

Документ подписан простой электронной подписью

Информация о владельце:

ФИО: Лельчицкий Игорь Давыдович

Должность: и.о. проректора по образовательной деятельности

Дата подписания: 13.07.2026 14:52:27

Уникальный программный ключ:

aa5b5ee17d97a2e4d94e98e995320af94f043ce2

УП: 04.04.01 Химия

ФХ 2025.plx

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



Утверждаю:

Руководитель ООП:

 П.М. Пахомов

28 мая 2026 г.

Рабочая программа дисциплины

Симметрия кристаллических структур

Закреплена за кафедру: **Физической химии**

Направление подготовки: **04.04.01 Химия**

Направленность (профиль): **Физическая химия**

Квалификация: **Магистр**

Форма обучения: **очная**

Семестр: **2,3**

Программу составил(и):

д-р хим. наук, проф., Виноградова Марина Геннадьевна

1. ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ

Цели освоения дисциплины (модуля):

Целью освоения дисциплины является: знакомство студента с идеями и методами симметрии, составляющими теоретический фундамент современной химической науки.

Задачи :

Задачами дисциплины являются: освоение ее понятийного аппарата, раскрытие основных принципов симметрии, использование модельных симметричных кристаллохимических представлений в решении конкретных проблем химии.

2. МЕСТО ДИСЦИПЛИНЫ В СТРУКТУРЕ ООП

Цикл (раздел) ОП: Б1.О

Требования к предварительной подготовке обучающегося:

Актуальные задачи современной химии. Часть 1.

Конформационный анализ

Физико-химические расчеты

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

Спектроскопия полимеров

Основы переработки полимеров

Актуальные задачи современной химии. Часть 2.

Синтез и химические превращения полимеров

3. ОБЪЕМ ДИСЦИПЛИНЫ

Общая трудоемкость	7 ЗЕТ
Часов по учебному плану	252
в том числе:	
самостоятельная работа	171
часов на контроль	36

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

ОПК-1.1: Использует существующие и разрабатывает новые методики получения и характеристики веществ и материалов для решения задач в избранной области химии или смежных наук

ОПК-1.2: Использует современное оборудование, программное обеспечение и профессиональные базы данных для решения задач в избранной области химии или смежных наук

ОПК-2.1: Проводит критический анализ результатов собственных экспериментальных и расчетно-теоретических работ, корректно интерпретирует их

ОПК-2.2: Формулирует заключения и выводы по результатам анализа литературных данных, собственных экспериментальных и расчетно-теоретических работ в избранной области химии или смежных наук

5. ВИДЫ КОНТРОЛЯ

Виды контроля в семестрах:	
экзамены	3

6. ЯЗЫК ПРЕПОДАВАНИЯ

Язык преподавания: русский.

7. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

№	Наименование разделов и тем	Вид занятия	Сем.	Часов	Примечание
	Раздел 1. Пространственная решетка				
1.1	Пространственная решетка	Пр	2	2	
1.2	Индексы и символы узла кристаллической решетки, узлового ряда, грани	Ср	2	6	
	Раздел 2. Кристаллографические системы				
2.1	Кристаллографические системы	Пр	2	2	
2.2	Возможные типы кристаллографических систем и типы сингоний	Ср	2	4	
	Раздел 3. Симметрия кристаллов и пространственных решёток				
3.1	Определение элементов симметрии и операций симметрии пространственных решеток	Пр	2	4	
3.2	Определение элементов симметрии и операций симметрии пространственных решеток	Ср	2	8	
	Раздел 4. Stereoхимическая классификация структур				
4.1	Типы структур химических элементов	Пр	2	2	
4.2	Энантиомерия и хиральность	Ср	2	8	
	Раздел 5. Симметрия плоских сеток и многогранников				
5.1	Симметрия плоских сеток и многогранников	Пр	2	4	
5.2	Влияние точечной симметрии кристалла на геометрию кристаллической решетки	Ср	2	8	
	Раздел 6. Реальный кристалл				
6.1	Реальный кристалл	Пр	2	4	
6.2	Классификации дефектов: точечные дефекты и дислокации	Ср	2	10	
	Раздел 7. Симметрия координационных полиэдров				
7.1	Симметрия координационных полиэдров	Пр	2	12	

7.2	Основные типы упаковок атомов. Реальные кристаллы, в пространственной структуре которых можно выделить определённые координационные полиэдры	Ср	2	34	
	Раздел 8. Кристалл как одна из форм конденсированного состояния вещества				
8.1	Кристалл как одна из форм конденсированного состояния вещества	Пр	3	1	
8.2	Рост растворение и разложение кристалла	Ср	3	3	
8.3		Экзамен	3	1	
	Раздел 9. Стереохимия и симметрия органических молекул				
9.1	Стереохимия и симметрия органических молекул	Пр	3	1	
9.2	Определение типа упаковки для объекта по имеющимся базам данных	Ср	3	6	
9.3		Экзамен	3	2	
	Раздел 10. Антисимметрия, цветная симметрия				
10.1	Антисимметрия, цветная симметрия	Пр	3	1	
10.2	применение антисимметрии и цветной симметрии	Ср	3	6	
10.3		Экзамен	3	2	
	Раздел 11. Кристаллографические точечные группы симметрии.				
11.1	Кристаллографические точечные группы симметрии	Пр	3	8	
11.2	Точечная симметрия кристаллических систем	Ср	3	52	
11.3		Экзамен	3	20	
	Раздел 12. Предельные группы симметрии (группы Кюри)				
12.1	Предельные группы симметрии (группы Кюри)	Пр	3	1	
12.2	Принцип Кюри	Ср	3	6	
12.3		Экзамен	3	3	
	Раздел 13. Фуллерены, фуллериты. Фуллериды.				
13.1	кристаллическое строение фуллеренов, фуллеритов, фуллеридов	Пр	3	2	
13.2	Фуллерены, фуллериты. Фуллериды	Ср	3	14	
13.3		Экзамен	3	6	
	Раздел 14. Квазикристаллы. Мозаики Пенроуза				

14.1	Квазикристаллы. Мозаики Пенроуза	Пр	3	1	
14.2	Квазикристаллы. Мозаики Пенроуза	Ср	3	6	
14.3		Экзамен	3	2	

Образовательные технологии

Для реализации ООП и повышения качества образовательного процесса используются следующие образовательные технологии:

Список образовательных технологий

1	Проектная технология
2	Информационные (цифровые) технологии
3	Методы группового решения творческих задач (метод Дельфи, метод 6–6, метод развивающей кооперации, мозговой штурм (метод генерации идей), нетворкинг и т.д.)

8. ОЦЕНОЧНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ПРОВЕДЕНИЯ ТЕКУЩЕЙ И ПРОМЕЖУТОЧНОЙ АТТЕСТАЦИИ

8.1. Оценочные материалы для проведения текущей аттестации

представлены в приложении 1.

8.2. Оценочные материалы для проведения промежуточной аттестации

представлены в приложении 1.

8.3. Требования к рейтинг-контролю

представлены в приложении 1. Шкала и критерии выставления оценок описаны в локальной нормативной документации Тверского государственного университета (Положение о рейтинговой системе обучения студентов ТвГУ).

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

Рекомендуемая литература

Основная

Шифр	Литература
Л.1.1	Сизова О. В., Иванова Н. В., Ванин А. А., Молекулярная симметрия в неорганической и координационной химии, Санкт-Петербург: Лань, 2021, ISBN: 978-5-8114-8475-1, URL: https://e.lanbook.com/book/176888
Л.1.2	Басалаев Ю. М., Кристаллофизика и кристаллохимия, Кемерово: КемГУ, 2020, ISBN: 978-5-8353-2721-8, URL: https://e.lanbook.com/book/162600
Л.1.3	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

Перечень программного обеспечения

1	Kaspersky Endpoint Security 10 для Windows
2	Google Chrome
3	Adobe Acrobat Reader

4	HyperChem
5	Многофункциональный редактор ONLYOFFICE

Современные профессиональные базы данных и информационные справочные системы

1	Виртуальный читальный зал диссертаций Российской государственной библиотеки (РГБ)
2	Репозиторий ТвГУ
3	Научная электронная библиотека eLIBRARY.RU (подписка на журналы)
4	ЭБС ТвГУ
5	ЭБС «Лань»
6	ЭБС IPRbooks
7	ЭБС «Университетская библиотека онлайн»

10. МАТЕРИАЛЬНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Аудит-я	Оборудование
3-3086	комплект учебной мебели, переносной ноутбук, проектор, весы аналитические, насос форвакуумный
3-410	ИБП, компьютеры, принтер
3-243	комплект учебной мебели, компьютеры

11. МЕТОДИЧЕСКИЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ОБУЧАЮЩИХСЯ ПО ОСВОЕНИЮ ДИСЦИПЛИНЫ

Учебная программа:

I. Тема 1. Пространственная решетка

Основные понятия: пространственная решётка, кристаллическая решётка, узел, узловый ряд, ребро, грань, символы, индексы. Отличие пространственной и кристаллической решёток. Одномерная, двумерная, трехмерная пространственная решетка. Индексы и символы узла кристаллической решетки, узлового ряда, грани

Тема 2. Кристаллографические системы

Отличие кристаллографических систем от традиционной декартовой системы координат. Базовые элементы кристаллографических координатных систем. Соответствие кристаллографических систем и декартовой системы координат. Возможные типы кристаллографических систем и типы сингоний, которые обеспечивают данные системы. Элементарные ячейки и трансляционные группы Браве.

Тема 3. Симметрия кристаллов и пространственных решёток

Элементы симметрии и операций симметрии пространственных решеток. Матричный метод описания операций симметрии. 32 класса симметрии, основанные на операциях и элементах симметрии внешней формы кристалла.

Тема 4.Стереохимическая классификация структур

Типы структур химических элементов. Существование основных и побочных валентностей в кристаллах. Энантиомеры и хиральность. Координационное число и координационный полиэдр. Тела Платона

Тема5. Симметрия плоских сеток и многогранников

Элементы трансляции и симметрии плоских сеток. Элементы трансляции и симметрии многогранников. Влияние точечной симметрии кристалла на геометрию кристаллической решетки

Тема 6.Реальный кристалл

Дефекты и их типы в реальных кристаллах. Классификации дефектов: точечные дефекты и дислокации. Контур и вектор Бюргерса. Движения дислокаций. Источники дислокаций. Взаимодействие дислокаций с точечными дефектами. Двухмерные дефекты: дефекты упаковки и малоугловые границы.

Тема 7: Симметрия т координационных полиэдров

Элементы и точечные группы симметрии координационных полиэдров. Реальные кристаллы, в пространственной структуре которых можно выделить определённые координационные полиэдры. Основные типы упаковок атомов в координационных полиэдрах.

Тема 8. Кристалл как одна из форм конденсированного состояния вещества

Влияние однородности и анизотропии кристалла на пьезоэффект, двойное лучепреломление света, явления пиро- и пьезоэлектричества и др.. Рост растворение и разложение кристалла. Самоогранка кристалла в процессе роста.

Тема 9. Стереохимия и симметрия органических молекул

Атомные, ионные радиусы Ван-дер-Ваальса в описании формы, симметрии и размера молекул. Распределение органических кристаллов по структурным классам. Топология молекулярных упаковок. Упаковка по принципу «выступ к впадине». Хиральность упаковок, типы.

Тема 10. Антисимметрия, цветная симметрия

Черно-белые точечные группы симметрии. Цветные точечные группы симметрии. Применение антисимметрии и цветной симметрии.

Тема 11. Кристаллографические точечные группы симметрии

Некубические группы симметрии C_n , S_n , C_{nv} , C_{nh} и D_n , D_{nh} , D_{nd} . Кубические группы T , T_d , Th , O , O_h симметрии. Икосаэдрические и центросимметрические точечные группы симметрии I , I_h , K , K_h

Тема 12. Предельные группы симметрии (группы Кюри)

Группы симметрии с осями бесконечного порядка. Обозначение по Шенфлису и Генри-Могену групп симметрии с осями бесконечного порядка. Суперпозиция групп симметрии. Принцип Кюри

Тема 13. Фуллерены, фуллериты. Фуллериды.

Структура молекул C_{60} и их кристаллическое строение. Структура молекул C_{70} и их кристаллическое строение. Простейшие фуллериды и их структурные отличия от фуллеренов и фуллеритов. Икосаэдрические сингонии в описании фуллеренов, фуллеритов, фуллеридов.

Тема 14. Квазикристаллы. Мозаики Пенроуза.

Особенности кристаллической структуры шехтманитов. Квазикристаллы и их нетрансляционное упорядочение. Методы моделирования квазикристаллов и их аппроксимантов.

Методические материалы для обучающихся по освоению дисциплины

Задания и контроль самостоятельной работы

Перед каждым практическим занятием необходима самостоятельная работа по подготовке к его выполнению по индивидуальным темам. Для этого магистранту предлагаются объекты, работа с которыми даст необходимый материал для работ с темами. Данные, которые будут получены в результате выполнения тем, будут использованы в практических работах. Все практические работы, не выполненные в аудиторные часы занятий, так же остаются в качестве домашнего задания. Срок выполнения – две недели, после чего максимальное количество баллов за соответствующее задание снижается в два раза.

Магистрант может выбрать другой объект более близкий к своей научной работе после согласования с преподавателем дисциплины.

Рекомендации по подготовке к контрольным работам и экзамену:

По дисциплине «Симметрия кристаллических структур» учебным планом предусмотрен зачёт и экзамен, которые включают в себя: устные ответы на вопросы.

При ответах на вопросы принимается во внимание знание и понимание (по

существо) материала, его полнота и глубина освещения, аргументированность, культура речи и пр.

Рекомендации по подготовке контрольным работам, зачёту и экзамену

К зачёту допускаются магистранты, успешно освоившие учебную программу за 2 семестр по дисциплине «Симметрия кристаллических структур». Положительным результатом изучения является посещение занятий, выполнение всех практических работ курса, каждую на 3 балла и более, а также выполнение самостоятельной работы. На зачетное занятие выносятся доклад и презентация в Power Point по индивидуальной теме для самостоятельной работы.

Экзамен по дисциплине включает:

- устный ответ на вопросы и выполнение контрольного задания;

При ответе на вопросы следует четко знать определения, дополнять каждый теоретический вопрос соответствующими примерами и графиками.

При оценке устного ответа на вопросы принимается во внимание:

1. полнота, глубина освещения вопроса, аргументированность изложения материала;
2. умение связывать теорию с практикой;
3. культура речи.

В ходе экзамена преподаватель имеет право задавать дополнительные вопросы.

Примерные вопросы для подготовки к экзамену по дисциплине
«Симметрия кристаллических структур»

3 семестр

1. Влияние однородности и анизотропии кристалла на пьезоэффект, двойное лучепреломление света, явления пьезо- и пьезоэлектричества и др..
2. Рост и растворение и разложение кристалла.
3. Самоогранка кристалла в процессе роста.
4. Атомные, ионные радиусы Ван-дер-Ваальса в описании формы, симметрии и размера молекул.

5. Распределение органических кристаллов по структурным классам.

6. Топология молекулярных упаковок.

7. Хиральность упаковок, типы.

8. Черно-белые точечные группы симметрии.

9. Цветные точечные группы симметрии.

10. Некубические группы симметрии C_n , S_n , C_{nv} , C_{nh}

11. Некубические группы симметрии D_n , D_{nh} , D_{nd} .

12. Кубические группы T , T_d , Th , O , O_h симметрии.

13. Икосаэдрические и центросимметрические точечные группы симметрии I , I_h , K ,

K_h

14. Группы симметрии с осями бесконечного порядка.

15. Суперпозиция групп симметрии.

16. Принцип Кюри

17. Структура молекул C_{60} и их кристаллическое строение.

18. Структура молекул C_{70} и их кристаллическое строение.

19. Квазикристаллы.

20. Мозаики Пенроуза.

.Макет экзаменационного билета по дисциплине
кристаллических структур»

«Симметрия

3 семестр

1. Влияние однородности и анизотропии кристалла на пьезоэффект

2. Квазикристаллы.

3. Рассчитать параметры кристаллической ячейки C_{60} если длина связи C-C составляет 1,44 Å, а Ван-дер-Ваальсов радиус всей молекулы 5,25 Å;

