

Документ подписан электронной подписью
Информация о владельце:
ФИО: Смирнов Сергей Николаевич
Должность: врио ректора
Дата подписания: 23.05.2024 09:40:33
Уникальный программный ключ:
69e375c64f7e975d4e8830e7b4fcc2ad1bf35f08

**МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ**
ФГБОУ ВО «ТВЕРСКОЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

Утверждаю:

Руководитель ООП

Феофанова М.А.

24 апреля 2024 г.



Рабочая программа дисциплины

Симметрия молекул и кристаллов

- Закреплена за кафедрой: **Физической химии**
- Направление подготовки: **04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия**
- Направленность (профиль): **Экспертная и медицинская химия: теория и практика.**
- Квалификация: **Химик. Преподаватель химии**
- Форма обучения: **очная**
- Семестр: **9**

Программу составил(и):
канд. хим. наук, доц., Русакова Н.П.

Тверь, 2024

1. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ

Цели освоения дисциплины (модуля):

Содержание дисциплины «Симметрия молекул и кристаллов» определяется как учением о пространственном строении кристаллов и его влиянии на их свойства (физические, химические, механические), так и одной из самых важных концепций современного естествознания – концепцией симметрии. Симметричные представления широко проникают в настоящее время во все уголки химии.

Кристаллы являются самыми распространенными объектами, которые исследует физика твердого тела и кристаллохимия. Внутреннюю структуру кристалла можно установить, исходя из его свойств симметрии, которые определяют основные характерные свойства кристалла.

Теория элементарных частиц, кристаллография и кристаллофизика, теория пространства и времени, молекулярная биология, квантовая химия, многочисленные разделы математики испытали на себе благотворное влияние учения о симметрии.

Предмет дисциплины составляет прежде всего пространственное строение кристаллов и молекул и других химических частиц (молекулярных ионов, комплексов, кластеров) и его влияние на различные свойства веществ. Рассматриваются пути применения теории симметрии к конкретным вопросам химии, которые сводятся к изучению алгебраическими методами неалгебраических объектов, например, атомов, молекул, твердых тел и т.д.

Большое число твердых химических продуктов принадлежит к кристаллам. При этом химические законы проявляются в кристаллических телах зачастую иначе, чем в растворах, газах и расплавах. Поэтому кристаллы, их строение являются предметом традиционного внимания химиков.

Симметрия является важнейшим свойством кристаллов, как непрерывных сред, так и атомных структур. Симметрия кристаллов может служить основой для геометрической классификации и описания кристаллических атомных структур и кристаллических сред. Конкретный вид симметрии кристалла определяет спектр его физических свойств. Классификация кристаллов, анализ их свойств во многом базируется на различии типов симметрии.

Целями освоения дисциплины - познакомить студента с идеями и методами симметрии, составляющими теоретический фундамент современной химической науки.

Задачи:

Задачи дисциплины – раскрыть основные принципы симметрии, помочь студенту освоить ее понятийный аппарат и научить применять его для решения конкретных проблем химии

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ООП

Цикл (раздел) ОП: Б1.В

Требования к предварительной подготовке обучающегося:

Дополнительные главы квантовой химии

Избранные главы физической химии

Кристаллохимия

Физические методы исследования

Стереохимия

Строение вещества

Дисциплины (модули) и практики, для которых освоение данной дисциплины (модуля) необходимо как предшествующее:

Научно-исследовательская работа

Преддипломная практика

3. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ

Общая трудоемкость	6 ЗЕТ
Часов по учебному плану	216
в том числе:	
аудиторные занятия	39
самостоятельная работа	60
часов на контроль	27

4. ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОБУЧЕНИЯ ПО ДИСЦИПЛИНЕ, СООТНЕСЕННЫЕ С ПЛАНИРУЕМЫМИ РЕЗУЛЬТАТАМИ ОСВОЕНИЯ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ ПРОГРАММЫ

ПК-1.1: Планирует отдельные стадии исследования при наличии общего плана НИР

- Уровень 1 способы описания симметрии молекулы и кристалла группы симметрии, координационный многогранник
- Уровень 1 представить группу симметрии молекулы по Шенфлису или Могену выделить элементы симметрии в молекуле и показать возможные симметричные операции
- Уровень 1 методами описания симметрии понятиями стереохимической классификации структур; основными понятиями точечных и пространственных групп

ПК-1.2: Выбирает технические средства и методы испытаний (из набора имеющихся) для решения поставленных задач НИР

- Уровень 1 основные методы описания симметрии применительно к кристаллам; основные понятия при характеристике пространственной решетки (одномерный ряд, плоская сетка, трёхмерная сетка, операция трансляции, период идентичности); основные свойства кристаллов, вытекающие из решетчатого строения
- Уровень 1 описать символы узлов, рядов и плоскостей; изобразить примитивные элементарные ячейки, отвечающие различным кристаллографическим системам;
- Уровень 1 симметричными представлениями и преобразованиями элементов симметрии

ПК-1.3: Готовит объекты исследования

- Уровень 1 основные методы описания симметрии применительно к кристаллам; основные понятия при характеристике пространственной решетки (одномерный ряд, плоская сетка, трёхмерная сетка, операция трансляции, период идентичности); основные свойства кристаллов, вытекающие из решетчатого строения
- Уровень 1 изобразить трансляционные группы Бравэ; определить симметрию (в виде точечной группы) многогранников
- Уровень 1 определением типа координационного многогранника по координационному числу, описать возможных стереоизомеры полиэдра

ПК-2.1: Проводит первичный поиск информации по заданной тематике (в т.ч., с использованием патентных баз данных)

- Уровень 1 понятие химического строения и его топологический характер, основные виды структурной изомерии, понятия стереохимической конфигурации и конформации; понятие группы симметрии, элементов симметрии, способы их записи
- Уровень 1 определить симметрию (в виде точечной группы) любой молекулы и установить (на языке симметрии) ее хиральность;

описать возможные внутренние вращения вокруг простых (и более сложных) связей), построить примитивную и кристаллографическую ячейку

Уровень 1 поиск информации в глобальной сети Интернет и составлением поисковых запросов по электронным базам данных и в изданиях научного химического профиля, в том числе и на иностранных языках

ПК-2.2: Анализирует и обобщает результаты патентного поиска по тематике проекта в выбранной области химии (химической техно-логии)

Уровень 1 основы работы с персональным компьютером и интернет-браузерами, поисковыми системами
способы записи групп симметрии и названия молекул или кристаллов по ЮПАК

Уровень 1 составлять название кристалла или молекулы по ЮПАК
записать группу симметрии в классификации Могена и Шенфлиса
составить корректный поисковый запрос

Уровень 1 навыками работы с интернет-ресурсами,
методикой представления и преобразования элементов симметрии первого и второго рода

5. ВИДЫ КОНТРОЛЯ

Виды контроля в семестрах:	
экзамены	9

6. ЯЗЫК ПРЕПОДАВАНИЯ

Язык преподавания: русский.

7. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Код занят.	Наименование разделов и тем	Вид занятия	Семестр / Курс	Часов	Источники	Примечание
	Раздел 1. Пространственная решетка					
1.1	Пространственная решетка	Лек	9	1	Л1.1 Л1.2 Л1.3Л2.1 Л3.1 Л3.2	
1.2	Пространственная решетка	Лаб	9	2		
1.3	Пространственная решетка	Экзамен	9	1		
	Раздел 2. Кристаллографические системы					
2.1	Кристаллографические системы	Лек	9	1		
2.2	Кристаллографические системы	Лаб	9	2		
2.3	Кристаллографические системы	Экзамен	9	1		
	Раздел 3. Симметрия кристаллов и пространственных решеток					

3.1	Симметрия кристаллов и пространственных решеток	Лек	9	1		
3.2	Симметрия кристаллов и пространственных решеток	Лаб	9	2		
3.3	Симметрия кристаллов и пространственных решеток	Ср	9	6		
3.4	Симметрия кристаллов и пространственных решеток	Экзамен	9	3		
	Раздел 4. Стереохимическая классификация структур					
4.1	Стереохимическая классификация структур	Лек	9	1		
4.2	Стереохимическая классификация структур	Лаб	9	2		
4.3	Стереохимическая классификация структур	Ср	9	6		
4.4	Стереохимическая классификация структур	Экзамен	9	3		
	Раздел 5. Симметрия плоских сеток и многогранников					
5.1	Симметрия плоских сеток и многогранников	Лек	9	1		
5.2	Симметрия плоских сеток и многогранников	Лаб	9	2		
5.3	Симметрия плоских сеток и многогранников	Ср	9	6		
5.4	Симметрия плоских сеток и многогранников	Экзамен	9	3		
	Раздел 6. Симметрия тетраэдров. Симметрия параллелоэдров					
6.1	Симметрия тетраэдров. Симметрия параллелоэдров	Лек	9	1		
6.2	Симметрия тетраэдров. Симметрия параллелоэдров	Лаб	9	2		
6.3	Симметрия тетраэдров. Симметрия параллелоэдров	Ср	9	6		
6.4	Симметрия тетраэдров. Симметрия параллелоэдров	Экзамен	9	3		
	Раздел 7. Стереохимия и симметрия органических молекул. Антисимметрия, цветная симметрия					
7.1	Стереохимия и симметрия органических молекул. Антисимметрия, цветная симметрия	Лек	9	1		
7.2	Стереохимия и симметрия органических молекул. Антисимметрия, цветная симметрия	Лаб	9	3		

7.3	Сtereoхимия и симметрия органических молекул. Антисимметрия, цветная симметрия	Ср	9	6		
7.4	Сtereoхимия и симметрия органических молекул. Антисимметрия, цветная симметрия	Экзамен	9	3		
	Раздел 8. Точечная симметрия кристаллических систем. Некубические группы C_n , S_n , C_{nv} , C_{nh}					
8.1	Точечная симметрия кристаллических систем. Некубические группы C_n , S_n , C_{nv} , C_{nh}	Лек	9	1		
8.2	Точечная симметрия кристаллических систем. Некубические группы C_n , S_n , C_{nv} , C_{nh}	Лаб	9	2		
8.3	Точечная симметрия кристаллических систем. Некубические группы C_n , S_n , C_{nv} , C_{nh}	Ср	9	6		
8.4	Точечная симметрия кристаллических систем. Некубические группы C_n , S_n , C_{nv} , C_{nh}	Экзамен	9	2		
	Раздел 9. Кристаллографические точечная группы симметрии Некубические группы. D_n , D_{nh} , D_{nd} . Кубические группы T , T_d , Th , O , Oh					
9.1	Кристаллографические точечная группы симметрии Некубические группы. D_n , D_{nh} , D_{nd} . Кубические группы T , T_d , Th , O , Oh	Лек	9	2		
9.2	Кристаллографические точечная группы симметрии Некубические группы. D_n , D_{nh} , D_{nd} . Кубические группы T , T_d , Th , O , Oh	Лаб	9	3		
9.3	Кристаллографические точечная группы симметрии Некубические группы. D_n , D_{nh} , D_{nd} . Кубические группы T , T_d , Th , O , Oh	Ср	9	6		
9.4	Кристаллографические точечная группы симметрии Некубические группы. D_n , D_{nh} , D_{nd} . Кубические группы T , T_d , Th , O , Oh	Экзамен	9	2		

	Раздел 10. Икосаэдрические и центросимметрические точечные группы симметрии. I, I _h , K, K _h					
10.1	Икосаэдрические и центросимметрические точечные группы симметрии. I, I _h , K, K _h	Лек	9	1		
10.2	Икосаэдрические и центросимметрические точечные группы симметрии. I, I _h , K, K _h	Лаб	9	2		
10.3	Икосаэдрические и центросимметрические точечные группы симметрии. I, I _h , K, K _h	Ср	9	6		
10.4	Икосаэдрические и центросимметрические точечные группы симметрии. I, I _h , K, K _h	Экзамен	9	2		
	Раздел 11. Предельные группы симметрии (шруппы Кюри). Фуллерены, фуллериты. Фуллериды.					
11.1	Предельные группы симметрии (шруппы Кюри). Фуллерены, фуллериты. Фуллериды.	Лек	9	1		
11.2	Предельные группы симметрии (шруппы Кюри). Фуллерены, фуллериты. Фуллериды.	Лаб	9	2		
11.3	Предельные группы симметрии (шруппы Кюри). Фуллерены, фуллериты. Фуллериды.	Ср	9	6		
11.4	Предельные группы симметрии (шруппы Кюри). Фуллерены, фуллериты. Фуллериды.	Экзамен	9	2		
	Раздел 12. Квазикристаллы. Мозаики Пенроуза					
12.1	Квазикристаллы. Мозаики Пенроуза	Лек	9	1		
12.2	Квазикристаллы. Мозаики Пенроуза	Лаб	9	2		
12.3	Квазикристаллы. Мозаики Пенроуза	Ср	9	6		
12.4	Квазикристаллы. Мозаики Пенроуза	Экзамен	9	2		

Список образовательных технологий

1	Игровые технологии
2	Информационные (цифровые) технологии

3	Технологии развития дизайн-мышления
4	Активное слушание

8. ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ТЕКУЩЕЙ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

8.1. Оценочные материалы для проведения текущей аттестации

1. вид: выполнение лабораторных работ по темам-1-12 - Выполнение (в каждой работе по 5 заданий)

способ: традиционный (решение задач)

результаты: углубленная проработка темы

2. вид: выполнение самостоятельной работы

способ: на компьютере

результаты:

1. обзор темы своей научной работы, методики и объектов исследования, представленный в виде презентации

2. список патентов по заданной теме, осуществленный по базам данных, оформленный в соответствии с требованиями

3. вид: контрольная работа № 1

контрольная работа № 2

способ: традиционный

результаты: оформленные по заданию бумажные бланки с решениями

Тема 1. Пространственная решетка

Цель: освоить основные понятия: пространственная решётка, кристаллическая решётка, узел, узловой ряд, ребро, грань, символы, индексы.

Вопросы к теме:

1. В чем отличие пространственной и кристаллической решёток;
2. Одномерная, двухмерная, трехмерная пространственная решетка, особенности каждой из них;
3. Дайте определение узлу кристаллической решетки, узловому ряду, грани;
4. Индексы и символы узла кристаллической решетки, узлового ряда, грани

Пример заданий к теме:

1. Найти индексы узлового ряда, проходящего через два узла кристаллической решетки с символами 101 и 111.

2. Найти индексы узловой сетки, проходящей через три узла кристаллической решетки с символами 110, 101 и 011.

3. Каковы символы узлов, принадлежащих узловому ряду [110] и ближайших к узлу 100?

4. Найти индексы узлов решетки, лежащих в плоскости (110), которая проходит через начало координат

5. В кристаллической решетке с базисными векторами a , b и c задан вектор $R = xa + yb + zc$. При каких условиях прямая, параллельная этому вектору, задает направление узлового ряда?

Тема 2. Кристаллографические системы

Цель: Выявить отличие кристаллографических систем от традиционной декартовой системы координат и научиться их преобразовывать

Вопросы к теме:

1. Базовые элементы кристаллографических координатных систем;

2. Соответствие кристаллографических систем и декартовой системы координат;

3. Возможные типы кристаллографических систем и типы сингоний, которые обеспечивают данные системы;

4. Элементарные ячейки и трансляционные группы Браве, основанные на разных типах кристаллографических координатных систем

Пример заданий к теме:

1. Определить матрицу преобразования осей от гексагональной примитивной ячейки к ортогональной (ортогексагональной) наименьшего объема. Каков тип ячейки Браве в новой установке и каковы параметры новой ячейки по отношению к старой.

2. Найти примитивные элементарные ячейки для кубических гране- и объемноцентрированных ячеек, вычислить длины их ребер и углы между ними, определить объемы, установить, как преобразуются индексы плоскостей (100), (010), (001), (111) и аналогичные индексы узлов.

3. Для структуры моноклинного кристалла гипса $\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ указана объемноцентрированная ячейка (пр. гр. $I2/c$). Преобразовать эту ячейку в моноклинную базоцентрированную, записать новый символ группы и найти соответствующие преобразования осей и индексов Миллера. Дать два варианта решения.

4. Какие символы получают в кубическом кристалле плоскости (100), (111), (120), (123), если за координатные оси принять диагонали граней кубической ячейки?

5. Для арагонита установлена пр. гр. $Rmcm$. Получить матрицы преобразования к минералогической ($Pbnm$) и стандартной ($Pnma$) установке. Найти матрицы пересчета координат атомов для каждой установки

Тема 3. Симметрия кристаллов и пространственных решёток

Цель: Изучение плоскостей скользящего отражения, винтовых осей и 32 классов симметрии

Вопросы к теме:

1. Определение элементов симметрии и операций симметрии пространственных решеток;

2. Вывод плоскостей скользящего отражения и винтовых осей как элементов симметрии пространственных решеток;

3. Возможные пространственные группы симметрии;

4. Матричный метод описания операций симметрии;

5. 32 класса симметрии, основанные на операциях и элементах симметрии внешней формы кристалла.

Пример заданий к теме:

1. Какому преобразованию соответствуют последовательно выполненные операции отражения в плоскости xy и поворота вокруг оси $2x$?

2. Нарисовать стереографическую проекцию ТГС, приняв за порождающие операции симметрии отражения в двух взаимно перпендикулярных плоскостях симметрии и поворот вокруг оси C_2 , перпендикулярной к одной из плоскостей и лежащей в плоскости другой. Определить порядок группы, правильные системы точек, дать обозначение ТГС по Герману-Могену и Шенфлису

3. Определить элементы симметрии и точечную группу молекулы нитробензола (рис. 3) в зависимости от ее конформации.

4. Операцию какого рода (I или II) представляют матрицы симметрических преобразований: а) $010 / 100 / 001$; б) $010 / 100 / 001$, в) $100 / 001 / 010$; г) $100 / 001 / 010$?

5. Какие координаты получит точка xyz при повороте вокруг оси C_2 , проходящей через начало координат и совпадающей: а) с осью Z ; б) с осью X ; в) с осью Y ?

Тема 4. Стереохимическая классификация структур

Цель: Изучить основы стереохимической классификации

Вопросы к теме:

1. Типы структур химических элементов;
2. Существование основных и побочных валентностей в кристаллах ;
3. Энантиомерия и хиральность;
4. Координационное число и координационный полиэдр. Тела Платона

Пример заданий к теме:

1. Определить, как изменяется симметрия молекулы AX_n при постепенном замещении XY , если она имеет форму: а) тетраэдра; б) квадрата; в) тетрагональной пирамиды; г) тригональной бипирамиды; д) октаэдра.
2. В структуре $SrCl_2$ атомы стронция имеют правильную кубическую координацию. Определить пространственную группу, если $Z = 4$.
3. Молекулы в структуре $Co(NH_3)_3(NO_2)_2Cl$ (пр. гр. $I41/a$, $Z = 8$) имеют октаэдрическую конфигурацию. Определить симметрию комплекса и разместить лиганды по вершинам октаэдра.
4. Кристаллы триазида циануровой кислоты $[NC(N_3)]_3$ имеют пр. гр. $R\bar{6}3/m$, $Z = 2$. Доказать, что молекула плоская.
5. Упорядоченная низкотемпературная модификация нитрита натрия $NaNO_2$ имеет пр. гр. $Imm2$ ($Z = 2$). Определить число координатных параметров структуры.

Тема 5. Симметрия плоских сеток и многогранников

Цель: Изучить и уметь описывать точечные группы симметрии плоских сеток и многогранников

Вопросы к теме:

1. Определение и элементы трансляции и симметрии плоских сеток;
2. Определение и элементы трансляции и симметрии многогранников;
3. Точечные группы симметрии для описания плоских сеток на примере графена
4. Влияние точечной симметрии кристалла на геометрию кристаллической решетки

Пример заданий к теме:

1. Доказать, что в элементарной ячейке (которая построена на кратчайших трансляциях решетки) углы между ребрами лежат в пределах $60^\circ \leq \alpha, \beta, \gamma \leq 120^\circ$.
2. Найти элементы симметрии, порожденные действием перпендикулярной трансляции на следующие оси: 1) 3; 2) 3; 3) 4 $\bar{3}$; 4) 4; 5) 6; 6) 6 $\bar{3}$; 7) 6.
3. Найти элементы симметрии, которые возникают при действии наклонной трансляции на следующие оси: 1) 2; 2) 2 $\bar{1}$; 3) 4.
4. Найти элементы симметрии, которые возникают при действии наклонной трансляции на следующие плоскости симметрии: 1) m ; 2) b ; 3) n .
5. Определить, к каким сингониям относятся кристаллические структуры, имеющие следующие наборы старших элементов симметрии: 1) C_6 ; 2) S_4 ; 3) C_3 ; 4) $4C_3$; 5) 6 ; 6) $3C_2$; 7) C_4 ; 8) $3S_4$; 9) $3C_4$; 10) $3C_2 + 4C_3$; 11) 3; 12) $2 + C_2$; 13) 1; 14) C_1 .

Тема 6. Симметрия тетраэдров. Симметрия параллелоэдров

Цель: изучить симметрию тетраэдров, ромбододекаэдра, пентагонального додекаэдра и реальных кристаллов, в которых можно выделить такой элемент внутренней структуры

Вопросы к теме:

1. Элементы и точечные группы симметрии тетраэдров.
2. Реальные кристаллы, в пространственной структуре которых можно выделить тетраэдры;
3. Основные типы упаковок атомов в таких структурах;
4. Элементы и точечные группы симметрии ромбододекаэдра.
5. Элементы и точечные группы симметрии пентагонального додекаэдра.
6. Реальные кристаллы, в пространственной структуре которых можно выделить

ромбододекаэдр и пентагональный додекаэдр;

Пример заданий к теме:

1. Определить индексы в формуле соединения $A_mB_nX_r$, в координационной структуре которого атомы А и В тетраэдрически координированы атомами X, которые в свою очередь тетраэдрически окружены 2А и 2В.

2. В структуре кольцевого силиката берилла атомы Al окружены атомами О по октаэдру, атомы Be – по тетраэдру. Координационное число всех концевых атомов кислорода одноэтажного шестичленного кольца равно 3. Определить формулу берилла.

3. В структуре оксофторида меди и железа атомы О и F образуют КПУ, ионы Cu^{2+} занимают 1/2 октаэдрических пустот, а ионы Fe^{3+} – 1/8 тетраэдрических. Определить формулу соединения

4. Вычислить коэффициент плотности упаковки двух сортов шаров, большие из которых образуют КПУ, а меньшие занимают все: а) октаэдрические пустоты; б) тетраэдрические пустоты. Какие структурные типы представляют эти упаковки

5. Выделив ячейку Браве в КПУ и ГПУ, показать, сколько октаэдрических и тетраэдрических пустот приходится на один шар плотнейшей упаковки. Записать координаты центров шаров и пустот обоих типов, выбрав начало координат в центре шара

6. Элементы симметрии и координационные многогранники в перовските и кристаллах его типа.

7. Элементы симметрии и координационные многогранники в шпинели и кристаллах его типа.

8. Элементы симметрии и координационные многогранники в кристаллах типа силикатов.

9. Элементы симметрии и координационные многогранники в кристаллах аллотропных модификаций углерода.

10. Элементы симметрии и координационные многогранники в кристаллах аллотропных модификаций железа.

Тема 7. Стереохимия и симметрия органических молекул. Антисимметрия, цветная симметрия

Цель: Изучить основные типы органических кристаллов, их симметрию и стереохимию; применение черно-белой и цветной симметрии

Вопросы к теме:

1. Атомные, ионные радиусы Ван-дер-Ваальса в описании формы, симметрии и размера молекул;

2. Распределение органических кристаллов по структурным классам;

3. Топология молекулярных упаковок;

4. Упаковка по принципу «выступ к впадине»;

5. Хиральность упаковок, типы.

6. Черно-белые точечные группы симметрии;

7. Цветные точечные группы симметрии

8. Применение антисимметрии и цветной симметрии.

Пример заданий к теме:

1. Плотнейшая шаровая упаковка образована атомами X, атомы А и В занимают четверть тетраэдрических и половину октаэдрических пустот соответственно. Какова формула соединения?

а) A_2BX б) AB_2X в) ABX_2 г) A_2B_2X д) A_4B_2X .

2. Атомы кислорода образуют плотнейшую упаковку, в которой атомы кремния занимают восьмую часть тетраэдрических пустот, а атомы магния – половину октаэдрических. Определить формулу соединения.

а) $MgSiO_3$ б) Mg_2SiO_4 в) Mg_3SiO_5 г) $Mg_2Si_2O_6$ д) Mg_4SiO_6

3. Сколько различных плотнейших шаровых упаковок представлено ниже:

- 1) C(АВАВАС)А, 2) В(АВСАСВ)А, 3) С(АВАСВС)А,
 4) В(АВАВСВ)А, 5) А(СВАСВА)С?
 а) 1 б) 2 в) 3 г) 4 д) 5

4. Каких плотнейших шаровых упаковок существует только по одной?

- а) 3-слойная б) 4-слойная в) 5-слойная г) 6-слойная
 д) 7-слойная е) 8-слойная

5. Чему равно КЧ атома в плотнейшей шаровой упаковке?

- а) 6 б) 8 в) 10 г) 12 д) 14

6. Написать групповые множества одноцветной группы $4mm$;

7. Написать групповые множества черно-белой группы $4'mm'$;

8. Написать групповые множества серой группы $4mm1'$;

Тема 8. Точечная симметрия кристаллических систем. Некубические группы C_n , S_n , C_{nv} , C_{nh} .

Цель: Изучить некубические группы C_n , S_n , C_{nv} , C_{nh} , симметрии

Вопросы к теме:

1. Группа симметрии C_n ;
2. Группа симметрии S_n ;
3. Группа симметрии C_{nv} ;
4. Группа симметрии C_{nh}

Пример заданий к теме:

1. Написать матричную форму для группы C_n ;
2. Написать матричную форму для группы S_n ;
3. Написать матричную форму для группы C_{nv} ;
4. Написать матричную форму для группы C_{nh} ;

Тема 9. Кристаллографические точечные группы симметрии Некубические группы. D_n , D_{nh} , D_{nd} . Кубические группы T , T_d , T_h , O , O_h

Цель: Изучить некубические и кубические группы $D_n, D_{nh}, D_{nd}, T, T_d, T_h, O, O_h$ симметрии

Вопросы к теме:

1. Группа симметрии D_n ;
2. Группа симметрии D_{nh} ;
3. Группа симметрии D_{nd} .
4. Группа симметрии T ;
5. Группа симметрии T_d ;
6. Группа симметрии T_h ;
7. Группа симметрии O ;
8. Группа симметрии O_h ;

Пример заданий к теме:

1. Написать матричную форму для группы D_n ;
2. Написать матричную форму для группы D_{nh} ;
3. Написать матричную форму для группы D_{nd} .
4. Написать матричную форму для группы T ;
5. Написать матричную форму для группы T_d ;
6. Написать матричную форму для группы T_h ;
7. Написать матричную форму для группы O ;
8. Написать матричную форму для группы O_h ;

Тема 10. Икосаэдрические и центросимметрические точечные группы симметрии. I, Ih, K, Kh

Цель: Изучить икосаэдрические и центросимметрические точечные группы симметрии I, Ih, K, Kh

Вопросы к теме:

1. Группа симметрии I;
2. Группа симметрии Ih;
3. Группа симметрии K;
4. Группа симметрии Kh;
5. Группа симметрии бороводородов;
6. Группа симметрии карборанов;

Пример заданий к теме:

1. Написать матричную форму для группы I;
2. Написать матричную форму для группы Ih;
3. Написать матричную форму для группы K;
4. Написать матричную форму для группы Kh;
5. Типы симметричных преобразований в бороводородах;
6. Типы симметричных преобразований в карборанах;

Тема 11. Предельные группы симметрии (группы Кюри). Фуллерены, фуллериты, фуллериды.

Цель: Изучить предельные группы симметрии (группы Кюри), аллотропные модификации углерода и их кристаллическое строение, кристаллическое строение фуллеренов, фуллеритов, фуллеридов

Вопросы к теме:

1. Группы симметрии с осями бесконечного порядка;
2. Обозначение по Шенфлису и Генри-Могену групп симметрии с осями бесконечного порядка;
3. Суперпозиция групп симметрии
4. Принцип Кюри
5. Кристаллографическая структура алмаза;
6. Кристаллографическая структура графита;
7. Кристаллографическая структура графена;
8. Кристаллографическая структура фуллеренов.
9. Структура молекул C₆₀ и их кристаллическое строение;
10. Структура молекул C₇₀ и их кристаллическое строение;
11. Простейшие фуллериды и их структурные отличия от фуллеренов и фуллеритов

Пример заданий к теме:

1. Обозначение групп с циклической симметрией и выделение их инвариантов;
2. Выделение предельной группы и её инвариантов
3. Выделение конечных точечных групп и их надгруппы;
4. Анализ плоскостей скользящего отражения в алмазе;
5. Чему равны параметры кристаллической ячейки и каков характер трансляционных элементов в нанотрубке, образованной на основе кристаллической сетки графена
6. Чему равны параметры кристаллической ячейки и каков характер

трансляционных элементов в нанотрубке, образованной на основе кристаллической сетки графена с включением пятиугольных элементов 7 к 1.

7. К какому веществу относится кристалл, если параметры его кубической элементарной ячейки составляют:

- а) 3,57 Å; б) 5,43 Å; в) 5,68 Å, г) 6,49 Å
1) серое олово, 2) кремний, 3) алмаз, 4) германий

8. Рассчитать параметры кристаллической ячейки C60 если длина связи C-C составляет 1,44 Å, а Ван-дер-Ваальсов радиус всей молекулы 5,25 Å;

9. Предположив, что параметр кристаллической ячейки C60 $a=14,17$ Å, провести аппроксимацию молекул сферами и получить тип упаковки молекул C60.

10. Пользуясь принципом Кюри получить точечную группу симметрии элементарной ячейки кристалла фуллерита;

Тема 12. Квазикристаллы. Мозаики Пенроуза.

Цель: Изучить кристаллическое строение квазикристаллов

Вопросы к теме:

1. Особенности кристаллической структуры шехтманитов;
2. Квазикристаллы и их нетрансляционное упорядочение;
3. Методы моделирования квазикристаллов и их аппроксимантов.

Пример заданий к теме:

1. Типы и примеры квазикристаллов и их аппроксимантов
2. Как используется принцип золотого сечения в моделировании квазикристаллов и их аппроксимантов;
3. Как используются числа Фибоначчи в моделировании квазикристаллов и их аппроксимантов;
4. Применимость бесконечной мозаики Пенроуза в описании квазикристаллов.

8.2. Оценочные материалы для проведения промежуточной аттестации

Самостоятельная работа по соответствующей теме включает:

Тема 1. Пространственная решетка

1. Привязку к ней объекта своей научной деятельности, основным условием которого является наличие твердой фазы. Возможен выбор магистрантом другого объекта, обладающего монокристаллической структурой.
2. Определение типа кристаллической решетки и её свойств по имеющимся базам данных.
3. Обзор имеющихся научных работ, сходных по теме с научным исследованием обучающегося.

Тема 2. Кристаллографические системы

1. Привязку к ней объекта своей индивидуальной темы для самостоятельной работы.
2. Определение типа сингонии, элементарной ячейки и трансляционной группы Браве для объекта по имеющимся базам данных.
3. Отображение внутренней структуры выбранного объекта с привлечением программного продукта GAMESS, распространяемого без лицензии.

Тема 3. Симметрия кристаллов и пространственных решёток

1. Привязку объекта своей индивидуальной темы для самостоятельной работы и определенному классу симметрии.
2. Определение наличия в выбранном объекте винтовых осей, плоскостей скользящего отражения.
3. Привлечение GAMESS для расчета структуры выбранного объекта. Подбор

методов для расчета на основании информации, найденной в специализированной литературе. Анализ методов, выбор наиболее оптимального для своих целей.

Тема 4.Стереохимическая классификация структур

1. Привязку объекта своей индивидуальной темы для самостоятельной работы и выделить в нем основные и побочные валентности, типы координационных полиэдров.
2. На основании стереохимической классификации показать правильность их выделения .
3. Провести оценку возникающим в ходе расчета структуры выбранного объекта в GAMESS ошибкам.

Тема 5. Симметрия плоских сеток и многогранников

1. Провести проверку расчета структуры выбранного объекта в GAMESS другим методом.
2. Провести сравнительный анализ выбранного метода на основании полученных результатов и имеющихся данных.
3. Провести оценку возникающим в ходе расчета структуры выбранного объекта в GAMESS ошибкам.

Тема 6. Симметрия тетраэдров. Симметрия параллелоэдров.

1. Составить отчет по расчету структуры выбранного объекта в GAMESS двумя разными методами.
2. Показать в отчете основные характеристики объекта, полученные в результате расчета и дать им оценку.
- 3 Оформить отчет в виде презентации PowerPoint для последующего представления на модульном занятии.

Тема 7. Стереохимия и симметрия органических молекул. Антисимметрия, цветная симметрия.

1. Определение типа упаковки и цвета симметрии для объекта по имеющимся базам данных.
2. Отображение координационного числа и цвета симметрии для объекта по имеющимся базам данных.
3. Составление отчета по теме.

Тема 8. Точечная симметрия кристаллических систем. Некубические группы C_n , S_n , C_{nv} , C_{nh}

1. Определение наличия некубических групп симметрии C_n , S_n , C_{nv} , C_{nh} в объекте по имеющимся базам данных.
2. Отображение некубических групп симметрии C_n , S_n , C_{nv} , C_{nh} для объекта по имеющимся базам данных.
3. Составление отчета по теме.

Тема 9. Кристаллографические точечные группы симметрии Некубические группы. D_n , D_{nh} , D_{nd} . Кубические группы T , T_d , Th , O , O_h .

1. Определение наличия некубических групп симметрии D_n , D_{nh} , D_{nd} в объекте по имеющимся базам данных.
2. Определение наличия кубических групп симметрии T , T_d , Th , O , O_h в объекте по имеющимся базам данных.
3. Составление отчета по теме.

Тема 10. Икосаэдрические и центросимметрические точечные группы симметрии I , I_h , K , Kh

1. Определение наличия икосаэдрических и центросимметрических точечных

групп симметрии I, Ih, K, Kh в объекте по имеющимся базам данных.

2. Отображение икосаэдрических и центросимметрических точечных групп симметрии I, Ih, K, Kh для объекта по имеющимся базам данных.

3. Составление отчета по теме.

Тема 11. Предельные группы симметрии (группы Кюри). Фуллерены, фуллериты. Фуллериды.

1. Определение наличия групп Кюри в объекте по имеющимся базам данных.

2. Определить, исходя из традиционных параметров молекул C₆₀ и C₇₀ возможность использования их для транспортировки вашего объекта. Обосновать утверждение.

3. Составление отчета по теме.

Тема 12. Квазикристаллы. Мозаики Пенроуза.

1. Подготовка материала по самостоятельным работам для презентации.

Пример контрольной работы по темам 1-7 9 семестр:

План:

1. Проекция ячейки

2. Тип решетки (с обоснованием)

3. Число формульных единиц (Z)

4. Координационное число и координационный многогранник (для каждого сорта атомов)

5. Характер структуры и тип связей

6. Описание в терминах ПШУ, если оно возможно (ПШУ-плотная шаровая упаковка)

7. Структурный класс

Пример описания

NaCl

1. Проекция ячейки:

2. Тип решетки: кубическая гранецентрированная;

обоснование: наличие четырех пересекающихся осей 3

3. Число формульных единиц: $Z = 4 \text{ NaCl}$

4. Координационные числа и координационные многогранники:

Na – 6 (октаэдр)

Cl – 6 (октаэдр)

5. Характер структуры, тип связей: гомодесмическая (монокристаллическая) структура с ионными связями

6. Описание в терминах ПШУ:

ионы Cl⁻ образуют трехслойную ПШУ,

ионы Na⁺ занимают все октаэдрические пустоты

7. Структурный класс: $Fm\bar{3}m$, $Z = 4(m\bar{3}m; m\bar{3}m)$

Примерные вопросы для подготовки к экзамену по дисциплине

«Симметрия молекул и кристаллов»

1. Перечислите важнейшие (наиболее широко распространенные) структурные типы металлов. Кратко охарактеризуйте особенности этих структур.

2. Приведите примеры металлов, структура которых представляет собой двухслойную плотнейшую шаровую упаковку. Как расположены атомы в элементарных

ячейках этих металлов? Какова координация атомов?

3. Приведите примеры металлов, структура которых представляет собой трехслойную плотнейшую шаровую упаковку. Как расположены атомы в элементарных ячейках этих металлов? Какова координация атомов?

4. Приведите примеры металлов, структура которых представляет собой объемноцентрированную кубическую кладку. Как расположены атомы в элементарных ячейках этих металлов? Какова координация атомов?

5. Назовите несколько различных типов аномальных кристаллических структур металлов. Поясните эти примеры.

6. Приведите примеры и кратко опишите строение металлов, структуры которых представляют собой искаженные структурные типы меди и магния.

7. Приведите примеры и кратко охарактеризуйте структуры металлов, представляющие собой многослойные плотнейшие шаровые упаковки.

8. Опишите особенности кристаллических структур ртути и полония.

9. Чем определяется предпочтительное число ковалентных связей в кристаллических структурах неметаллов? Приведите примеры.

10. Какую структуру имеют отвердевшие инертные газы?

11. Опишите особенности высокотемпературных кристаллических модификаций фтора и кислорода.

12. Какое видоизменение кристаллической структуры наблюдается в ряду Cl_2 , Br_2 , I_2 ?

13. Перечислите важнейшие модификации серы. Кратко охарактеризуйте их структуру.

14. Каков характер кристаллических структур серого и красного селена? Кратко опишите основные особенности этих структур.

15. Какую координацию имеют атомы в кристаллах теллура, мышьяка и германия? Каковы координационные числа и координационные многогранники в этих структурах?

16. Опишите структурные особенности двух кристаллических модификаций азота.

17. Каков характер структуры белого и черного фосфора? Кратко опишите основные особенности этих структур.

18. Какое видоизменение кристаллической структуры наблюдается в ряду As , Sb , Bi ?

19. Сравните кристаллические структуры гексагонального мышьяка и ортогонального черного фосфора.

20. Перечислите и кратко опишите важнейшие кристаллические формы углерода.

21. Кратко опишите особенности кристаллических структур кремния, германия и олова.

22. Кратко опишите кристаллическую структуру одной из тетрагональных модификаций бора (B-50). Укажите координационные числа и многогранники атомов бора в этой структуре.

23. Опишите особенности кристаллической структуры галлия.

24. Назовите и кратко опишите интерметаллиды, подобные меди, магнию, □-железу.

8.3. Требования к рейтинг-контролю

Дисциплина заканчивается экзаменом (всего 100 баллов):

1. на экзамен выносятся до 40 баллов.

2. выполнение лабораторных работ по темам-1-12 - Выполнение (до 30 баллов)

3. выполнение самостоятельной работы (до 10 баллов)

4. вид: контрольная работа № 1 (до 10 баллов)

контрольная работа № 2 (до 10 баллов)

9. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

9.1. Рекомендуемая литература

9.1.1. Основная литература

Шифр	Литература
Л1.1	Басалаев Ю. М., Кристаллофизика и кристаллохимия, Кемерово: КемГУ, 2020, ISBN: 978-5-8353-2721-8, URL: https://e.lanbook.com/book/162600
Л1.2	Басалаев Ю. М., Кристаллофизика и кристаллохимия, Кемерово: КемГУ, 2014, ISBN: 978-5-8353-1712-7, URL: http://e.lanbook.com/books/element.php?p11_id=61407
Л1.3	Пугачев В. М., Кристаллохимия, Кемерово: КемГУ, 2013, ISBN: 978-5-8353-1322-8, URL: http://e.lanbook.com/books/element.php?p11_id=44382

9.1.2. Дополнительная литература

Шифр	Литература
Л2.1	Шаров М. К., Даринский Б. М., Самойлов А. М., Кострюков В. Ф., Точечные группы симметрии кристаллов, Воронеж: ВГУ, 2016, ISBN: , URL: https://e.lanbook.com/book/165419

9.1.3. Методические разработки

Шифр	Литература
Л3.1	Смоляков, Учебно-методический комплекс по дисциплине "Симметрия молекул и кристаллов", Тверь, 2012, ISBN: , URL: http://texts.lib.tversu.ru/texts2/04523umk.pdf
Л3.2	Крашенинин В. И., Кузьмина Л. В., Газенаур Е. Г., Симметрия в химии, Кемерово: КемГУ, 2013, ISBN: 978-5-8353-1321-1, URL: http://e.lanbook.com/books/element.php?p11_id=44353

9.3.1 Перечень программного обеспечения

11. МЕТОДИЧЕСКИЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ОБУЧАЮЩИХСЯ ПО ОСВОЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ

Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

1) Рекомендуемая литература

а) Основная литература:

1. Басалаев, Ю.М. Кристаллофизика и кристаллохимия / Ю.М. Басалаев; Мин. обр. и науки РФ, ФГБОУ ВПО «Кемеровский государственный университет». – Кемерово: Кемеровский государственный университет, 2014. – 403 с.: ил. – Режим доступа: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=278304>

2. Урусов В.С., Ерёмин Н.Н. Кристаллохимия. Краткий Курс. МГУ, 2010, 256 с.–

Электронный ресурс. - Режим доступа: <http://www.iprbookshop.ru/13343.html>

3. Пугачев, В.М. Кристаллохимия / В.М. Пугачев. – Кемерово: Кемеровский государственный университет, 2013. – 104 с. – Режим доступа: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=232461>.

б) Дополнительная литература:

1. Белов Н.П. Основы кристаллографии и кристаллофизики. Часть I. Введение в теорию симметрии кристаллов [Электронный ресурс]: учебное пособие. — СПб.:

Университет ИТМО, 2009. — 45 с. — Режим доступа: <http://www.iprbookshop.ru/67480.html>

2. Строение вещества. Строение кристаллов [Электронный ресурс]: учебное пособие / А.М. Голубев [и др.]. — М.: Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана, 2010. — 36 с. — Режим доступа: <http://www.iprbookshop.ru/31270.html>

3. Куприянов М.Ф., Рудская А.Г., Кофанова Н.Б., Кабиров Ю.В., Разумная А.Г. Современные методы структурного анализа веществ. ЮФУ. 2009. 288 с. — Электронный ресурс. - Режим доступа: <http://www.iprbookshop.ru/47135.html>

4. Новоселов, К.Л. Основы геометрической кристаллографии / К.Л. Новоселов;— Томск: Издательство Томского политехнического университета, 2015. — 73 с.: ил., табл., схем. — Режим доступа: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=442772>

5. Ремпель, А.А. Нестехиометрия в твердом теле / А.А. Ремпель, А.И. Гусев. — Москва: Физматлит, 2018. — 638 с.: ил. — Режим доступа: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=485335>