

**КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ  
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА**

**Навчально-науковий Інститут високих технологій**

**Кафедра супрамолекулярної хімії**



**«ЗАТВЕРДЖУЮ»**

Заступник директора  
з науково-педагогічної роботи  
Галина ГРАБЧУК  
«24» травня 2022 року

**РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ**

**КРИСТАЛОХІМІЯ**

**для здобувачів вищої освіти**

|                  |                                    |
|------------------|------------------------------------|
| галузь знань     | <b>10 Природничі науки</b>         |
| спеціальність    | <b>102 Хімія</b>                   |
| освітній рівень  | <b>Бакалавр</b>                    |
| освітня програма | <b>«Високі технології (Хімія)»</b> |
| вид дисципліни   | <b>Обов'язкова</b>                 |

|  |                   |
|--|-------------------|
| Форма навчання                             | <b>денна</b>      |
| Навчальний рік                             | <b>2022/2023</b>  |
| Семестр                                    | <b>III</b>        |
| Кількість кредитів ECTS                    | <b>4</b>          |
| Мова викладання, навчання<br>та оцінювання | <b>українська</b> |
| Форма заключного контролю                  | <b>іспит</b>      |

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

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

Пролонговано: на 20\_\_/20\_\_ н. р. \_\_\_\_\_ (\_\_\_\_\_) «\_\_» \_\_\_\_\_ 20\_\_ р.

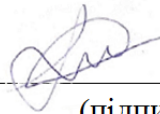
на 20\_\_/20\_\_ н. р. \_\_\_\_\_ (\_\_\_\_\_) «\_\_» \_\_\_\_\_ 20\_\_ р.

**КИЇВ – 2022**

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

**ЗАТВЕРДЖЕНО:**

Завідувач кафедри супрамолекулярної  
хімії

  
Сергій РЯБУХІН  
(підпис)

**Протокол № 5 від «11» травня 2022р.**

Схвалено науково - методичною комісією Інституту високих технологій

**Протокол № 4 від «13» травня 2022 року**

Голова науково-методичної комісії

  
(підпис)

Наталя РУСІНЧУК  
(прізвище та ініціали)

## 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 загальноосвітньої школи.
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 і його вплив на властивості речовин. Формування у студентів практичних навичок визначення точкових та просторових груп симетрії та прогнозування пов'язаних із симетрією властивостей речовин.

Програма реалізує наступні **завдання та навчальні цілі.**

**ЗК 1.** Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу.

**ЗК 2.** Здатність вчитися і оволодівати сучасними знаннями.

**ЗК 10.** Здатність до пошуку, оброблення та аналізу інформації з різних джерел.

**ЗК 11.** Здатність бути критичним і самокритичним.

**ЗК12.** Здатність реалізувати свої права і обов'язки як члена суспільства, усвідомлювати цінності громадянського (вільного демократичного) суспільства та необхідність його сталого розвитку, верховенства права, прав свобод людини і громадянина в Україні.

**ЗК 13.** Здатність зберігати та примножувати культурні, наукові цінності і досягнення суспільства на основі розуміння історії та закономірностей розвитку предметної області, її місця у загальній системі знань про природу і суспільство, техніки і технологій, використовувати різні види та форми рухової активності для активного відпочинку та ведення здорового способу життя.

**ФК 1.** Здатність застосовувати знання і розуміння математики та природничих наук для вирішення якісних та кількісних проблем в хімії.

**ФК 2.** Здатність розпізнавати і аналізувати проблеми, застосовувати обґрунтовані методи вирішення проблем, приймати обґрунтовані рішення в області хімії.

**ФК 12.** Розуміння ключових концепцій, принципів і теорій, що стосуються природничих наук та наук про життя і землю, для забезпечення можливості в подальшому глибоко розуміти спеціалізовані області хімії.

**ФК 13.** Здатність застосовувати нестандартні методи та рішення прикладних та наукових проблем в області хімії.

#### 5. Результати навчання за дисципліною.

| Результат навчання  | Форми викладання і навчання          | Методи оцінювання                        | Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни |
|---|--------------------------------------|--|--|
| 1.1. Знати математичні наближення та абстракції, які використовуються для опису симетричної будови об'єктів скінченного та нескінченного розміру. | Лекції, практичні, самостійна робота | Перевірка завдань СР, усні відповіді, КР | 20   |
| 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 проекції. | Лекції, практичні, самостійна робота | Перевірка завдань СР, усні відповіді, КР | 20   |
| 2.2. Установлювати 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 з 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 |     |     |     |     |     |     |     |     |
| ПРН 15. Спроможність використовувати набуті знання та вміння для розрахунків, відображення та моделювання хімічних систем та процесів, обробки експериментальних даних | +                             | +   |     |     |     | +   |     | +   |     |
| ПРН 18. Демонструвати знання та розуміння основних фактів, концепцій, принципів та теорій з хімії.   |                               | +   | +   | +   |     |     | +   |     | +   |
| ПРН 22. Обговорювати проблеми хімії та її прикладних застосувань з колегами та цільовою аудиторією державною та іноземною мовами.                                      |                               |     | +   | +   |     |     |     |     | +   |
| ПРН 23. Грамотно представляти результати своїх досліджень у письмовому вигляді державною та іноземною мовами з урахуванням мети спілкування.                           | +                             | +   |     |     | +   |     | +   |     |     |

## 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.

\*Для отримання загальної позитивної оцінки з дисципліни оцінка за екзамен не може бути меншою, ніж 24 бали.

**Студент допускається до іспиту, якщо впродовж 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 |
|--|--------------------------|
| <b>Відмінно</b> / Excellent                      | 90-100                   |
| <b>Добре</b> / Good                              | 75-89                    |
| <b>Задовільно</b> / Satisfactory                 | 60-74                    |
| <b>Незадовільно</b> / Fail                       | 0-59                     |

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

| № теми   | Назва теми  | Кількість годин |           |           |
|--|---|-----------------|-----------|-----------|
|  |   | лекції          | практичні | 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>Усього за модуль 1</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         | 4         |
|  | <i>Модульна контрольна робота 2</i>                                     |                 | 1         |           |
|  | <i>Усього за модуль 2</i>   | 14              | 15        | 30        |
|  | <b>УСЬОГО</b>   | <b>28</b>       | <b>30</b> | <b>60</b> |

Загальний обсяг - **120 год.**

Лекції – **28 год.**

Практичні – **30 год.**

Консультація – **1 год.**

Самостійна робота студентів – **60 год.**

## 9. ЛІТЕРАТУРА

### *Основна:*

1. Шевченко Л. Л. Кристалохімія. Підручник. – К.: Вища школа, 1993.
2. Шевченко Л. Л. Кристалохімія. Практикум. – К.: Вища школа, 1981.
3. Шаскольская М. П. Кристаллография. – М.: Высшая школа, 1976.
4. Алексеев С.О. Симетрія молекул та кристалічних ґраток. – К.: ВПЦ «Київський університет», 2020.

### *Додаткова:*

5. Ogden J. Introduction to the molecular symmetry. – Oxford Chemistry Primers, 2001.
6. Зиман З. З. Основи структурної кристаллографії: Навчальний посібник для студентів вищих навчальних закладів. – Х.: ХНУ ім. В. Н. Каразіна, 2008. – 212 с.
7. Харгиттай И., Харгиттай М. Симметрия глазами химика. – М.: Мир, 1989.
8. Ladd M., Symmetry of Crystals and Molecules. – Oxford University Press, 2014.

### *Интернет-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>