ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ
ИНСТИТУТ ХИМИИ ТВЕРДОГО ТЕЛА И МЕХАНОХИМИИ
СИБИРСКОГО ОТДЕЛЕНИЯ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК
(ИХТТМ СО РАН)

УТВЕРЖДАЮ
Директор ИХТТМ СО РАН

Д.х.н. _____ А.П. Немудрый
«25» июня 2018 г.

Рабочая программа дисциплины

ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ СТРОЕНИЯ КРИСТАЛЛОВ

основной образовательной программы высшего образования –
программы подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре

Направление подготовки:
04.06.01 Химические науки

Направленность (профиль) подготовки:
«Химия твердого тела»

Новосибирск 2018

Рабочая программа дисциплины «Теоретические основы строения кристаллов» составлена в соответствии с требованиями федерального государственного образовательного стандарта высшего образования (ФГОС ВО) по направлению подготовки 04.06.01 Химические науки (уровень подготовки кадров высшей квалификации).
ФГОС ВО введен в действие приказом Минобрнауки России от 30.07.2014 N 869.

Программа утверждена на заседании Ученого совета ИХТТМ СО РАН, протокол № 6 от 25 июня 2018 г.

Программу разработала:
доцент ИХТТМ СО РАН, канд. хим. наук Дребущак Т.Н.

Ответственный за образовательную программу
д.х.н., профессор О.И. Ломовский

1. Цели и задачи дисциплины.

Целью освоения дисциплины является получение аспирантами фундаментальных знаний в области теории симметрии кристаллических структур, геометрии кристаллических решёток, теории точечных кристаллографических и пространственных групп симметрии, приобретение умения анализировать наблюдения и экспериментальные данные, которые связаны с кристаллическим строением твердых тел, работать с современными банками структурных данных.

Задачи дисциплины:

- ознакомление аспирантов с основами теории симметрии кристаллических структур;
- формирование у аспирантов представлений о геометрии кристаллических решёток, теории точечных кристаллографических и пространственных групп симметрии;
- ознакомление аспирантов с представлением структурной информации в международных кристаллографических таблицах, в различных структурных базах данных;
- приобретение навыков работы с современными программами обработки структурных данных и международными кристаллографическими таблицами.

Данный курс охватывает круг вопросов, связанных с углубленным изучением некоторых аспектов теории симметрии кристаллических структур, геометрии кристаллических решёток, теории точечных кристаллографических и пространственных групп симметрии. Рассматривается современное представление структурной информации в международных кристаллографических таблицах, в различных структурных базах данных. Практические занятия проводятся с использование международных кристаллографических таблиц, Кембриджского банка структурных данных, различных программ обработки структурных данных и визуализации кристаллических структур.

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы.

Дисциплина «Теоретические основы строения кристаллов» относится к вариативной части Блока 1 основной образовательной программы аспирантуры по направлению подготовки 04.06.01 «Химические науки», реализуемой в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институте химии твердого тела и механохимии Сибирского отделения Российской академии наук (ИХТТМ СО РАН).

Дисциплина «Теоретические основы строения кристаллов» является составной частью модуля «Химия твердого тела».

Дисциплина «Теоретические основы строения кристаллов» является дисциплиной по выбору для освоения в 1-й – 2-й годы обучения.

Результаты освоения дисциплины «Теоретические основы строения кристаллов» используются в следующих разделах программы аспирантуры:

- Научно-производственная практика.
- Научные исследования.

3. Планируемые результаты обучения по дисциплине «Теоретические основы строения кристаллов».

Таблица 3.1

Код компе-тенции	Содержание компетенции	Планируемые результаты обучения по дисциплине
Универсальные компетенции		
УК-1	Способность к критическому	**Знать** основные современные направления

	анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях.	развития, проблемы и новейшие достижения в области теории симметрии кристаллических структур.
УК-3	Готовность участвовать в работе российских и международных исследовательских коллективов по решению научных и научно-образовательных задач.	**Уметь** представлять результаты решения научных и научно-образовательных задач, касающихся теории симметрии кристаллических структур, в российских и международных исследовательских коллективах.
Общепрофессиональные компетенции		
ОПК-1	Способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в соответствующей профессиональной области с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий.	**Уметь** планировать, организовывать и проводить научные исследования с использованием современных программ обработки структурных данных.
Профессиональные компетенции		
ПК-3	Способность к самостоятельной (в том числе руководящей) научно-исследовательской деятельности, требующей широкой фундаментальной подготовки в современных направлениях развития химии твердого тела, глубокой специализированной подготовки в выбранном направлении, владения навыками современных методов исследования.	**Владеть** навыками работы с международными кристаллографическими таблицами.
ПК-4	Владение фундаментальными знаниями в основных разделах химии твердого тела, включая проблемы строения и реакционной способности твердых веществ, методы синтеза различных классов твердофазных соединений, методы исследования свойств твердофазных веществ и материалов; владение техникой экспериментальных исследований; умение использовать информационно-поисковые системы в области химии твердого тела.	**Знать** основы теории симметрии кристаллических структур, геометрии кристаллических решеток, теории точечных кристаллографических и пространственных групп симметрии. **Владеть** навыками работы с современными программами обработки и анализа структурных данных.

4. Объем, структура и содержание дисциплины.

Объем дисциплины составляет 2 зачетные единицы, всего 72 академических часа, из которых 30 часа составляет контактная работа аспиранта с преподавателем (18 часов – лекции, 10 часов - групповые консультации, 2 часа - мероприятия промежуточной аттестации), 42 часа составляет самостоятельная работа аспиранта.

4.1. Объем и структура дисциплины:

Таблица 4.1

Показатель объема дисциплины и вид деятельности		Семестр
		2
	Объем дисциплины в зачетных единицах	2
	Объем дисциплины в часах	72
	Всего занятий в контактной форме, час	30
	Лекции, час.	18
	Практические занятия, час.	-
	Лабораторные занятия, час	-
	из них в активной и интерактивной форме, час.	-
	Аттестация, час	2
	Консультации, час.	10
	Самостоятельная работа, час.	42
	Вид аттестации	Зачет

4.2. Содержание дисциплины:

Таблица 4.2

Наименование разделов (тем) дисциплины	Количество часов				Контроль
	Лекции	**Сам. работа**	**Консультации**	**Аттестация**	
Геометрия кристаллического пространства. Трансляционно упорядоченное строение кристаллов, кристаллическая решетка, индексы узловых рядов и плоскостей. Обратная решетка.	2	4	1		
Преобразование координат точек и индексов плоскостей при изменении базиса кристаллографической системы координат. Применение обратной решетки для описания дифракции волн на кристалле. Кристаллографические проекции.	2	6	1		Опрос
Основные положения теории групп, точечная симметрия кристаллов, матричный вид описания операций симметрии. Закрытые операции симметрии. Кристаллографические точечные	2	4	1		Опрос

группы симметрии.					
Кристаллические системы. Влияние точечной симметрии кристалла на геометрию кристаллической решетки. Кристаллографические системы координат.	2	4	1		Опрос
Решетки Бравэ. Открытые операции симметрии. Пространственные (федоровские) группы симметрии низшей категории.	2	6	1		Опрос
Пространственные группы симметрии средней категории. Кубические пространственные группы симметрии.	2	6	1		Опрос
Соотношения группа – подгруппа – надгруппа. Симметрийный аспект структурных фазовых превращений. Хиральность и ахиральность в кристаллографии.	2	6	1		Опрос
Международные кристаллографические таблицы. Кристаллоструктурные базы данных. Международные стандартные форматы представления структурных данных.	4	6	1		Прием заданий
Промежуточный контроль			**2**	**2**	**Зачет**
Итого	**18**	**42**	**10**	**2**	**72 часа**

Программа курса лекций.

Лекция 1. Геометрия кристаллического пространства. Трансляционно упорядоченное строение кристаллов, кристаллическая решетка, индексы узловых рядов и плоскостей. Теоремы решеточной кристаллографии. Обратная решетка. Некоторые расчетные формулы аналитической геометрии кристаллического пространства.

Лекция 2. Преобразование координат точек и индексов плоскостей при изменении базиса кристаллографической системы координат. Применение обратной решетки для описания дифракции волн на кристалле. Кристаллографические проекции.

Лекция 3. Основные положения теории групп, точечная симметрия кристаллов, матричный вид описания операций симметрии. Закрытые операции симметрии. Кристаллографические точечные группы симметрии. Матричный метод описания операций симметрии. Умножение операций симметрии.

Лекция 4. Кристаллические системы. Влияние точечной симметрии кристалла на геометрию кристаллической решетки. Кристаллографические системы координат. Предельные группы симметрии. Черно-белые и цветные точечные группы симметрии. Принцип Кюри. Орбиты кристаллографических групп. Кристаллические многогранники, простые формы.

Лекция 5. Решетки Бравэ. Соотношения между примитивными и центрированными элементарными ячейками. Открытые операции симметрии. Пространственные (федоровские) группы симметрии кристаллических структур. Орбиты пространственных групп. Пространственные группы низшей категории (триклинной, моноклинной, ромбической сингоний).

Лекция 6. Пространственные группы симметрии средней категории (тетрагональной, тригональной и гексагональной сингоний). Кубические пространственные группы симметрии.

Лекция 7. Соотношения группа – подгруппа – надгруппа. Структурные типы и описание симметрии плотнейших упаковок одинаковых шаров. Симметрийный аспект структурных фазовых превращений. Хиральность и ахиральность в кристаллографии.

Лекция 8. Международные кристаллографические таблицы. Кристаллоструктурные базы данных. Международные стандартные форматы представления структурных данных.

5. Самостоятельная работа обучающихся.

Таблица 5.1

Виды работ	*Количество часов*
Работа с литературой, решение задач по кристаллографии, выполнение заданий в компьютерном классе с использованием программ визуализации и обработки структурных данных, с использованием Кембриджского банка структурных данных и сопутствующих программ, с использованием Международных кристаллографических таблиц.	42

6. Образовательные технологии.

Преподавание дисциплины предусматривает следующие формы организации учебного процесса:

- Лекции.
- Самостоятельная работа аспиранта.

Лекции – это основная форма обучения. Часть каждой лекции проводится в интерактивной форме, что позволяет осуществлять постоянный контроль за качеством усвоения лекционного материала и успеваемостью аспирантов.

Самостоятельная работа аспиранта – работа с литературой, решение задач по кристаллографии, выполнение заданий в компьютерном классе с использованием программ визуализации и обработки структурных данных, с использованием Кембриджского банка структурных данных и сопутствующих программ, с использованием Международных кристаллографических таблиц. Прием заданий преподавателем позволяет контролировать приобретение соответствующих умений и навыков.

7. Фонд оценочных средств для текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины

7.1. Формы текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине.

Текущий контроль осуществляется на лекциях в форме устного опроса и сдачи заданий. Цель устного контрольного опроса - оценка самостоятельной работы аспирантов по вопросам тем теоретического содержания. Цель сдачи заданий – контроль за приобретением соответствующих умений и навыков.

Промежуточная аттестация по итогам освоения дисциплины проводится в виде зачета. Шкала оценивания: «зачет-незачет». Зачет проводится в форме устного собеседования с учетом сдачи заданий.

7.2. Контролирующие материалы.

Примеры заданий по курсу «Теоретические основы строения кристаллов»:

Выполнение упражнений по освоению символьного, графического и матричного представлений операций симметрии и освоению представления пространственных групп симметрии в Международных кристаллографических таблицах. Например: составить таблицы умножения для предложенных групп симметрии, определить тип решетки по предложенным ограничениям, налагаемым на значения параметров, определить тип

решетки, которая возникает при растяжении или сжатии предложенных структур по определенным направлениям, найти операции симметрии, присутствие которых с необходимостью вытекает из наличия перечисленных операций симметрии и т. д.

По предложенным проекциям расположения элементов симметрии записать символ соответствующей пространственной группы, записать координаты точки общего положения. Определить для этой ПГС все позиции частного положения (записать координаты и кратность).

По перечисленным операциям симметрии определить пространственную группу кристаллической структуры некоторого соединения, а по координатам атомов определить все геометрические характеристики связей в этой структуре, в случае молекулярных кристаллов определить тип и геометрические характеристики межмолекулярных взаимодействий.

Провести поиск структур по предложенному классу соединений в Кембриджском банке структурных данных. Привести статистику геометрических характеристик внутри- и межмолекулярных связей определенного типа в выбранном классе соединений. Выделить типичные структурные мотивы, описать симметрию мотивов.

Вопросы для подготовки к зачету:

1. Геометрия кристаллического пространства, кристаллическая решетка.
2. Обратная решетка.
3. Преобразование координат точек и индексов плоскостей при изменении базиса кристаллографической системы координат.
4. Матричный метод описания операций симметрии.
5. Основные положения теории групп. Кристаллографические точечные группы симметрии.
6. Кристаллические системы. Предельные группы симметрии.
7. Орбиты кристаллографических групп.Кристаллические многогранники, простые формы.
8. Решетки Бравэ. Соотношения между примитивными и центрированными элементарными ячейками.
9. Пространственные группы симметрии низшей категории.
10. Пространственные группы симметрии средней категории.
11. Кубические пространственные группы.
12. Соотношение группа – подгруппа – надгруппа.
13. Структурные типы. Симметрийный аспект структурных фазовых превращений.
14. Международные кристаллографические таблицы.
15. Кристаллоструктурные базы данных.
16. Международные стандартные представления кристаллоструктурных данных.

7.3. Критерии оценивания.

Таблица 7.3

Оценка	Критерии оценки
«Зачет»	Аспирант логично строит ответ. Ответ может содержать ряд несущественных неточностей, но основные понятия раскрываются правильно. Аспирант в целом уверенно отвечает на дополнительные вопросы, хотя может наблюдаться некоторая неуверенность или неточность при ответе на дополнительные вопросы. Аспирант при ответе грамотно использует научную лексику.
«Незачет»	Аспирант не может раскрыть содержание основных понятий и теорий. Проявляет стремление подменить научное обоснование проблемы рассуждением бытового плана. Ответ содержит ряд

	серьезных неточностей. Преобладает бытовая лексика.

8. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины.

8.1. Основная литература:

1. Бокий Г.Б. *Кристаллохимия.* М.: Наука, 1971. (ЭБ ИХТТМ СО РАН).
2. Чупрунов Е. В., Хохлов А. Ф., Фадеев М. А. *Основы кристаллографии.* М.: Физматлит, 2006.
3. *International tables for crystallography. Vol. A.* Ed. Th. Hahn. Kluwer Academic Publishers, 2002. Изд. 5-е.
4. Giacovazzio C., Monaco H. L., Artiolu G., et al. *Fundamentals of crystallography.* Oxford University Press, 2002.

8.2. Дополнительная литература:

1. Урусов В.С. *Теоретическая кристаллохимия.* М.: Изд-во МГУ, 1987.
2. Вайнштейн Б.К. *Современная кристаллография.* Т.1. Вайнштейн Б.К., Фридкин В.М., Инденбом В.Л. *Современная кристаллография.* Т. 2. М.: Наука, 1979.
3. Китайгородский А.И. *Молекулярные кристаллы*. М.: Наука, 1971.

8.3. Программное обеспечение и Интернет-ресурсы:

Программное обеспечение

1. MS Windows 7.
2. Офисный пакет LibreOffice.
3. Антивирусная программа Dr.Web.
4. Программа просмотра файлов PDF Acrobat Reader.
5. Интернет–браузеры Mozilla Firefox, Google Chrome, Opera.

Профессиональные базы данных и информационные справочные системы

- Сайт Кембриджского банка структурных данных (часть программного обеспечения доступна для бесплатного скачивания, например, программа визуализации кристаллических структур Mercury) http://www.ccdc.cam.ac.uk
- Кристаллографический сервер, содержащий кристаллографическую информацию (http://www.cryst.ehu.es);
- Научная электронная библиотека elibrary.ru (http://elibrary.ru);
- Реферативно-библиографическая и наукометрическая (библиометрическая) база данных Web of Science http://apps.webofknowledge.com/UA_GeneralSearch_input.do?product=UA&search_mode=GeneralSearch&SID=N1ueGpOv8ndHm2xXVE2&preferencesSaved=
- Реферативно-библиографическая и наукометрическая (библиометрическая) база данных Scopus https://www.scopus.com/search/form.uri?display=basic
- Полнотекстовая база данных ScienceDirect – ведущая информационная платформа Elsevier для ученых, преподавателей, студентов (https://www.sciencedirect.com);
- Google Scholar – полнотекстовый поиск в научных источниках – журналах, тезисах, книгах (https://scholar.google.ru);
- DOAJ – Directory of Open Access Journal – каталог журналов открытого доступа (www.doaj.org) - сайт, на котором расположены ссылки на открытые полнотекстовые научные журналы по всем темам и на всех языках;
- Электронные ресурсы удаленного доступа ГПНТБ России http://www.gpntb.ru/elektronnye-resursy-udalennogo-dostupa.html
- Электронные каталоги и базы данных ГПНТБ СО РАН

http://webirbis.spsl.nsc.ru/irbis64r_01/cgi/cgiirbis_64.exe?C21COM=F&I21DBN=CAT&P21DBN=CAT

- Электронная библиотека ГПНТБ СО РАН http://www.spsl.nsc.ru/win/nelbib/index-new1.html.

9. Материально-техническое обеспечение дисциплины.

- Ноутбук, медиа-проектор, экран.
- Программное обеспечение для демонстрации слайд-презентаций.
- Компьютерный класс с установленными программами визуализации и обработки структурных данных.

10. Язык преподавания

Дисциплина преподается на русском языке.