

АННОТАЦИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

«Кристаллохимия»

Дисциплина «Кристаллохимия» является частью программы бакалавриата «Химическая технология (общий профиль, СУОС)» по направлению «18.03.01 Химическая технология».

Цели и задачи дисциплины

Цель дисциплины Формирование комплекса знаний, умений и навыков по строению кристаллических веществ и установление взаимосвязи химического состава и физических свойств веществ с их кристаллической структурой, формирование естественнонаучного мировоззрения на основе закономерностей кристаллохимии. Задачи дисциплины -изучить строение кристаллических веществ и их физические свойства; - уметь проводить структурные и фазовые исследования кристаллических веществ в профессиональной деятельности; - владеть навыками проведения структурных и фазовых исследований кристаллических веществ..

Изучаемые объекты дисциплины

Объектами дисциплины являются - кристаллические вещества, их строение, свойства, идентификация, фазовый и структурный анализ; - реальные кристаллы с дефектами структуры; - методы исследования внутреннего строения кристаллов..

Объем и виды учебной работы

Вид учебной работы	Всего часов	Распределение по семестрам в часах
		Номер семестра
		5
1. Проведение учебных занятий (включая проведение текущего контроля успеваемости) в форме:	72	72
1.1. Контактная аудиторная работа, из них:		
- лекции (Л)	18	18
- лабораторные работы (ЛР)	34	34
- практические занятия, семинары и (или) другие виды занятий семинарского типа (ПЗ)	18	18
- контроль самостоятельной работы (КСР)	2	2
- контрольная работа		
1.2. Самостоятельная работа студентов (СРС)	72	72
2. Промежуточная аттестация		
Экзамен		
Дифференцированный зачет	9	9
Зачет		
Курсовой проект (КП)		
Курсовая работа (КР)		
Общая трудоемкость дисциплины	144	144

Краткое содержание дисциплины

Наименование разделов дисциплины с кратким содержанием	Объем аудиторных занятий по видам в часах			Объем внеаудиторных занятий по видам в часах
	Л	ЛР	ПЗ	СРС
5-й семестр				
Дефектность структуры реальных кристаллов.	6	0	8	24
<p>Классификация дефектов: точечные и протяженные дефекты. Классификация точечных дефектов: тепловые, примесные и дефекты нестехиометрии. Дефекты по Шоттки и Френкелю, антиструктурный дефект. Квазихимические реакции. Символика Крегера и Винка. Принципы составления кристаллохимических уравнений: принцип постоянства отношения количества разнородных узлов кристаллической решетки, принцип действующих масс, принцип электронейтральности кристалла с дефектами. Эффективный заряд дефекта.</p> <p>Термодинамика тепловых дефектов: образования вакансий, ионизации вакансий, дефекта зона–зона. Влияние температуры на равновесие тепловых дефектов в простых полупроводниках. Собственная электрическая проводимость простого полупроводника. Неизбежность возникновения дефектов нестехиометрии в бинарном кристалле. Термодинамика дефектов нестехиометрии. Влияние температуры и давления на равновесие дефектов нестехиометрии. Изотермы дефектов нестехиометрии. Примесные дефекты. Образование примесью твердых растворов внедрения и замещения. Ионизация примеси. Донорные и акцепторные примеси. Изотермы примесных дефектов в простом полупроводнике с одной посторонней примесью. Отображение реакций дефектов на зонной диаграмме кристалла.</p>				

Наименование разделов дисциплины с кратким содержанием	Объем аудиторных занятий по видам в часах			Объем внеаудиторных занятий по видам в часах
	Л	ЛР	ПЗ	СРС
Методы исследования строения кристаллов	4	18	0	24
<p>Дифракционные методы: рентгенография, электронография, нейтронография. Получение рентгеновского излучения. Электронная рентгеновская трубка. Сплошное и характеристическое излучение и их спектры. Длина волны монохроматического излучения и ее зависимость от материала анода. Дифракция рентгеновского излучения на кристаллах. Уравнение Брэгга–Вульфа. Межплоскостное расстояние. Дифракция на монокристаллах и поликристаллах.</p> <p>Порошковая рентгенография. Получение картины дифракции. Рентгеновская камера Дебая. Дебаеграмма. Определение брэгговского угла. Относительная интенсивность дифракционных полос. Дифрактограмма. Рентгенофазовый и рентгеноструктурный анализ. Определение межплоскостных расстояний, относительной интенсивности дифракционных полос, индцирование дифрактограмм поликристаллов с кубической решеткой, определение параметра решетки. Картотека дифрактограмм «Порошковая дифракционная картотека объединенного Комитета порошковых дифракционных стандартов» (PDFJCPDS).</p> <p>Спектроскопические методы: инфракрасная и рентгеновская спектроскопия. Взаимодействие инфракрасного излучения с веществом. Колебательный спектр. Пропускание. Волновое число (частота). Нормальные колебания: валентные, деформационные. Симметричные и антисимметричные колебания. Вырожденные колебания. Характеристическая частота. Качественный и количественный фазовый анализ с использованием инфракрасной спектроскопии.</p> <p>Элементы термического анализа. Термогравиметрия</p>				
Строение и свойства кристаллов.	8	16	10	24
Кристаллическое, аморфное и стеклообразное состояние вещества. Признаки кристаллического и аморфного состояния. Монокристалл и поликристалл.				

Наименование разделов дисциплины с кратким содержанием	Объем аудиторных занятий по видам в часах			Объем внеаудиторных занятий по видам в часах
	Л	ЛР	ПЗ	СРС
<p>Особенности стеклообразного состояния. Энергетика фазовых переходов аморфного вещества в кристаллическое состояние. Образование кристаллической решетки. Ребро, кристаллографическая плоскость. Элементарная ячейка. Кристаллографические оси координат. Параметры кристаллической решетки. Кристаллографические системы: сингонии. Типы решеток Браве: примитивные и сложные.</p> <p>Символы плоскостей и ребер. Индексы Миллера и Вейсса и их определение. Индицирование плоскостей. Связь между символами плоскостей и ребер кристалла.</p> <p>Геометрические характеристики структуры: координационное число, координационный полиэдр, число формульных единиц.</p> <p>Определение геометрических характеристик в разных типах кристаллических решеток и их связь с химическим составом кристалла.</p> <p>Типы химической связи в кристаллах.</p> <p>Классификация кристаллических структур на основе локализованных в них типов химической связи. Энергия кристаллической решетки в простых веществах и ее взаимосвязь с физическими свойствами кристаллов. Зонная теория кристаллических тел. Ширина запрещенной зоны. Электрические свойства кристаллов: проводники, полупроводники, диэлектрики.</p> <p>Орбитальные и эффективные (кристаллохимические) радиусы. Условия определения эффективных радиусов.</p> <p>Геометрические пределы устойчивости ионных структур. Правило Магнуса-Гольдшмидта.</p> <p>Плотность кристаллов и ее вычисление с учетом строения элементарной ячейки, эффективных радиусов, числа формульных единиц.</p>				
ИТОГО по 5-му семестру	18	34	18	72
ИТОГО по дисциплине	18	34	18	72