

КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА
ХІМІЧНИЙ ФАКУЛЬТЕТ
Кафедра аналітичної хімії

«ЗАТВЕРДЖУЮ»



Заступник декана з навчальної роботи

Наталія Усенко Наталія УСЕНКО

«30» 06 2022 року

**РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ
КРИСТАЛОХІМІЯ**
для здобувачів освіти

галузь знань
спеціальність
освітній рівень
освітня програма
вид дисципліни

10 Природничі науки
102 Хімія
Бакалавр
Хімія/Високі технології
загальна

Форма навчання	денна
Навчальний рік	2022/2023
Семестр	III
Кількість кредитів ECTS	4
Мова викладання, навчання та оцінювання	українська
Форма заключного контролю	іспит

Викладачі: Алексєєв Сергій Олександрович, доц, к.х.н., доцент.

Лелюшок Сергій Олександрович, к.х.н., доцент.

Пролонговано: на 20__/20__ н. р. _____ (_____) «__» _____ 20__ р.

на 20__/20__ н. р. _____ (_____) «__» _____ 20__ р.

КИЇВ – 2022

Розробник: Алексєєв Сергій Олександрович, к.х.н., доц., кафедра аналітичної хімії

ЗАТВЕРДЖЕНО

Завідувач кафедри аналітичної хімії

 Оксана ТАНАНАЙКО

Протокол № 12 від «22» червня 2022 р.

Схвалено науково-методичною комісією хімічного факультету

Протокол № 7 від «29» червня 2022 року № 7

Голова науково-методичної комісії  Олександр ПОЇК

« _____ » _____ 2022 року

ВСТУП

1. **Мета дисципліни** – дати студентам поняття про симетрію об'єктів скінченного (молекули та кристалічні багатогранники) та нескінченного (кристалічні ґратки) розміру, про кристалічну структуру речовини та застосування вищезгаданих понять для опису властивостей речовин.

2. **Попередні вимоги до опанування навчальної дисципліни:**

1. Знати теоретичні основи та володіти практичними навичками з хімії, фізики, алгебри та геометрії на рівні програми ЗОШ.
2. Знати основи курсів «Загальна хімія», «Неорганічна хімія», «Математика» та «Фізика».
3. Володіти базовими навичками роботи з комп'ютером.

3. **Анотація навчальної дисципліни.** В рамках курсу «Кристалохімія» вивчається явище симетрії та основні поняття, що використовуються для опису симетрії і кристалічної структури речовини, зокрема – точкові та просторові групи симетрії. Розглядається застосування вищезгаданих понять для опису та прогнозування властивостей молекул та кристалічних речовин. Приділяється увага впливу симетрії молекул на їх коливання та утворення молекулярних орбіталей, причинам структуроутворення кристалів та впливу структури кристалу на оптичні, електричні та механічні властивості.

4. **Завдання навчальної дисципліни:** розвиток теоретичних уявлень студентів про явище симетрії об'єктів скінченного та нескінченного розміру, та його вплив на властивості речовин. Формування у студентів практичних навичок визначення точкових та просторових груп симетрії та прогнозування пов'язаних із симетрією властивостей речовин.

Згідно з вимогами Стандарту вищої освіти України (перший (бакалаврський) рівень вищої освіти, галузь знань 10 «Природничі науки», спеціальність 102 – «Хімія») навчальна дисципліна спрямована на досягнення наступних загальних та спеціальних (фахових) компетентностей: ЗК1, ЗК10 та СК1, СК4.

5. Результати навчання за дисципліною.

<i>Результат навчання (1.Знати; 2. Уміти; 3. Комунікація; 4. Автономність та відповідальність)</i>	<i>Форми викладання і навчання</i>	<i>Методи оцінювання</i>	<i>Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни</i>
1.1. Знати, які математичні наближення та абстракції використовуються для опису симетричної будови об'єктів скінченного та нескінченного розміру	лекції, практичні, самостійна робота	Перевірка завдань СР, усні відповіді, КР	20

<i>Результат навчання (1.Знати; 2. Уміти; 3. Комунікація; 4. Автономність та відповідальність)</i>	<i>Форми викладання і навчання</i>	<i>Методи оцінювання</i>	<i>Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни</i>
1.2. Знати, як симетрія молекули визначає її властивості у коливальних спектрах та будову молекулярних орбіталей	лекції, практичні, самостійна робота	Перевірка завдань СР, усні відповіді, КР	5
1.3. Знати, які чинники зумовлюють утворення тої чи іншої кристалічної структури	лекції, практичні, самостійна робота	Перевірка завдань СР, усні відповіді, КР	10
1.4. Знати, як структура кристалу та дефекти в ній впливають на властивості речовини	лекції, практичні, самостійна робота	Перевірка завдань СР, усні відповіді, КР	10
1.5. Мати попереднє уявлення, які методи використовуються для визначення структури молекул та кристалів	лекції, практичні, самостійна робота	Перевірка завдань СР, усні відповіді	5
2.1. Визначати точкові групи симетрії моделей молекул та кристалічних багатогранників, правильні системи точок, будувати стереографічні проєкції	лекції, практичні, самостійна робота	Перевірка завдань СР, усні відповіді, КР	20
2.2. Встановлювати симетрію коливань та молекулярних орбіталей для найпростіших молекул	лекції, практичні, самостійна робота	Перевірка завдань СР, усні відповіді, КР	5
2.3. Визначати просторові групи симетрії моделей кристалічних структур та знаходити кристалографічні індекси	лекції, практичні, самостійна робота	Перевірка завдань СР, усні відповіді, КР	15
2.4. Знаходити взаємозв'язок «хімічний склад – структура – фізичні властивості» кристалічних сполук	лекції, практичні, самостійна робота	Перевірка завдань СР, усні відповіді, КР	10

*СР – самостійна робота, КР – контрольна робота

6. Співвідношення результатів навчання дисципліни із програмними результатами навчання:

Результати навчання дисципліни	1.1	1.2	1.3	1.4	1.5	2.1	2.2	2.3	2.4
Програмні результати навчання									
P02. Розуміти основи математики на рівні, достатньому для досягнення інших результатів навчання, передбачених цим стандартом та освітньою програмою.	+	+				+		+	
P05. Розуміти зв'язок між будовою та властивостями речовин.		+	+	+			+		+
P06. Розуміти періодичний закон та періодичну систему елементів, описувати, пояснювати та передбачати властивості хімічних елементів та сполук на їх основі.			+	+					+
P07. Застосовувати основні принципи квантової механіки для опису будови атома, молекул та хімічного зв'язку.	+	+			+		+		
P16. Виконувати комп'ютерні обчислення, що мають відношення до хімічних проблем, використовуючи стандартне та спеціальне програмне забезпечення, навички аналізу та відображення результатів.		+			+	+	+	+	
P19. Використовувати свої знання, розуміння, компетенції та базові інженерно-технологічні навички на практиці для вирішення задач та проблем відомої природи.		+		+	+	+	+	+	+
P21. Здійснювати моніторинг та аналіз наукових джерел інформації та фахової літератури.			+	+	+				+

7. Схема формування оцінки

7.1 Форми оцінювання студентів

Семестрове оцінювання:

Максимальна/мінімальна кількість балів, які можуть бути отримані студентом: **60 балів /36 балів**, а саме:

1. Контрольна робота №1: РН 1.1(частково), РН 1.2, РН 2.1, РН 2.2 – 10/6 балів.
2. Контрольна робота №2: РН 1.1(частково), РН 1.3, РН 1.4, РН 2.3, РН 2.4 – 10/6 балів.
3. Оцінювання самостійної роботи: РН 1.1 - РН 1.5, РН 2.1 - РН 2.4 – 20/12 балів.
4. Усні відповіді (колоквіуми): РН 1.1 - РН 1.5, РН 2.1 - РН 2.4 – 20/12 балів.

Підсумкове оцінювання (у формі іспиту):

Максимальна/мінімальна кількість балів, які можуть бути отримані студентом: **40 балів /24 бали***.

Результати навчання, які будуть оцінюватись: РН 1.1 – РН 1.5, РН 2.1 - РН 2.4.

Форма проведення: письмова робота.

Види завдань: 1 відкрите питання (розгорнута письмова відповідь) – 10 балів і 3 задачі – по 10 балів кожна.

Студент допускається до іспиту, якщо протягом семестру він:

набрав не менше, ніж **36 балів**;

виконав і вчасно здав завдання самостійних робіт (по 2 роботи за змістовий модуль);

Склав усні колоквіуми (по 2 колоквіуми за змістовий модуль, складаються після виконання відповідних самостійних робіт);

успішно написав модульні контрольні роботи.

7.2. Організація оцінювання:

Терміни проведення оцінювання:

Модульна контрольна робота №1: після проходження тем 1-7;

Модульна контрольна робота №2: після проходження тем 8-13;

Оцінювання самостійних робіт та колоквіумів: впродовж семестру.

7.3. Шкала відповідності оцінок

Оцінка (за національною шкалою) / National grade	Рівень досягнень / Marks
Відмінно / Excellent	90-100
Добре / Good	75-89
Задовільно / Satisfactory	60-74
Незадовільно / Fail	0-59

**8. СТРУКТУРА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ
ТЕМАТИЧНИЙ ПЛАН ЛЕКЦІЙ І ЛАБОРАТОРНИХ ЗАНЯТЬ**

№ теми	Назва теми	Кількість годин		
		Лекції	Лабораторні заняття	С/Р
<i>Змістовий модуль 1. Симетрія об'єктів скінченного розміру</i>				
1	Вступ до кристалохімії, елементи та операції симетрії	2	2	4
2	Стереографічні проекції та теореми складання елементів симетрії	2	2	4
3	Точкові групи симетрії	2	2	5
4	Правильні системи точок та прості форми	2	2	4
5	Матриці симетричних перетворень	2	2	4
6	Симетрія коливань молекули	2	2	5
7	Симетрія молекулярних орбіталей	2	2	4
	<i>Модульна контрольна робота 1</i>		1	
	<i>Всього</i>	14	15	30
<i>Змістовий модуль 2. Симетрія об'єктів нескінченного розміру (кристалічних ґраток)</i>				
8	Основні властивості кристалічних речовин та відкриті елементи симетрії	2	2	4
9	Ґратки Браве та просторові групи симетрії	2	2	5
10	Правильні системи точок у кристалі та щільні упаковки	2	2	4
11	Кристалічні структури з різними типами хімічного зв'язку	2	2	4
12	Фізичні властивості кристалів	2	2	5
13	Дефекти в кристалах	2	2	4
14	Фізичні методи встановлення кристалічної структури	2	2	5
	<i>Модульна контрольна робота 2</i>		1	
	<i>Всього</i>	14	15	31
	ВСЬОГО	28	30	61

Загальний обсяг - **120 год.**

Лекції – **28 год.**

Практичні – **30 год.**

Консультація – **1 год.**

Самостійна робота студентів – **61 год.**

СПИСОК РЕКОМЕНДОВАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

Основна

1. Шевченко Л. Л. Кристалохімія. Підручник. – К.: Вища школа, 1993.
2. Шевченко Л. Л. Кристалохімія. Практикум. – К.: Вища школа, 1981.
3. Алексєєв С.О. Симетрія молекул та кристалічних ґраток. – К.: ВПЦ «Київський університет», 2020.

Додаткова

4. Ogden J. Introduction to the molecular symmetry. – Oxford Chemistry Primers, 2001.
5. Зиман З. З. Основи структурної кристалографії: Навчальний посібник для студентів вищих навчальних закладів. – Х.: ХНУ ім. В. Н. Каразіна, 2008. – 212 с.

Інтернет-ресурси

Таблиці характеристик точкових груп

<http://symmetry.jacobs-university.de/>

Просторові групи

<http://img.chem.ucl.ac.uk/sgp/large/sgp.htm>

Кембріджська база даних кристалічних структур

<https://www.ccdc.cam.ac.uk/solutions/csd-system/components/csd/>

ПО Diamond

<https://www.crystalimpact.com/diamond/download.htm>