

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования  
«Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова»  
Химический факультет

УТВЕРЖДАЮ

И.о. декана химического факультета,  
Чл.-корр. РАН, профессор



/С.Н. Калмыков/

«30» августа 2019 г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)**

**Избранные главы неорганической химии:  
рентгеноструктурный анализ монокристаллов**

**Уровень высшего образования:**  
Магистратура

---

**Направление подготовки (специальность):**

04.04.01 Химия

**Направленность (профиль) ОПОП:**

Неорганическая химия

**Форма обучения:**

очная

---

Рабочая программа рассмотрена и одобрена  
Учебно-методической комиссией факультета  
(протокол №3 от 13.05.2019)

Москва 2019

Рабочая программа дисциплины (модуля) разработана в соответствии с самостоятельно установленным МГУ образовательным стандартом (ОС МГУ) для реализуемых основных профессиональных образовательных программ высшего образования по направлению подготовки 04.04.01 «Химия» (программа магистратуры) в редакции приказа МГУ от 30 августа 2019 г., №1033.

Год (годы) приема на обучение 2019/2020, 2020/2021

1. Место дисциплины (модуля) в структуре ООП: вариативная часть ООП, блок ПД.
2. Планируемые результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников). Соответствие результатов обучения по данному элементу ОПОП результатам освоения ОПОП (в форме компетенция – индикатор - ЗУВ) указано в Общей характеристике ОПОП.

Компетенция	Индикатор достижения	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)
<p><b>СПК-5.М</b> Способен обоснованно выбирать и применять современные методы исследования состава, структуры и свойств неорганических веществ и материалов, знание теоретических основ этих методов и основных принципов работы приборов для выбора параметров проведения эксперимента, обработки и интерпретации полученных результатов</p>	<p><b>СПК-5.М.1</b> Предлагает методы исследования состава, структуры и свойств неорганических веществ и материалов, адекватные поставленной задаче</p>	<p><b>Знать</b> теоретические основы, практические и методологические особенности методов исследования неорганических веществ.</p> <p><b>Уметь:</b> выбирать оптимальный набор методов для решения конкретной задачи по изучению неорганических веществ и материалов</p> <p><b>Уметь</b> выбрать условия проведения исследования исходя из методологических особенностей метода, подготовить образец к анализу.</p> <p><b>Владеть</b> программным обеспечением методов исследования.</p> <p><b>Владеть:</b> информацией о возможностях методов, их точности и ограничениях, иметь представление о приемах подготовки образцов, задании параметров проведения эксперимента, методах регистрации и обработки экспериментальных результатов</p>

3. Объем дисциплины (модуля) составляет **2** зачетных единицы, всего **72** часа, из которых **40** часов составляет контактная работа студента с преподавателем (19 часов занятия лекционного типа, 19 часов – занятия семинарского типа, 2 часа – промежуточный контроль успеваемости), **32** часа составляет самостоятельная работа студента.

4. Входные требования для освоения дисциплины (модуля), предварительные условия.

Требуется освоение дисциплин «Неорганическая химия», «Общая физика», «Элементы строения вещества», «Физическая химия», «Кристаллохимия» в объеме, преподаваемом на Химическом факультете МГУ.

Обучающийся должен

**Знать:** химические свойства неорганических соединений и основные закономерности в их изменении, основные законы физики, основные операторы физических величин, основы учения о фазовых равновесиях, основные подходы к описанию строения вещества.

**Уметь:** применять знания вышеуказанных разделов для описания химических объектов и их взаимодействий.

**Владеть:** современными представлениями о строении вещества и факторах, влияющих на возможность протекания химических реакций.

5. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам.

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины (модуля),  форма промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)	Всего (часы)	В том числе								
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем), часы из них						Самостоятельная работа обучающегося, часы из них		
		Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа	Групповые консультации	Индивидуальные консультации	Учебные занятия, направленные на проведение текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации	Всего	Выполнение домашних заданий	Подготовка рефератов и т.п.	Всего
Тема 1. Теоретические основы дифракции. Методы решения структур.	<b>23</b>	7	8				<b>15</b>	8		<b>8</b>
Тема 2. Постановка и проведение монокристалльного дифракционного эксперимента. Программное обеспечение и общие подходы определения структур химических соединений.	<b>35</b>	12	11				<b>23</b>	12		<b>12</b>
Промежуточная аттестация <i>зачет</i>	<b>14</b>					2	<b>2</b>			<b>12</b>
<b>Итого</b>	<b>72</b>	<b>19</b>	<b>19</b>			<b>2</b>	<b>40</b>	<b>20</b>		<b>32</b>

#### 6. Образовательные технологии:

- использование средств дистанционного сопровождения учебного процесса;
- преподавание дисциплин в форме авторских курсов по программам, составленным на основе результатов исследований научных школ МГУ.

#### 7. Учебно-методические материалы для самостоятельной работы по дисциплине (модулю):

Курс имеет электронную версию для презентации. Лекции читаются с использованием современных мультимедийных возможностей и проекционного оборудования. Занятия могут проходить на русском или английском языках. Для самоподготовки предлагается список вопросов по каждой теме, контрольные задания и перечень вопросов к зачету.

#### 8. Ресурсное обеспечение:

- Перечень основной и вспомогательной учебной литературы ко всему курсу

Со всех компьютеров МГУ организован доступ к полным текстам научных журналов и книг на русском и иностранных языках. Доступ открыт по IP-адресам, логин и пароль не требуются: <http://nbmgu.ru/>

#### Основная литература

1. М.А.Порай-Кошиц. *Основы рентгеноструктурного анализа*. Изд. "Высшая школа", М., 1989.
2. Л.А. Асланов, Е.Н. Треушников. *Основы теории дифракции рентгеновских лучей*. М.: Изд-во МГУ, 1985.
3. Д.Ю.Пушаровский. *Рентгенография минералов*. ЗАО "Геоинформмарк", М., 2000

#### Дополнительная литература

1. Г.В.Фетисов, Синхротронное излучение, М., ФИЗМАТЛИТ, 2007.
2. Современная кристаллография. Под ред. Б.К.Вайнштейна. Изд. "Наука", М., 1980.
3. Fundamentals of Crystallography. Second edition. Под ред. С.Giacovazzo. Oxford Press, NY, 2002.
4. Ю.К.Егоров-Тисменко, Г.П.Литвинская, Теория симметрии кристаллов, ГЕОС, М., 2000.
5. A.J.Blake, W.Clegg, J.M.Cole, J.S.O.Evans, P.Main, S.Parsoms, D.J.Watkin, – Crystal Structure Analysis. Principles and Practice – Oxford University Press, 2009.
6. M.Ladd, R.Palmer, – Structure Determination by X-ray Crystallography. Analysis by X-rays and neutrons – Springer, 2013.
7. Л.А.Асланов. Инструментальные методы рентгеноструктурного анализа. — М.: Изд-во Моск. ун-та, 1983.
8. J.M.Bijvoet, A.F.Peerdeeman, A.J.van Bommel, – Determination of the absolute configuration of optically active compounds by means of X-rays, – Nature, 1951, 271-272.
9. T.Jannsen, G.Chapuis, M. De Boissieu, – Aperiodic Crystals. From Modulated Phases to Quasicrystals, – Oxford University Press, New York, 2007.
10. Ladd M., Palmer R. – Crystal Structure Determination by X-ray Crystallography. – Springer, New York, 2013 (Fifth edition).
11. В.А.Артамонов, Ю.Л.Словохотов, Группы и их приложения в физике, химии, кристаллографии, М., Академия, 2005.

#### Периодическая литература

1. P.M. De Wolff, – The Pseudo-Symmetry of Modulated Crystal Structures, – Acta Crystallogr. A30 (1974), 777-785.
2. S.R.Hall, – Space-group notation with an explicit origin – Acta Crystallogr., A37 (1981), 517-525.
3. A.Janner, – Towards a more comprehensive crystallography – Acta Crystallogr., B51 (1995), 386-401.
4. A.Janner, – Introduction to a general crystallography – Acta Crystallogr., A57 (2001), 378-388.
5. G.Bricogne, – Maximum entropy and the foundations of direct methods, – Acta Crystallogr., A40 (1984), 410-445.
6. Ch.Gilmore, – Maximum Entropy and Bayesian Statistics in Crystallography: a Review of Practical Applications, – Acta Crystallogr., A52 (1996), 561-589.
7. S.van Smaalen, L.Palatinus, M.Schneider, – The maximum-entropy method in superspace –Acta Crystallogr., A59 (2003), 459-469.
8. V. Favre-Nicolin, R. Cerny, – FOX, 'free objects for crystallography': a modular approach to ab initio structure determination from powder diffraction, – *J. Appl. Cryst.* **35** (2002), 734-743.
9. G.Oszálanyi, A. Sütő, – Ab initio structure solution by charge flipping, – Acta Crystallogr., A60, 134-141.
10. G.Oszálanyi, A. Sütő,– The charge flipping algorithm – Acta Crystallogr., A64 (2008), 123-134.
11. L.Palatinus,– The charge flipping algorithm in crystallography – Acta Crystallogr., B69 (2013), 1-16.
12. P.Coppens, P.Lee, G.Yan, Sh.Hwo-Shuenn, – Application of the selective atom diffraction method to the cation distribution in high T<sub>c</sub> bismuth cuprates, – *J. Physics and Chemistry of Solids*, 52 (1991), 1267-1272.

#### **Интернет ресурсы:**

- Сайт Международного союза кристаллографии: [www.iucr.org](http://www.iucr.org)
- Сайт разработчиков программного комплекса JANA: <http://jana.fzu.cz/>

- Материально-техническое обеспечение: специальных требований нет, занятия проводятся в обычной аудитории, оснащенной доской и мелом (маркерами)

9. Язык преподавания – русский

10. Преподаватели: Миронов Андрей Вениаминович, к.х.н., старший научный сотрудник.

#### **Фонды оценочных средств, необходимые для оценки результатов обучения**

Образцы оценочных средств для текущего контроля усвоения материала и промежуточной аттестации - зачета. На зачете проверяется достижение промежуточных индикаторов компетенций, перечисленных в п.2.

#### **Вопросы для самостоятельной работы и подготовки к зачету:**

1. Перечислите систематические погасания, характерные для плоскостей скользящего отражения (винтовых осей) разного типа.
2. Перечислите классы Лауэ кристаллов кубической, гексагональной, тригональной и тетрагональной сингонии.

3. Назовите основные положения, лежащие в основе прямых методов определения структуры, и область их применимости.
4. Назовите основное отличие уточнения структуры МНК от метода максимальной энтропии.
5. Какие программы используют для определения мотива структуры метод тяжелого атома?
6. В чем заключается основное преимущество метода изменения знака заряда (charge flipping) от прямых методов и методов Монте-Карло?
7. Почему для уточнения кристаллической структуры МНК требуется исходная модель?
8. Какую информацию получают из разностных синтезов электронной плотности?
9. Почему в рентгеноструктурных исследованиях позиции атомов водорода определяются с более низкой точностью, чем позиции атомов с большими атомными номерами?
10. Перечислите и охарактеризуйте критерии качества уточнения кристаллической структуры.

### Методические материалы для проведения процедур оценивания результатов обучения

Шкала оценивания знаний, умений и навыков является единой для всех дисциплин (приведена в таблице ниже)

<b>ШКАЛА И КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТА ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)</b>				
Оценка \ Результат	2	3	4	5
Знания	Отсутствие знаний	Фрагментарные знания	Общие, но не структурированные знания	Сформированные систематические знания
Умения	Отсутствие умений	В целом успешное, но не систематическое умение	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы умение (допускает неточности непринципиального характера)	Успешное и систематическое умение
Навыки (владения)	Отсутствие навыков	Наличие отдельных навыков	В целом, сформированные навыки, но не в активной форме	Сформированные навыки, применяемые при решении задач

<b>РЕЗУЛЬТАТ ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)</b>	<b>ФОРМА ОЦЕНИВАНИЯ</b>
<b>Знать</b> теоретические основы, практические и методологические особенности методов исследования неорганических веществ.	мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на семинарских занятиях и зачете
<b>Уметь:</b> выбирать оптимальный набор методов для решения конкретной задачи по изучению не-	мероприятия текущего контроля ус-

<p>органических веществ и материалов.  <b>Уметь</b> выбрать условия проведения исследования исходя из методологических особенностей метода, подготовить образец к анализу.</p>	<p>певаемости, устный опрос на семинарских занятиях и зачете</p>
<p><b>Владеть:</b> информацией о возможностях методов, их точности и ограничениях, иметь представление о приемах подготовки образцов, задании параметров проведения эксперимента, методах регистрации и обработки экспериментальных результатов.  <b>Владеть</b> программным обеспечением методов исследования.</p>	<p>мероприятия текущего контроля успеваемости, устный опрос на зачете</p>