

БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

УТВЕРЖДАЮ

Ректор Белорусского
государственного университета
А.Д.Король

25 октября 2024 г.

Регистрационный №1767/б.



ОСНОВЫ СИММЕТРИИ В ХИМИИ

Учебная программа учреждения образования по учебной дисциплине для
специальности:

6-05-0531 01 Химия

Профилизация: Фармацевтическая деятельность

2024 г.

Учебная программа составлена на основе ОСВО 6-05-0531-01-2023, учебного плана №6-5.5-41/02 от 15.05.2023.

СОСТАВИТЕЛЬ:

Н. Е. Боборико, доцент кафедры неорганической химии химического факультета Белорусского государственного университета, кандидат химических наук, доцент.

РЕЦЕНЗЕНТ:

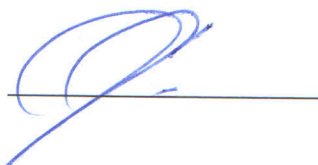
С. А. Усанов, главный научный сотрудник лаборатории белковой инженерии Государственного научного учреждения «Институт биоорганической химии Национальной академии наук Беларуси», член-корреспондент НАН Беларуси, доктор химических наук, профессор.

РЕКОМЕНДОВАНА К УТВЕРЖДЕНИЮ:

Кафедрой неорганической химии БГУ
(протокол № 2 от 19.09.2024)

Научно-методическим Советом БГУ
(протокол № 3 от 24.10.2024)

Заведующий кафедрой



Свиридов Д.В.

ПОЯСНИТЕЛЬНАЯ ЗАПИСКА

Цели и задачи учебной дисциплины

Цель учебной дисциплины – изложение базовых представлений о симметрии в различных объектах и квантовых системах, являющихся предметом рассмотрения в химии.

Задачи учебной дисциплины:

1. Формирование знаний об элементах симметрии и операциях симметрии в химических молекулах, о точечных группах симметрии;
2. Формирование знаний о пространственной симметрии и пространственных группах симметрии кристаллических тел;
3. Получение практических навыков прогнозирования свойств веществ, исходя из их структуры и уровня симметрии.

Место учебной дисциплины в системе подготовки специалиста с высшим образованием.

Учебная дисциплина «Основы симметрии в химии» относится к модулю «Предпрофессиональные знания» компонента учреждения образования.

Дисциплина «Основы симметрии в химии» использует в качестве теоретической основы содержание дисциплин «Неорганическая химия», «Органическая химия».

Требования к компетенциям

Освоение учебной дисциплины «Основы симметрии в химии» должно обеспечить формирование следующих компетенций:

СК. Демонстрировать базовые знания в области фармацевтической деятельности, необходимые для более глубокого изучения профильных дисциплин.

В результате освоения учебной дисциплины студент должен:

знать:

- Современные представления о симметрии молекул и кристаллических тел;
- Элементы симметрии и операции симметрии, используемые для описания химических объектов;
- Общие принципы влияния химической связи на характер кристаллической структуры вещества.

уметь:

- Определять точечную группу симметрии молекулы;
- Определять пространственную группу симметрии кристаллической структуры;
- Описывать кристаллические структуры, в том числе в терминах плотнейших шаровых упаковок;
- Делать заключение об оптической активности соединения на основании представлений о симметрии его молекул;
- Проводить простейшие кристаллографические расчеты (плотность кристаллических веществ, плотность упаковок, размеры элементарных ячеек, атомов, ионов, длин химических связей).

иметь навык:

- Пользоваться понятийным аппаратом химической симметрии;
- Построения стереографических проекций элементов симметрии;
- Использования общих представлений симметрии о подходах к решению структурно-химических задач.

Структура учебной дисциплины

Дисциплина изучается в 4 семестре. Всего на изучение учебной дисциплины «Основы симметрии в химии» отведено:

- для очной формы получения высшего образования – 90 часов, в том числе 36 аудиторных часов, из них: лекции – 26 часов, семинарские занятия – 8 часов, управляемая самостоятельная работа – 2 часа.

Трудоемкость учебной дисциплины составляет 3 зачетные единицы.

Форма промежуточной аттестации – зачет.

СОДЕРЖАНИЕ УЧЕБНОГО МАТЕРИАЛА

Введение

Симметрия в природе, физических системах, химических объектах. Общие тенденции влияния симметрии на физические свойства веществ. Симметрия молекул, симметрия кристаллических тел. Представления о теории групп как математическом описании симметрии.

Раздел 1. Точечные группы симметрии

Тема 1.1. Закрытые элементы симметрии.

Идентичность, поворотные оси симметрии, плоскости зеркального отражения, центр инверсии, зеркально-поворотные оси симметрии. Операции симметрии. Обозначения элементов симметрии с использованием номенклатуры Шенфлиса и международной номенклатуры (Германа-Могена).

Тема 1.2. Взаимодействие элементов симметрии.

Стереографические проекции элементов симметрии. Теоремы о сложении элементов симметрии. Точечные группы симметрии и 32 кристаллографические точечные группы симметрии. Обозначение групп симметрии.

Тема 1.3. Влияние симметрии молекул на их свойства и свойства вещества.

Симметрия молекул и свойства молекул. Влияние симметрии молекул на полярность и хиральность молекул, способность образовывать энантиомеры.

Раздел 2. Пространственные группы симметрии

Тема 2.1. Открытые элементы симметрии.

Плоскости скольжения, винтовые оси симметрии. Элементарные ячейки и пространственные решетки. Ячейки Браве. Кристаллографические категории и сингонии.

Тема 2.2. Вывод пространственных групп симметрии.

Сочетание открытых и закрытых элементов симметрии. Понятие о пространственных группах симметрии. Правильная система точек.

Тема 2.3. Пространственная кристаллическая решетка.

Параметры кристаллической решетки. Индексы узлов, рядов и плоскостей решетки (индексы Миллера). Кристаллическая решетка вещества как дифракционная решетка для падающего излучения или потока частиц.

Раздел 3. Описание кристаллических веществ в терминах плотнейших шаровых упаковок

Тема 3.1. Теория плотнейших упаковок.

Плотнейшие шаровые упаковки. Плотнейшие шаровые кладки. Гексагональная плотнейшая упаковка, кубическая плотнейшая упаковка. Плотная шаровая упаковка. Расчет плотности упаковки.

Тема 3.2. Плотность упаковки и пустоты.

Виды, размеры и положения пустот в плотных и плотнейших шаровых упаковках.

Тема 3.3. Влияние симметрии на физические свойства кристаллов.

Зависимость физических свойств кристаллов от их симметрии. Анизотропия свойств кристаллов. Пиро- и пьезоэлектрические свойства.

Раздел 4. Основные типы кристаллических структур

Тема 4.1. Кристаллическая структура и химическая связь.

Влияние типа химической связи на характер кристаллической структуры. Симметрия химической связи. Кристаллические структуры простых веществ.

Тема 4.2. Кристаллическая решетка ковалентных и ионных соединений.

Кристаллические структуры соединений с преимущественно ковалентным характером связи и преимущественно ионным характером химической связи.

Тема 4.3. Кристаллохимические явления.

Изоструктурность. Изоморфизм. Полиморфизм. Политипия.

Тема 4.4. Молекулярные кристаллы и кристаллические биополимеры.

Особенности химической природы, строения и свойств молекулярных кристаллов и кристаллов органических веществ. Строение и свойства кристаллических биополимеров.

Тема 4.5. Строение жидких кристаллов.

Характеристика жидкокристаллического состояния вещества. Особенности химической природы, строения и свойств веществ, способных существовать в жидкокристаллическом состоянии.

Раздел 5. Дефекты в кристаллических структурах

Тема 5.1. Основные типы дефектов в кристаллических структурах.

Собственные и примесные дефекты. Точечные дефекты. Протяженные дефекты. Дислокации. Дефекты упаковки. Поверхность кристалла как дефект строения.

Тема 5.2. Влияние дефектности кристаллической структуры на свойства вещества

Нестехиометрия кристаллов. Влияние точечных дефектов на физические и физико-химические свойства вещества.

УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКАЯ КАРТА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ

Очная форма получения высшего образования с применением дистанционных образовательных технологий (ДОТ)

Номер раздела, темы	Название раздела, темы	Количество аудиторных часов						Форма контроля
		Лекции	Практические занятия	Семинарские занятия	Лабораторные занятия	Иное	Количество часов УСР	
1	2	3	4	5	6	7	8	9
	Введение	2						
1	Точечные группы симметрии							
1.1	Закрытые элементы симметрии	2						
1.2	Взаимодействие элементов симметрии	2						
1.3	Влияние симметрии молекул на их свойства и свойства вещества	2					2	контрольная работа
2	Пространственные группы симметрии							
2.1	Открытые элементы симметрии	2						
2.2	Вывод пространственных групп симметрии	2						
2.3	Пространственная кристаллическая решетка			2				контрольная работа
3	Описание кристаллических веществ в терминах плотнейших шаровых упаковок							
3.1	Теория плотнейших упаковок	2						
3.2	Плотность упаковки и пустоты			2				контрольная работа
3.3	Влияние симметрии на физические свойства кристаллов	2						
4	Основные типы кристаллических структур							
4.1	Кристаллическая структура и химическая связь	2						
4.2	Кристаллическая решетка ковалентных и ионных соединений	2						

4.3	Кристаллохимические явления	1						
4.4	Молекулярные кристаллы и кристаллические биополимеры	1						
4.5	Строение жидких кристаллов			2				тест
5	Дефекты в кристаллических структурах							
5.1	Основные типы дефектов в кристаллических структурах	2						
5.2	Влияние дефектности кристаллической структуры на свойства вещества	2		2				контрольная работа, реферат

ИНФОРМАЦИОННО-МЕТОДИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ

Основная литература

1. Поклонский, Н. А. Конечные группы симметрии. Теория и приложения / Н. А. Поклонский, А. Т. Власов, С. А. Вырко. – Минск: Беларуская навука, 2024. – 507 с.
2. Сизова, О. В. Молекулярная симметрия в неорганической и координационной химии : учебное пособие для вузов / О. В. Сизова, Н. В. Иванова, А. А. Ванин. — 4-е изд., стер. — Санкт-Петербург : Лань, 2025. — 276 с.

Дополнительная литература

1. Поклонский, Н. А. Конечные группы симметрии : основы и приложения : [учеб. пособие] / Н. А. Поклонский, А. Т. Власов, С. А. Вырко. - Минск : Беларуская энцыклапедыя імя П. Броўкі, 2011. - 463 с.
2. Каратаева, Т. П. Основы кристаллохимии: Учеб. пособие / Т. П. Каратаева. – Минск: БГУ, 2001. – 225 с.
3. Шрайвер, Д. Неорганическая химия : в 2 т. Т. 1 / Д. Шрайвер, П. Эткинс ; пер. с англ. М. Г. Розовой, С. Я. Истомина, М. Е. Тамм ; под ред. В. П. Зломанова. – Москва : Мир, 2013. – 679 с.
4. Шрайвер, Д. Неорганическая химия : в 2 т. Т. 2 / Д. Шрайвер, П. Эткинс ; пер. с англ. М. Г. Розовой, С. Я. Истомина, М. Е. Тамм ; под ред. В. П. Зломанова. – Москва : Мир, 2013. – 486 с.
5. Филатов, С. К. Общая кристаллохимия : учебник / С. К. Филатов, С. В. Кривовичев, Р. С. Бубнова. – СПб.: Изд-во С.-Петербур. ун-та, 2018. – 276 с.
6. Филатов, С. К. Систематическая кристаллохимия : учебник / С. К. Филатов, С. В. Кривовичев, Р. С. Бубнова. – СПб.: Изд-во С.-Петербур. ун-та, 2019. – 230 с.
7. Зоркий, П. М. Симметрия молекул и кристаллических структур / П. М. Зоркий ; под ред. М. А. Порай-Кошица. – Москва : Изд-во МГУ, 1986. – 232 с.
8. Харгиттай, И. Симметрия глазами химика: Пер. с англ. / И. Харгиттай, М. Харгиттай – М.: Мир, 1989. – 496 с.
9. Воробьева, Т. Н. Химия твердого тела : учебник / Т. Н. Воробьева, А. И. Кулак, Т. В. Свиридова. – Минск : БГУ, 2011 – 320 с.

Перечень рекомендуемых средств диагностики и методика формирования итоговой отметки

При изучении дисциплины рекомендованы следующие средства диагностики: тестовые задания открытого и закрытого типа; контрольные работы, содержащие расчетные задачи; реферат, представляющий собой краткий анализ современного состояния проблемы по выбранной теме.

Формой промежуточной аттестации учебным планом предусмотрен зачет.

Для формирования итоговой отметки по учебной дисциплине используется модульно-рейтинговая система оценки знаний студента, дающая возможность проследить и оценить динамику процесса достижения целей обучения. Рейтинговая система предусматривает использование весовых коэффициентов для текущей и промежуточной аттестации студентов по учебной дисциплине.

Формирование итоговой отметки в ходе проведения контрольных мероприятий текущей аттестации (примерные весовые коэффициенты, определяющие вклад текущей аттестации в отметку при прохождении промежуточной аттестации):

- выполнение тестовых заданий – 10 %;
- письменные контрольные работы по отдельным темам – 70 %;
- написание реферата – 20 %.

Итоговая отметка по дисциплине рассчитывается на основе итоговой отметки текущей аттестации (рейтинговой системы оценки знаний) 40 % и экзаменационной отметки 60 %.

Примерный перечень заданий для управляемой самостоятельной работы студентов

Тема 1.3. Влияние симметрии молекул на их свойства и свойства вещества (2ч.)

Выполнение заданий по определению элементов симметрии молекул различной химической природы, определению их группы симметрии, установлению зависимости полярности и хиральности групп от элементов симметрии, характерных для молекулы.

(Форма контроля – контрольная работа).

Примерная тематика семинарских занятий

Семинар №1. Параметры кристаллической решетки. Индексы узлов, рядов и плоскостей решетки (индексы Миллера).

Семинар №2. Виды, размеры и положения пустот в плотных и плотнейших шаровых упаковках.

Семинар №3. Строение жидких кристаллов.

Семинар №4. Влияние точечных дефектов на физические и химические свойства вещества.

Описание инновационных подходов и методов к преподаванию учебной дисциплины

При организации образовательного процесса используется **практико-ориентированный подход**, который предполагает:

- освоение содержание образования через решение практических задач;
- приобретение навыков эффективного выполнения разных видов профессиональной деятельности;
- ориентацию на генерирование идей, реализацию групповых студенческих проектов, развитие предпринимательской культуры;
- использованию процедур, способов оценивания, фиксирующих сформированность профессиональных компетенций.

При организации образовательного процесса также используется **метод учебной дискуссии**, который предполагает участие студентов в целенаправленном обмене мнениями, идеями для предъявления и/или согласования существующих позиций по определенной проблеме. Данный метод используется при проведении семинарских занятий.

Использование метода обеспечивает появление нового уровня понимания изучаемой темы, применение знаний (теорий, концепций) при решении проблем, определение способов их решения.

Помимо этого, при организации образовательного процесса **используются методы и приемы развития критического мышления**, которые представляют собой систему, формирующую навыки работы с информацией в процессе чтения и письма; понимания информации как отправного, а не конечного пункта критического мышления.

Методические рекомендации по организации самостоятельной работы обучающихся

Для организации самостоятельной работы студентов по учебной дисциплине используются современные информационные ресурсы: на образовательном портале educhem.bsu.by размещен комплекс учебных и учебно-методических материалов (учебно-программные материалы, материалы текущего контроля и текущей аттестации, позволяющие определить соответствие учебной деятельности обучающихся требованиям образовательного стандарта высшего образования и учебно-программной документации, в том числе вопросы для подготовки к зачету, задания, тесты, вопросы для самоконтроля, список рекомендуемой литературы, информационных ресурсов).

Одной из форм контроля знаний при изучении дисциплины «Основы симметрии в химии» является написание и представление реферата. Примерные темы рефератов представлены ниже.

Примерные темы рефератов

1. Классификация конечных точечных групп.
2. Операции симметрии и преобразование декартовых координат.
3. Симметрия кристаллов и анизотропия электропроводности.
4. История развития теории групп как математического фундамента точечных групп симметрии.
5. Квазикристаллы.
6. Материалы, обладающие свойствами жидких кристаллов. Современные области применения жидких кристаллов.
7. Вывод 230 пространственных групп симметрии.
8. Тензорное описание физических свойств кристаллов. Зависимость вида тензора от категории симметрии.
9. Центры окраски как точечные дефекты кристаллической структуры.
10. Краевые и винтовые дислокации и их влияние на свойства вещества.
11. Особенности физико-химических свойств поверхности кристалла в сравнении с его объемом.
12. Влияние типа химической связи в веществе на склонность к образованию нестехиометрических соединений.
13. Структурный тип шпинели.
14. Структурный тип обратной шпинели.
15. Твердые растворы внедрения и замещения.
16. Симметрия химической связи и концепция гибридизации атомных орбиталей.
17. Симметрия структуры и пьезоэлектрический эффект.
18. Кристаллические полимеры.
19. Современные способы исследования кристаллической структуры биомолекул.
20. Современные методы получения кристаллов биомолекул.

Примерный перечень вопросов к зачету

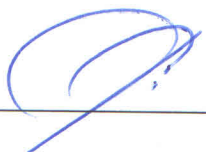
1. Закрытые элементы симметрии.
2. Операции симметрии, соответствующие закрытым элементам симметрии.
3. Стереографические проекции элементов симметрии.
4. Теоремы о сложении элементов симметрии.
5. Точечные группы симметрии. Алгоритм определения точечной группы симметрии молекулы.
6. Кристаллографические точечные группы симметрии.
7. Связь симметрии молекулы с ее полярностью и хиральностью.
8. Открытые элементы симметрии.
9. Элементарная ячейка и пространственная решетка.
10. Ячейки Браве.
11. Кристаллографические категории.

12. Кристаллографические сингонии.
13. Сочетание элементов симметрии с трансляциями.
14. Пространственные группы симметрии.
15. Индексы узлов, рядов и плоскостей кристаллической решетки (индексы Миллера).
16. Теория плотнейших упаковок и плотнейших шаровых кладок.
17. Гексагональная плотнейшая упаковка.
18. Кубическая плотнейшая упаковка.
19. Плотность упаковки и плотность вещества.
20. Виды пустот в плотных и плотнейших шаровых упаковках.
21. Положения пустот в плотных и плотнейших шаровых упаковках.
22. Анизотропия свойств кристаллов.
23. Пиро- и пьезоэлектрические свойства кристаллических веществ и их связь с симметрией.
24. Влияние типа химической связи на характер кристаллической структуры.
25. Симметрия химической связи.
26. Кристаллические структуры простых веществ.
27. Кристаллические структуры соединений с преимущественно ковалентным характером связи.
28. Кристаллические структуры соединений с преимущественно ионным характером связи.
29. Явление изоморфизма. Примеры.
30. Явление полиморфизма. Примеры.
31. Явление политипии. Примеры.
32. Явление изоструктурности. Примеры.
33. Особенности симметрии молекулярных кристаллов.
34. Строение кристаллических биополимеров.
35. Строение жидких кристаллов.
36. Собственные и примесные дефекты. Влияние на свойства вещества.
37. Точечные дефекты.
38. Протяженные дефекты. Дислокации.
39. Дефекты упаковки. Поверхность кристалла как дефект строения.
40. Нестехиометрия кристаллических веществ и ее влияние на свойства вещества.

ПРОТОКОЛ СОГЛАСОВАНИЯ УЧЕБНОЙ ПРОГРАММЫ УО

Название учебной дисциплины, с которой требуется согласование	Название кафедры	Предложения об изменениях в содержании учебной программы учреждения высшего образования по учебной дисциплине	Решение, принятое кафедрой, разработавшей учебную программу (с указанием даты и номера протокола)
Физические методы исследования	Кафедра неорганической химии	Изменений не требуется	Протокол № 2 от 19.09.2024

Заведующий кафедрой
неорганической химии
член-корреспондент НАН Беларуси
д.х.н., профессор



Д.В.Свиридов

« 19 » сентября 2024 г.

**ДОПОЛНЕНИЯ И ИЗМЕНЕНИЯ К УЧЕБНОЙ ПРОГРАММЕ ПО
ИЗУЧАЕМОЙ УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЕ**

на ____ / ____ учебный год

№ п/п	Дополнения и изменения	Основание

Учебная программа пересмотрена и одобрена на заседании кафедры
_____ (протокол № ____ от _____ 20_ г.)

Заведующий кафедрой

УТВЕРЖДАЮ

Декан факультета
