

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