

**МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ**  
**федеральное государственное автономное**  
**образовательное учреждение высшего образования**  
**«Национальный исследовательский**  
**Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского»**

УТВЕРЖДЕНО  
решением ученого совета ННГУ  
протокол от "29"мая 2024 г. № 5

**Рабочая программа дисциплины**  
**«Актуальные проблемы кристаллографии и теория**  
**псевдосимметрии»**

Уровень высшего образования  
**Подготовка научных и научно-педагогических кадров**

Научная специальность  
**3.1.7. Стоматология**

**Форма обучения**  
**Очная**

### 1. Место и цели дисциплины в структуре ОПОП

Дисциплина «Актуальные проблемы кристаллографии и теория псевдосимметрии» является факультативной дисциплиной по выбору и изучается на 2 году обучения в 4 семестре.

#### Целями освоения дисциплины являются:

Дисциплина «Теория псевдосимметрии» будет полезна аспирантам, область научных интересов которых включает изучение атомной структуры кристаллов. Данный курс будет интересен как химикам, занимающимся синтезом и описанием новых органических, металлоорганических и неорганических кристаллов, так и физикам, изучающим структурнозависимые физические свойства кристаллов. Курс предполагает углубленное изучение теории симметрии кристаллов и кристаллохимии. Дополнение классической теории симметрии понятием «псевдосимметрия» позволяет существенно обогатить исследовательский инструментарий кристаллохимического описания атомной структуры кристалла. Таким образом, дисциплину «Теория псевдосимметрии» можно рассматривать как продолжение курсов «Кристаллография» и «Кристаллохимия».

Освоение курса «Теория псевдосимметрии» опирается на знания, умения, навыки и компетенции, сформированные на двух предшествующих уровнях образования. Прежде всего, речь идет об освоении основных методов исследования атомной структуры кристалла, способах и средствах получения, хранения, переработки кристаллографической информации. У обучаемых формируется умение самостоятельно формулировать цели и задачи научного исследования, решать поставленные задачи с помощью современных исследовательских методов с использованием отечественного и зарубежного опыта. Приобретается опыт использования базовых теоретических знаний и практических навыков и умений в научных и научно-прикладных исследованиях.

### 3. Структура и содержание дисциплины.

Объем дисциплины (модуля) составляет всего - 36 часов, из которых 36 часов составляет контактная работа обучающегося с преподавателем (занятия лекционного типа – 18 часа, 18 часа – занятия семинарского типа).

**Таблица 2**

**Структура дисциплины**

| Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины, | Всего (часы) | В том числе  |                        |
|--|--------------|--|------------------------|
|  |              | Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы из них | Самостоятельная работа |

| форма промежуточной аттестации по дисциплине                                   |       | Занятия лекционного типа | Занятия семинарского типа | Занятия лабораторного типа | Всего |    |
|--|-------|--------------------------|---------------------------|----------------------------|-------|----|
|  | Очное |                          |                           |                            |       |    |
| Группы точечной симметрии  | 17    | 3                        |                           |                            | 3     | 14 |
| Групп пространственной симметрии   | 17    | 3                        |                           |                            | 3     | 14 |
| Псевдосимметрия в природе  | 20    | 6                        |                           |                            | 6     | 14 |
| Методы количественной оценки псевдосимметрии                                   | 20    | 6                        |                           |                            | 6     | 14 |
| Современные подходы к кристаллохимическому описанию координационных соединений | 32    |                          | 18                        |                            | 18    | 14 |
| В т.ч.текущий контроль   | 2     |                          |                           |                            |       |    |
| Промежуточная аттестация - зачет   |       |                          |                           |                            |       |    |

**Таблица 3**

**Содержание дисциплины**

| №П/п | Наименование раздела дисциплины  | Содержание раздела   | Форма проведения занятий | Форма текущего контроля       |
|------|----------------------------------|--|--------------------------|-------------------------------|
| 1а   | Группы точечной симметрии        | Теория симметрии (введение); группы симметрии разной размерности; точечная симметрия;  | Лекционные               | текущий контроль успеваемости |
| 1б   | Групп пространственной симметрии | Решетки Браве; Элементы симметрии в кристаллическом пространстве; пространственная симметрия кристаллов;   | Лекционные               | текущий контроль успеваемости |
| 1в   | Псевдосимметрия в природе        | Понятие псевдосимметрии, псевдосимметрия кристаллов; виды псевдосимметрии кристаллов; влияние псевдосимметрии кристалла на дифракционную картину; особенности рентгеноструктурного | Лекционные               | текущий контроль успеваемости |

|    |   |  |                        |                                     |
|----|---|--|------------------------|-------------------------------------|
|    |   | анализа<br>псевдосимметричных<br>кристаллов;<br>псевдосимметрия и<br>физические свойства<br>кристалла;<br>псевдосимметрия в<br>живой природе   |                        |                                     |
| 1г | Методы количественной<br>оценки псевдосимметрии   | Обзор методы<br>количественного<br>описания<br>псевдосимметрии<br>кристаллов;  | Лекционные             | текущий<br>контроль<br>успеваемости |
| 1д | Современные подходы к<br>кристаллохимическому<br>описанию координационных<br>соединений | Обзор методов<br>современного<br>кристаллохимического<br>описания<br>координационных<br>соединений;<br>программное<br>обеспечение ЭВМ,<br>используемое для<br>исследования<br>псевдосимметрии<br>кристаллов и<br>кристаллохимического<br>анализа | Лабораторные<br>работы | Письменные<br>отчеты                |

#### 4. Формы организации и контроля самостоятельной работы обучающихся

Самостоятельная работа обучающихся предполагает изучение конспектов лекций, выделенных разделов основной литературы, а также дополнительной литературы, подготовку устного доклада (публичного выступления), подготовку к промежуточной аттестации.

Перечень основной и дополнительной литературы для самостоятельного изучения приведен в п. 7 настоящей Рабочей программы дисциплины.

Контрольные вопросы для промежуточной аттестации, примерные темы для устного доклада (публичного выступления) приведены в п. 6.4 настоящей Рабочей программы дисциплины.

#### 5. Фонд оценочных средств для аттестации по дисциплине

##### 5.1. Критерии и процедуры оценивания результатов обучения по дисциплине.

При выполнении всех работ учитываются следующие **основные критерии**:

- уровень теоретических знаний (подразумевается не только формальное воспроизведение информации, но и понимание предмета, которое подтверждается правильными ответами на дополнительные, уточняющие вопросы, заданные экзаменаторами);

- умение использовать теоретические знания при анализе конкретных проблем, ситуаций;
- качество изложения материала, то есть обоснованность, четкость, логичность ответа, а также его полнота (то есть содержательность, не исключающая лаконичности);
- способность устанавливать внутри- и межпредметные связи,
- оригинальность мышления, знакомство с дополнительной литературой и другие факторы.

#### ***Описание шкалы оценивания на промежуточной аттестации в форме экзамена***

##### ***Описание шкалы оценивания на промежуточной аттестации в форме зачета***

| <b>Оценка</b>     | <b>Уровень подготовленности, характеризуемый оценкой</b>   |
|-------------------|--|
| <i>Зачтено</i>    | владение программным материалом, понимание сущности рассматриваемых процессов и явлений, умение самостоятельно обозначить проблемные ситуации в организации научных исследований, способность критически анализировать и сравнивать существующие подходы и методы к оценке результативности научной деятельности, свободное владение источниками, умение четко и ясно излагать результаты собственной работы, следовать нормам, принятым в научных дискуссиях. |
| <i>Не зачтено</i> | непонимание смысла ключевых проблем, недостаточное владение науковедческой терминологией, неумение самостоятельно обозначить проблемные ситуации, неспособность анализировать и сравнивать существующие концепции, подходы и методы, неумение ясно излагать результаты собственной работы, следовать нормам, принятым в научных дискуссиях.  |

#### ***5.2. Примеры типовых контрольных заданий или иных материалов, используемых для оценивания результатов обучения по дисциплине***

5.2.1. При проведении зачета обучающимся предлагаются следующие контрольные вопросы, охватывающие программу дисциплины «Актуальные проблемы теории конденсированного состояния»:

Задание №1. Провести анализ возможного повышения симметрии в кристаллах структурного типа NaCl.

Задание №2. Определить федоровские надгруппы групп симметрии моноклинной сингонии.

Задание №3. Используя точечную модель атомов оценить степень инвариантности электронной плотности кристаллов структурного типа NaCl (по выбору преподавателя) относительно различных операторов преобразования.

#### **6. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины.**

а) основная литература:

- Задачи по кристаллографии: учеб. пособие для вузов по физ. и хим. специальностям./Головачев В. П., Сафьянов Ю. Н., Чупрунов Е. В., Фадеев М. А., Хохлов А.

Ф. - М.: Физматлит, 2003. - 208 с. [<http://www.lib.unn.ru/php/details.php?DocId=59115&DB=1>]; 10 шт.

- Чупрунов Е. В., Хохлов А. Ф., Фадеев М. А. - Основы кристаллографии: учеб. для вузов. - М.: Физматлит, 2004. - 500 с. [<http://www.lib.unn.ru/php/details.php?DocId=59410&DB=1>]; 3 шт.

- Чупрунов Е. В. - Симметрия и псевдосимметрия кристаллов. - Н. Новгород: Изд-во ННГУ, 2015. - 658 с. [<http://www.lib.unn.ru/php/details.php?DocId=467290&DB=1>]; 15 шт.

- Сомов Н.В. Псевдосимметрия кристаллов//Учебное пособие / Под редакцией проф. Е.В. Чупрунова. – Нижний Новгород: Нижегородский госуниверситет. 2014. С. 62

б) дополнительная литература:

- Псевдосимметрия в живой природе: монография. /Гелашвили Д. Б., Чупрунов Е. В., Сомов Н. В., Марычев М. О., Нижегородцев А. А., Маркелов И. Н., Якимов В. Н. - Н. Новгород: Изд-во ННГУ, 2016. - 363 с. [<http://www.lib.unn.ru/php/details.php?DocId=489390&DB=1>]; 3 шт.

- Сомов Н. В. Расчетные методы исследования Федоровской псевдосимметрии кристаллов: дис. канд. физ.-мат. наук : 01.04.07. - Н. Новгород, 2011. - 170 с.

[<http://www.lib.unn.ru/php/details.php?DocId=413921&DB=1>], 1 шт.

в) программное обеспечение и Интернет-ресурсы

- Кристаллохимический комплекс программ **PseudoSymmetry** для исследования псевдосимметрии кристаллов. <http://phys.unn.ru/ps/> (Дата обращения 09.02.2018)

- Кристаллографический сервер Бильбао. <http://www.cryst.ehu.es> (Дата обращения 09.02.2018)

- Международный союз кристаллографов. <http://iucr.org> (Дата обращения 09.02.2018)

- База данных неорганических кристаллов Inorganic Crystal Structure Database (ICSD).

- База данных органически кристаллов Cambridge Crystallographic Data Centre (CCDC).

## 7. Материально-техническое обеспечение дисциплины

- помещения для проведения занятий: лекционного типа, семинарского типа, групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации, а также помещения для хранения и профилактического обслуживания оборудования и помещения для самостоятельной работы обучающихся, оснащенные компьютерной техникой с возможностью подключения к сети "Интернет" и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду ННГУ.
- лицензионное программное обеспечение Inorganic Crystal Structure Database (ICSD), Cambridge Crystallographic Data Centre (CCDC);

Рабочая программа учебной дисциплины составлена в соответствии с учебным планом, Положением о подготовке научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре (адъюнктуре) (Постановление Правительства РФ от 30.11.2021 № 2122), Федеральными государственными требованиями к структуре программ подготовки научных и научно-педагогических кадров в аспирантуре (адъюнктуре) (Приказ Минобрнауки РФ от 20.10.2021 № 951).

Автор (ы)\_\_\_\_\_Сомов Н.В.

Рецензент (ы) \_\_\_\_\_

Заведующий кафедрой\_\_\_\_\_Чупрунов Е.В.

Программа одобрена на заседании Методической комиссии Института  
клинической медицины 26 января 2023 года, протокол № 2.