврський)</i>
Галузь знань	<i>16 Хімічна інженерія та біоінженерія</i>
Спеціальність	<i>161 Хімічні технології та інженерія</i>
Освітня програма	<i>Для освітньої програми "Хімічні технології неорганічних в'язучих речовин, кераміки, скла та полімерних і композиційних матеріалів"</i>
Статус дисципліни	<i>Вибіркова</i>
Форма навчання	<i>денна</i>
Рік підготовки, семестр	<i>3 курс, весняний семестр</i>
Обсяг дисципліни	<i>4 кредити</i>
Семестровий контроль/ контрольні заходи	<i>Залік усний</i>
Розклад занять	<i>Лекція 2 години один раз на тиждень (1 пара), практичні заняття 2 години один раз на два тижні (1 пара) за розкладом на roz.kpi.ua</i>
Мова викладання	<i>Українська</i>
Інформація про керівника курсу / викладачів	Лектор: <i>к.х.н., ст. викл. Пилипенко Ігор Володимирович, i.pylypenko@kpi.ua</i> Практичні заняття: <i>к.х.н., ст. викл. Пилипенко Ігор Володимирович, i.pylypenko@kpi.ua</i>
Розміщення курсу	Google Classroom (Google G Suite for Education, домен LLL.kpi.ua, платформа Sikorsky-distance); доступ за запрошенням викладача

Програма навчальної дисципліни

1. Опис навчальної дисципліни, її мета, предмет вивчення та результати навчання

Знання основ кристалохімії дає змогу ефективно пов'язати знання з загальної хімії та технології виробництва різних речовин та матеріалів, а також дозволяє моделювати та створювати матеріали із заданими хімічними та фізичними властивостями. Вміння застосовувати набуті знання та навички під час вивчення курсу кристалохімії є ключовим для бакалавра з хімічних технологій та інженерії і слугує додатковим підґрунтям для вивчення інших дисциплін та підготовки кваліфікаційних робіт.

Предмет дисципліни: *взаємозв'язок просторового розміщення структурних частинок (молекул, атомів, іонів) у кристалах та залежностей фізико-хімічних властивостей кристалічних речовин.*

Метою освітньої компоненти є формування у здобувачів загальних компетентностей:

- K01 Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу;*
- K02 Здатність застосовувати знання у практичних ситуаціях;*

Фахових компетентностей:

- **K13** Здатність використовувати положення і методи фундаментальних наук для вирішення професійних задач;
- **K14** Здатність використовувати методи спостереження, опису, ідентифікації, класифікації об'єктів хімічної технології та промислової продукції.

Після засвоєння навчальної дисципліни студенти мають продемонструвати такі результати навчання:

- **ПРО2.** Коректно використовувати у професійній діяльності термінологію та основні поняття хімії, хімічних технологій, процесів і обладнання виробництв хімічних речовин та матеріалів на їх основі.
- **ПРО4.** Здійснювати якісний та кількісний аналіз речовин неорганічного та органічного походження, використовуючи відповідні методи загальної та неорганічної, органічної, аналітичної, фізичної та колоїдної хімії.
- **ПРО6.** Розуміти основні властивості конструкційних матеріалів, принципи та обмеження їх застосування в хімічній інженерії.

2. Пререквізити та постреквізити дисципліни (місце в структурно-логічній схемі навчання за відповідною освітньою програмою)

Зазначається перелік дисциплін, знань та умінь, володіння якими необхідні студенту для успішного засвоєння дисципліни:

Загальна та неорганічна хімія	Властивості простих речовин (елементів) та неорганічних сполук різного складу. Типи хімічних зв'язків. Будова атома.
Фізика	Рентгенівське випромінювання. Будова атома. Явища дифракції, інтерференції. Поняття симетрії.

Дисципліни, які базуються на результатах навчання: дисципліни циклу професійної підготовки, в рамках яких передбачений аналіз результатів експериментальних досліджень, підбір сировинних компонентів, опис функціональних матеріалів та пояснення їх фізико-хімічних властивостей, які пов'язані з їх кристалічною структурою.

3. Зміст навчальної дисципліни

1 ЗАКОНИ ГЕОМЕТРИЧНОЇ КРИСТАЛОГРАФІЇ

- 1.1 Предмет кристалографії, поняття про кристал і кристалічну речовину.
- 1.2 Закон сталості двогранних кутів у кристалах. Симетрія кристалів.
- 1.3 Форми кристалічних багатогранників. Прості форми.
- 1.4 Закон цілих чисел і аналітичні методи опису кристалічних багатогранників.

2 ГЕОМЕТРИЧНА ТЕОРІЯ СТРУКТУРИ КРИСТАЛУ

- 2.1 Кристалічна ґратка.
- 2.2 Основні поняття про рентгеноструктурний аналіз.
- 2.3 Інтерпретація порошкових дифрактограм. Фазовий аналіз.

3 ОСНОВНІ ПОНЯТТЯ КРИСТАЛОХІМІЇ

- 3.1 Типи хімічних зв'язків у твердих тілах.
- 3.2 Визначення найпростіших структур за допомогою рентгенограм.
- 3.3 Фактори, що визначають структуру кристалів. Теорія щільних шарових упаковок.
- 3.4 Ізоморфізм і поліморфізм.

3.5 Класифікація структурних типів. Залежність фізико-хімічних властивостей твердих речовин від будови кристалів.

3.6 Будова реального кристалу.

4 КРИСТАЛОХІМІЯ ПРОСТИХ РЕЧОВИН І ХІМІЧНИХ СПЛУК ТА МІНЕРАЛОГІЯ

4.1 Кристалохімічні закономірності у періодичній системі елементів Д. І. Менделєєва.

4.2 Кристалохімія неорганічних сполук.

4.3 Поняття «мінерал», «гірська порода». Мінеральні види. Генезис мінералів.

4.4 Класи сульфідів, оксидів та солей.

4.5 Клас силікатів.

4. Навчальні матеріали та ресурси

Навчальні матеріали, зазначені нижче, доступні у бібліотеці університету та у бібліотеці кафедри хімічної технології кераміки та скла. Обов'язковою до вивчення є базова література, інші матеріали – факультативні. Розділи та теми, з якими студент має ознайомитись самостійно, викладач зазначає на лекційних та практичних заняттях.

Базова:

1. Кристалохімія. Закони геометричної кристалографії та геометрична теорія структури кристалу [Електронний ресурс] : навч. посіб. для студ. спеціальності 161 «Хімічні технології та інженерія» спеціалізації «Хімічні технології неорганічних керамічних матеріалів» / КПІ ім. Ігоря Сікорського ; уклад.: І. В. Пилипенко, Л. М. Спасьонова. – Електронні текстові данні (1 файл: 1,52 Мбайт). – Київ : КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2019. – 41 с.
2. Куровець М.І. Кристалохімія. Частина I. – Л.: Світ, 1996. – 235 с.
3. Куровець М.І. Кристалохімія Частина II. – Л.: Світ, 1996. – 214 с.

Додаткова

4. Лазаренко Є.К. Курс мінералогії. Л.: Університет, 1959. – 654 с.
5. Smart L. E., Moore E. A. Solid state chemistry: an introduction. – Boca Raton.: CRC press, 2012. – 483 p.

Інформаційні ресурси

6. Дистанційний курс Google G Suite for Education. Режим доступу: Google Classroom (Google G Suite for Education, домен LLL.kpi.ua, платформа Sikorsky-distance).

Навчальний контент

5. Методика опанування навчальної дисципліни (освітнього компонента)

Лекційні заняття

Вичитування лекцій з дисципліни проводиться паралельно з проведенням практичних занять та розглядом на них питань, що виносяться на самостійну роботу. На лекціях застосовуються засоби для відеоконференцій (Google Meet), а необхідні матеріали до лекцій та практичних занять розміщені у відповідному курсі Google Classroom. Після кожної лекції

рекомендується ознайомитись з матеріалами, рекомендованими для самостійного вивчення, а перед наступною лекцією – повторити матеріал попередньої.

№	Дата	Опис заняття
1	1-й тиждень	Тема 1.1. Предмет кристалографії, поняття про кристал і кристалічну речовину. Предмет кристалографії. Основні властивості кристалу. Кристал і кристалічна речовина. Поширеність кристалічної речовини. Кристалізація. виробництво монокристалів.
2	2-й тиждень	Тема 1.2. Закон сталості двограних кутів у кристалах. Симетрія кристалів. Перші роботи, присвячені вивченню зовнішньої форми кристалів. Методи вимірювання кутів кристалів. Методи обчислення кристалів. Відхилення від закону сталості кутів. Поняття про симетрії. Елементи симетрії. Додавання елементів симетрії. Види симетрії. Схема виведення 32 видів симетрії. Систематика видів симетрії.
3	3-й тиждень	Тема 1.3. Форми кристалічних багатогранників. Поняття простої форми. Прості форми нижчих сингоній. Прості форми середніх сингоній. Прості форми кубічної сингонії. Можливі межі. Двійники і закономірні зростки.
4	4-й тиждень	Тема 1.4. Закон цілих чисел і аналітичні методи опису кристалічних багатогранників. Відкриття закону цілих чисел в кристалографії. Кристалографічні символи. Математичне визначення символів межі. Установка кристалів.
5	5-й тиждень	Розділ 2. Геометрична теорія структури кристалу. Тема 2.1. Кристалічна ґратка. Поняття кристалічної ґратки. Кристалічний багатогранник і решітка кристалу. Трансляція. Плоскі сітки решітки. 14 решіток Браве. Поняття про кристалохімічний аналіз. Теорія структури кристалів Е. С. Федорова. Федорівські групи симетрії.
6	6-й тиждень	Тема 2.2. Основні поняття про рентгеноструктурний аналіз Кристал як дифракційна решітка. Перші визначення атомних структур кристалів за допомогою рентгенівських променів. Методика визначення параметрів і типу ґратки. Методика визначення просторових груп симетрії. Визначення положення атомів в кристалічній решітці. Гармонійний метод рентгеноструктурного аналізу.
7	7-й тиждень	Тема 2.3. Інтерпретація порошкових дифрактограм. Фазовий аналіз. Підготовка зразків і особливості проведення аналізу. Якісний РФА. Інтерпретація дифрактограм з використанням сучасного програмного забезпечення і баз даних. Напівкількісне визначення компонентів зразків. Визначення розміру кристалітів.
8	8-й тиждень	Розділ 3. Основні поняття кристалохімії. Тема 3.1. Типи хімічних зв'язків у твердих тілах Періодична система хімічних елементів і будова атомів. Іонний зв'язок. Елементарні уявлення про ковалентного зв'язку. Фізичні основи ковалентного зв'язку. Ковалентний зв'язок в молекулах і кристалах.

9	9-й тиждень	<p>Тема 3.2. Визначення найпростіших структур за допомогою рентгенограм.</p> <p>Три найпростіші кристалічні структури чистих металів. Число атомів, що припадають на одну клітинку структури. Структура кристала і структурний тип. Структура алмазу і графіту. Найпростіші структури сполук типу AX. Координаційне число і координаційний багатогранник. Найпростіші структури типу AX₂ і A₂X. Класифікація структур за координаційними числами.</p>
10	10-й тиждень	<p>Тема 3.3. Фактори, що визначають структуру кристалів. Теорія щільних шарових упаковок.</p> <p>Встановлення різних типів хімічного зв'язку. Ефективні радіуси іонів. Визначення іонних і атомних радіусів. Іонні радіуси хімічних елементів. Метод зображення кристалічних структур кулями різних розмірів. Геометричні межі стійкості структур з різними координаційними числами. Поляризація іонів. Залежність розмірів атомів і іонів від координаційних чисел. Структурний тип перовськіту. шаруваті структури. Вплив поляризації на структуру кристалів. Фактори, що визначають структуру кристалів (правило Гольдшмідта). Федорівські групи симетрії гексагональних кульових упаковок. Елементи симетрії дуже ретельних шарових упаковок.</p>
11	11-й тиждень	<p>Тема 3.4. Ізоморфізм і поліморфізм.</p> <p>Історія відкриття. Перші рентгеноструктурні дослідження ізоморфних речовин. Структурна класифікація типів поліморфізму. Умови, необхідні для прояву ізоморфізму. Межа ізоморфної замінності. Морфотропія і поліморфізм. Вплив ізотопного складу на кристалічну структуру. Ізовалентний і гетеровалентний ізоморфізм. Ізоморфізм з заповненням простору. Тверді розчини другого роду. Структура впровадження. Тверді розчини віднімання. дефектні структури. Структури з дробовою кількістю атомів в елементарній комірці. Внутрішні тверді розчини. Автоізоморфні речовини.</p>
12	12-й тиждень	<p>Тема 3.5. Класифікація структурних типів. Залежність фізико-хімічних властивостей твердих речовин від будови кристалів.</p> <p>Попередні зауваження про класифікацію структурних типів. Групи структурних типів з нейтральними і зарядженими структурними мотивами. Межі застосування прийнятої класифікації структурних типів. Метод зображення структурних типів формулами. Структурні хімічні формули. Залежність фізико-хімічних властивостей твердих речовин від типу хімічного зв'язку в кристалах. Електричні властивості.</p>
13	13-й тиждень	<p>Тема 3.6. Будова реального кристалу.</p> <p>Ідеальний і реальний кристал. Точкові дефекти в атомній структурі кристалу. Дислокації. Залежність фізико-хімічних властивостей кристалів від реальної структури.</p>

14	14-й тиждень	<p>Розділ 4. Кристалохімія простих речовин і хімічних сполук та мінералогія.</p> <p>Тема 4.1. Кристалохімічні закономірності у періодичній системі елементів Д. І. Менделєєва.</p> <p>Попередні зауваження. Кристалічні структури справжніх металів. Особливості структурних типів γ-Mn, Hg і Zn. Кристалічні структури елементів b-підгруп. Особливість елементів III-b і IV-b підгруп, що мають типові структури металів. Розподіл елементів по підгрупах періодичної системи на підставі кристалохімічних даних. Про класифікацію хімічних сполук. Класифікація подвійних (бінарних) і більш складних хімічних сполук.</p>
15	15-й тиждень	<p>Тема 4.2. Кристалохімія неорганічних сполук.</p> <p>Про класифікацію бінарних сполук. Потрійні і більш складні неорганічні сполуки. Структурна систематика класу сульфатів. Правила Полінга для структур іонних кристалів. Особливості структур з переважно ковалентним типом зв'язку. Кристалохімія силікатів. Кристалохімія боратів. Теорії будови стекел. Особливості утворення речовин в аморфному стані. Особливості рентгенофазового аналізу при вивченні аморфних тіл.</p>
16	16-й тиждень	<p>Тема 4.3. Поняття «мінерал», «гірська порода». Мінеральні види. Генезис мінералів.</p> <p>Мінеральний індивід, мінеральний вид. Будова Землі. Земна кора і її хімічний склад. Будова земної кори. Типи води в мінералах. Кристалохімічна класифікація мінеральних видів. Структурні мотиви кристалічних структур. Мінерали в колоїдному стані.</p>
17	17-й тиждень	<p>Тема 4.4. Класи сульфідів, оксидів та солей.</p> <p>Загальна характеристика. Острівні – пірит, марказит; координаційні – галеніт, сфалерит, халькопірит; ланцюгові – антимоніт, кіновар; шаруваті – молібденіт, аурипігмент.</p> <p>Загальна характеристика. Координаційні – корунд, гематит, ільменіт, шпінелі, ланцюжкові – рутил, каситерит, піролюзит; каркасні – кварц, халцедон; гідроксиди – гетит, діаспор, гідраргеліт.</p> <p>Карбонати: кальцит породоутворюючий мінерал вапняків, мармуру, крейди; доломіт, магнезит, група содових мінералів (сода і трона).</p> <p>Сульфати: гіпс ангідрит, барит. Значення у виробництві тугоплавких неметалевих матеріалів. Сульфати натрію (мірабіліт і тенардит).</p> <p>Галоїди: галіт, сільвін, флюорит, карналіт, кріоліт. Фосфати: апатит, фосфорит. Борати та нітрати.</p>
18	18-й тиждень	<p>Тема 4.5. Клас силікатів.</p> <p>Силікати - породоутворюючі мінерали гірських порід. Загальна характеристика (склад, структура, властивості, застосування у виробництві силікатних та тугоплавких матеріалів). Острівні силікати - олівіни, гранати, циркон. Кільцеві силікати берил. Ланцюжкові - авгіт, діопсид, волостоніт, родоніт. Шаруваті - група слюд, тальк, мінерали глини, група серпентину. Каркасні алюмосилікати - нефелін, польові шпати, цеоліти.</p>

Практичні заняття

Метою практичних занять є закріплення теоретичних знань, отриманих на лекціях та в процесі самостійної роботи з літературними джерелами в процесі вивчення навчальної дисципліни «Кристалохімія». Матеріал практичних занять спрямований на одержання досвіду набуття навичок опису кристалічних структур, вирішення задач кристалохімії, створення моделей кристалічних ґраток та розрахунку їх властивостей шляхом використання сучасного програмного забезпечення.

Тиждень	Тема	Опис запланованої роботи
1	Кристалізація. Виробництво монокристалів	Обговорення основ процесів виготовлення монокристалів та процесів кристалізації з розплавів та розчинів. Вирощування кристалів солей металів з розчинів.
3	Кристалічні багатогранники	Розгляд та обговорення простих форм нижчої, середньої та вищої сингоній. Ознайомлення з програмним забезпеченням VESTA для побудови та вивчення кристалічних структур.
5	Робота з моделями кристалічних ґраток	Додавання хімічних зв'язків, площин симетрії (hkl) та зміна розмірів і масштабу моделі за допомогою програмного забезпечення VESTA.
7	Рентгеноструктурний аналіз	Вирішення задач пов'язаних з розшифруванням дифрактограм речовин у кристалічному стані. Використання спеціалізованого програмного забезпечення та відкритих баз даних для ідентифікації у рентгенофазовому аналізі.
9	Ізоморфізм та поліморфізм	Ізовалентний і гетеровалентний ізоморфізм. Тверді розчини. Структури з дробовою кількістю атомів в елементарній комірці. Внутрішні тверді розчини.
11	Мінерали	Ознайомлення зі зразками мінералів (силікати, карбонати, борати, оксиди, сульфіді), обговорення їх основних відмінностей та характеристик, особливості їх ідентифікації.
13	Реальний кристал	Будова реального кристалу. Ідеальний і реальний кристал. Точкові дефекти в атомній структурі кристалу. Дислокації. Моделювання кристалів та дефектів за допомогою програмного забезпечення VESTA.
15	Моделювання форми кристалів	Моделювання форми кристалів за допомогою програмного забезпечення VESTA.
17	Написання модульної контрольної роботи	
18	Підсумкове заняття	До відома студентів доводиться кількість балів, яку вони набрали протягом семестру. Студенти, які були не допущені до семестрової атестації з кредитного модуля, мають усунути причини, що призвели до цього.

6. Самостійна робота студента

Самостійна робота студента (СРС) протягом семестру включає підготовку та написання ДКР, підготовку до модульної контрольної роботи (МКР), підготовку до заліку. Рекомендована кількість годин, яка відводиться на підготовку до зазначених видів робіт:

Вид СРС	Кількість годин на підготовку
Підготовка до ДКР (повторення матеріалу)	15 годин
Повторення лекційного матеріалу та опрацювання тем для самостійного опрацювання	18 годин
Підготовка до МКР (повторення матеріалу)	15 години
Підготовка до заліку	18 годин

Політика та контроль

7. Політика навчальної дисципліни (освітнього компонента)

У звичайному режимі роботи університету лекції та практичні заняття проводяться в навчальних аудиторіях. У дистанційному режимі всі заняття проводяться через платформу дистанційного навчання Сікорський. Відвідування лекцій та практичних занять є обов'язковим.

Правила призначення заохочувальних та штрафних балів:

1. За кожний тиждень запізнення з поданням ДКР на перевірку нараховується 1 штрафний бал (але не більше 5 балів).
2. За виконання завдань із удосконалення дидактичних матеріалів з дисципліни нараховується від 1 до 6 заохочувальних балів;

Політика дедлайнів та перескладань: визначається п. 8 Положення про поточний, календарний та семестровий контроль результатів навчання в КПІ ім. Ігоря Сікорського.

Політика щодо академічної доброчесності: визначається політикою академічної чесності та іншими положеннями Кодексу честі університету.

8. Види контролю та рейтингова система оцінювання результатів навчання (PCO)

Види контролю встановлюються відповідно до Положення про поточний, календарний та семестровий контроль результатів навчання в КПІ ім. Ігоря Сікорського:

1. Поточний контроль: МКР, ДКР.
2. Календарний контроль: проводиться двічі на семестр як моніторинг поточного стану виконання вимог силябусу.
3. Семестровий контроль: усний залік.

Рейтингова система оцінювання результатів навчання

1. Рейтинг студента з кредитного модуля складається з балів, що він отримує за:

- написання модульної контрольної роботи (МКР);
- написання домашньої контрольної роботи (ДКР);

2. Критерії нарахування балів.

2.1. Модульна контрольна робота оцінюється із 50 балів:

- «відмінно» – дається повна відповідь на запитання (не менше 90% потрібної інформації) – 50 балів;
- «добре» – достатньо повна відповідь (не менше 75% потрібної інформації) або повна відповідь з незначними неточностями – 40 балів;
- «задовільно» – неповна відповідь (не менше 60% потрібної інформації) та незначні помилки – 30 балів;

- «незадовільно» – відповідь не відповідає вимогам до «задовільно» – 0 балів.

2.2. ДКР оцінюється із 50 балів за такими критеріями:

- «відмінно» – дається повна відповідь на запитання (не менше 90% потрібної інформації) – 50 балів;
- «добре» – достатньо повна відповідь (не менше 75% потрібної інформації) або повна відповідь з незначними неточностями – 40 балів;
- «задовільно» – неповна відповідь (не менше 60% потрібної інформації) та незначні помилки – 30 балів;
- «незадовільно» – відповідь не відповідає вимогам до «задовільно» – 0 балів.

Наявність позитивної оцінки з ДКР є умовою допуску до залікової контрольної роботи.

2.3. Залікова контрольна робота оцінюється із 60 балів. Контрольне завдання цієї роботи складається із запитань з переліку, що наданий у додатку до робочої програми КМ.

Кожне запитання оцінюється у 2 бали, а залікова контрольна робота (60 балів) оцінюється за такими критеріями:

- «відмінно» – повна відповідь (не менше 90% потрібної інформації), надані відповідні обґрунтування – 60 - 55 балів;
- «добре» – достатньо повна відповідь (не менше 75% потрібної інформації), що виконана згідно з вимогами до рівня «умінь», або незначні неточності) – 54...40 балів;
- «задовільно» – неповна відповідь (не менше 60% потрібної інформації, що виконана згідно з вимогами до «стереотипного» рівня та деякі помилки) – 39...15 балів;
- «незадовільно» – незадовільна відповідь – 0 балів.

3. Умовою позитивної першої атестації є написання МКР на 30 балів або більше, другої атестації – написання ДКР на 30 балів або більше.

4. Сума рейтингових балів, отриманих студентом протягом семестру, за умови зарахування ДКР, переводиться до підсумкової оцінки згідно з таблицею (п.6). Якщо сума балів менша за 60, але ДКР зараховано, студент виконує залікову контрольну роботу. У цьому разі сума балів за виконання ДКР та залікову контрольну роботу переводиться до підсумкової оцінки згідно з таблицею п. 6.

5. Студент, який у семестрі отримав більше 60 балів, але бажає підвищити свій результат, може взяти участь у заліковій контрольній роботі. У цьому разі остаточний результат складається із балів, що отримані на заліковій контрольній роботі та балів з ДКР.

6. Таблиця переведення рейтингових балів до оцінок:

Бали	Оцінка
100...95	Відмінно
94...85	Дуже добре
84...75	Добре
74...65	Задовільно
64...60	Достатньо
Менше 60	Незадовільно
ДКР не зараховано	Не допущено

9. Додаткова інформація з дисципліни (освітнього компонента)

Перелік запитань до ДКР, МКР та заліку наведені у відповідному Google Classroom «Кристалохімія» (платформа Sikorsky-distance).

Робочу програму навчальної дисципліни (силабус):

Складено старшим викладачем кафедри хімічної технології кераміки та скла:

к.х.н. Пилипенком І.В.

Ухвалено кафедрою хімічної технології кераміки та скла (протокол № 15 від 29 червня 2022 р.)

Погоджено Методичною комісією факультету (протокол № 10 від 23 червня 2022 р.).