

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего профессионального образования  
Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова  
Геологический факультет

УТВЕРЖДАЮ

Декан Геологического факультета  
академик

\_\_\_\_\_ /Д.Ю.Пушаровский/

«\_\_» \_\_\_\_\_ 20\_\_ г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ**  
**Вычислительные методы в кристаллографии**

Автор-составитель: Зубкова Н.В.

**Уровень высшего образования:**  
*Магистратура*

**Направление подготовки:**  
**05.04.01 Геология**

**Направленность (профиль) ОПОП:**  
**Геохимия**  
**Магистерская программа**  
**Кристаллография и кристаллохимия (ИМ)**

Форма обучения:

***Очная***

Рабочая программа рассмотрена и одобрена  
Учебно-методическим Советом Геологического факультета  
(протокол № \_\_\_\_\_, \_\_\_\_\_)

Москва 20\_\_

---

***На обратной стороне титула:***

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 «Геология» (*программы бакалавриата, магистратуры, реализуемых последовательно по схеме интегрированной подготовки*) в редакции приказа МГУ от 30 декабря 2016 г. №1674

Год (годы) приема на обучение – 2019.

## Цель и задачи дисциплины

Целью курса **Вычислительные методы в кристаллографии** является теоретическая подготовка и освоение практических навыков расшифровки и уточнения кристаллических структур неорганических соединений по данным монокристалльной дифрактометрии.

### Задачи

1. Изучение основных принципов структурной расшифровки.
2. Освоение комплекса программ AREN для определения и уточнения структурной модели.
3. Владение программами для изображения кристаллических структур.
4. Проверка корректности структурной модели с использованием расчета локального баланса валентных усилий.
5. Знакомство с основными принципами работы с пакетом программ Shelx.

1. Место дисциплины (модуля) в структуре ОПОП – вариативная часть, профессиональный цикл, дисциплина по выбору, курс I, семестр 2.

2. **Входные требования для освоения дисциплины (модуля), предварительные условия:** освоение дисциплин «высшая математика», «информатика», «физика», «химия общая», «кристаллография», «теоретическая кристаллохимия», «рентгенография минералов, рентгеноструктурный анализ».

3. **Результаты обучения по дисциплине (модулю), соотнесенные с требуемыми компетенциями выпускников.**

Компетенции выпускников, формируемые (полностью или частично) при реализации дисциплины (модуля):

ОПК-4.М Способность применять на практике знания фундаментальных и прикладных разделов дисциплин, определяющих профиль подготовки,

ОПК-5.М Способность использовать современные вычислительные методы и компьютерные технологии для решения задач профессиональной деятельности,

ПК-3.М Способность самостоятельно проводить научные исследования с помощью современного оборудования, информационных технологий, с использованием новейшего отечественного и зарубежного опыта

ПК-4.М Способность создавать и исследовать модели изучаемых объектов на основе использования теоретических и практических знаний в области геологии

СПК-1.М Способность использовать кристаллохимический и рентгеноструктурный анализ для теоретических и экспериментальных исследований в области кристаллографии и кристаллохимии

**Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю):**

**знать:** основные принципы структурной расшифровки и уточнения кристаллических построек.

**уметь:** с использованием современной техники и программного обеспечения осуществить сбор экспериментальных данных, провести их анализ и обработку.

**владеть:** навыками работы с современными рентгеновскими монокристалльными дифрактометрами и полученными с них данными.

4. **Формат обучения** – лекционные и семинарские занятия.

**5. Объем дисциплины (модуля)** составляет **3** з.е., в том числе **39** академических часов, отведенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (**13** часов – занятия лекционного типа, **26** часов – занятия семинарского типа, **4** часа – мероприятия текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации), **65** академических часов на самостоятельную работу обучающихся. Форма промежуточной аттестации – экзамен.

**6. Содержание дисциплины (модуля)**, структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и виды учебных занятий

**Краткое содержание дисциплины (аннотация):**

Дисциплина Вычислительные методы в кристаллографии включает следующие основные разделы:

- принципы работы современных программных комплексов для определения и уточнения кристаллических структур;
- обработка массивов экспериментальных данных, основные принципы выбора пространственной группы (использование законов закономерных погасаний);
- анализ структурной модели, использование синтеза Фурье и разностного синтеза для поиска недостающих фрагментов структуры;
- кристаллохимический анализ структуры, проверка корректности и качества структурной расшифровки и уточнения.

| Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины (модуля),<br><br>Форма промежуточной аттестации по дисциплине (модулю) | Всего (часы) | В том числе  |                            |                           |       | Самостоятельная работа обучающегося, часы *<br>(виды самостоятельной работы – эссе, реферат, контрольная работа и пр. – указываются при необходимости) |
|--|--------------|--|----------------------------|---------------------------|-------|--|
|  |              | Контактная работа<br>(работа во взаимодействии с преподавателем)<br>Виды контактной работы, часы |                            |                           |       |  |
|  |              | Занятия лекционного типа   | Занятия лабораторного типа | Занятия семинарского типа | Всего |  |
| Раздел 1. Введение.  |              | 6  |                            | 3                         | 9     |  |
| Раздел 2. Примеры расшифровки и уточнения структур. Счет в AREN-системе. Файлы информации.   |              | 2  |                            | 4                         | 6     | расчетные работы, 10 часов   |
| Раздел 3. Обработка массивов экспериментальных данных. Определение пространственной группы.  |              | 2  |                            | 7                         | 9     | расчетные работы, 10 часов   |
| Раздел 4. Получение и анализ структурной.  |              | 1  |                            | 8                         | 9     | расчетные работы, 15 часов   |
| Раздел 5. Уточнение МНК. Построение разностного синтеза электронной плотности.   |              | 1  |                            | 2                         | 3     | расчетные работы, 20 часов   |
| Раздел 6. Изображение структуры. Расчет баланса валентных усилий. Знакомство с комплексом Shelx.                                   |              | 1  |                            | 2                         | 3     | расчетные работы, 10 часов   |
| Промежуточная аттестация <i>экзамен</i>  |              |  |                            |                           |       | 4  |
| <b>Итого</b>   | <b>108</b>   |  |                            | <b>39</b>                 |       | <b>69</b>  |

## **Содержание разделов дисциплины:**

1. Введение. Знакомство с принципами работы программного комплекса AREN для определения и уточнения кристаллических структур. Введение. Знакомство с принципами работы программного комплекса AREN для определения и уточнения кристаллических структур.

2. Примеры расшифровки и уточнения структур. Счет в AREN-системе. Файлы информации.

Примеры расшифровки и уточнения кристаллических структур неорганических соединений. Организация программы и последовательность операций для счета в AREN-системе. Подготовка и формат файлов информации для дальнейших расчетов.

3. Обработка массивов экспериментальных данных. Определение пространственной группы.

Обработка массивов экспериментальных данных. Необходимость введения поправок Лоренца и поляризационного фактора при получении набора интенсивностей (квадратов структурных амплитуд). Введение поправки на поглощение. Определение возможных пространственных групп (с использованием законов погасаний). Введение экспериментальных данных, полученных с монокристалльного дифрактометра в программный комплекс. Усреднение неэквивалентных отражений. R-фактор усреднения как критерий правильности выбора дифракционного класса.

4. Получение и анализ структурной.

Получение и анализ первоначальной структурной модели с использованием прямых методов структурной расшифровки и(или) функции Патерсона. Анализ полученной структурной модели.

5. Уточнение МНК.

Уточнение структурной модели методом наименьших квадратов. Определение геометрических характеристик структуры (межатомные расстояния, углы). Построение синтезов Фурье и разностного синтеза и поиск недостающих атомных позиций.

Составление смешанных кривых атомного рассеяния. Уточнение структуры в анизотропном приближении тепловых колебаний атомов, введение поправки на экстинкцию. Расчет эллипсоидов анизотропных тепловых колебаний и эквивалентных тепловых параметров. Уточнение двойников. Другие возможности программного комплекса и дополнительные операции.

6. Изображение структуры. Расчет баланса валентных усилий. Знакомство с комплексом Shelx.

Построение кристаллической структуры в программе ATOMS и (или) DIAMOND. Расчет формального и локального баланса валентных усилий. Знакомство с основными принципами работы комплекса расчетных программ Shelx.

## **Содержание семинаров**

Обработка полученных массивов экспериментальных данных для конкретной задачи. Определение пространственной группы (с использованием законов погасаний). Введение экспериментальных данных, полученных с монокристалльного дифрактометра в программный комплекс.

Усреднение неэквивалентных отражений. R-фактор усреднения. Получение студентами структурной модели для конкретной задачи с использованием прямых методов и(или) функции Патерсона. Начало уточнения модели методом наименьших квадратов.

Уточнения модели методом наименьших квадратов. Определение геометрических характеристик структуры (межатомные расстояния, углы).

Уточнения модели методом наименьших квадратов. Построение синтезов Фурье и разностного синтеза для локализации всех атомов. Составление смешанных кривых атомного рассеяния в случае необходимости. Уточнение заселенностей позиций.

Уточнение кристаллической структуры в анизотропном приближении тепловых колебаний атомов. Построение разностного синтеза. Введение поправки на экстинкцию. Финальный расчет геометрических характеристик структуры.

Построение кристаллической структуры в программе ATOMS и (или) DIAMOND. Подготовка описания кристаллической структуры и ее особенностей.

Расчет формального баланса валентных усилий. Расчет локального баланса валентных усилий. Проверка корректности расстановки катионов и анионов в позициях кристаллической структуры.

Определение и уточнение кристаллической структуры неорганического соединения для контрольной проверки.

## **Рекомендуемые образовательные технологии**

**Технология обучения как учебного исследования** - основные этапы: столкновение с проблемой, сбор данных («верификация»), сбор данных (экспериментирование), построение объяснения, анализ хода исследования, выводы.

**Технология постановки цели** - предполагает формулировку целей через результаты обучения, выраженные в таких действиях учеников, которые можно реально оценить. Цели ранжируются по уровням: знание, понимание, применение, синтез, анализ, оценка.

## **7. Фонд оценочных средств (ФОС) для оценивания результатов обучения по дисциплине (модулю)**

### **7.1. Типовые контрольные задания или иные материалы для проведения текущего контроля успеваемости.**

Текущий контроль усвоения дисциплины осуществляется при сдаче каждым студентом выполненных лабораторных/практических/расчетных работ (при наличии).

Для текущего контроля студентов в ходе семестра проводятся контрольные работы/опросы.

#### ***Примерный перечень вопросов для проведения текущего контроля:***

1. Обработка массива экспериментальных данных. Введение LP-поправок и поправки на поглощение.
2. Определение пространственной группы на основе экспериментальных данных.
3. Выбор способа получения структурной модели (прямые методы структурной расшифровки, функция Патерсона).

4. Метод наименьших квадратов для уточнения структурной модели.
5. Различные уточняемые параметры.
6. Построение синтеза Фурье и разностного синтеза.
7. Получение и анализ геометрических характеристик структурной модели.

***Расчетные домашние задания:***

В процессе освоения программного комплекса AREN студенты получают ряд заданий для самостоятельной работы. В результате студенты должны самостоятельно провести полную структурную расшифровку и уточнение кристаллической структуры.

1. Использовать знание законов закономерных погасаний для определения типа элементарной ячейки и возможных элементов симметрии.
2. Выбор возможных пространственных групп.
3. Получить первоначальную структурную модель с использованием прямых методов структурной расшифровки.
4. Провести уточнение модели в изотропном приближении тепловых колебаний атомов.
5. Построение синтеза Фурье и разностного синтеза, выявление недостающих позиций атомов.
6. Расчет геометрических характеристик структурной модели.
7. Составление описания структуры.
8. Расчет формального и локального баланса валентных усилий.

**7.2. Типовые контрольные задания или иные материалы для проведения промежуточной аттестации.**

***Примерный перечень вопросов при промежуточной аттестации:***

1. Анализ экспериментальных данных.
2. Законы погасаний и выбор пространственной группы.
3. Получение структурной модели.
4. Анализ полученной модели и ее уточнение методом наименьших квадратов.
5. Построение синтеза Фурье и разностного синтеза.
6. Изображение кристаллической структуры с использованием специализированных программ.
7. Формальный и локальный баланс валентных усилий.
8. Самостоятельное определение и уточнение структуры неорганического соединения.

**Шкала и критерии оценивания результатов обучения по дисциплине.**

| Результаты обучения   | «Неудовлетворительно» | «Удовлетворительно»                             | «Хорошо»                                  | «Отлично»                                |
|---|-----------------------|---|---|--|
| Знания: основ методов получения уточнения кристаллических структур, критериев оценки качества структурной модели. | Знания отсутствуют    | Фрагментарные знания                            | Общие, но не структурированные знания     | Систематические знания                   |
| Умения: использовать специализированные расчетные   | Умения отсутствуют    | В целом успешное, но не систематическое умение, | В целом успешное, но содержащее отдельные | Успешное умение использовать расчеты для |

|   |                             |   |   |   |
|---|-----------------------------|---|---|---|
| программы для определения, уточнения и изображения кристаллических структур неорганических соединений.  |                             | допускает ошибки неприципиального характера                 | пробелы умение использовать расчетные программы.                              | уточнения структурной модели  |
| Владения: методом рентгеноструктурного анализа для определения и уточнения структур, графического изображения структурной модели, расчета баланса валентных усилий. | Навыки владения отсутствуют | Фрагментарное владение методикой, наличие отдельных навыков | В целом сформированные навыки владения методом расчета и изображения структур | Владение расчетным и графическими методами, использование баланса валентных усилий для оценки правильности структурной модели |

## 8. Ресурсное обеспечение:

### А) Перечень основной и дополнительной литературы.

#### - основная литература:

Пушаровский Д.Ю. Рентгенография минералов. М.-«Геоинформмарк», 2000, 292 с.  
Зубкова Н.В. Рентгеноструктурный анализ (Уточнение и изображение кристаллических структур минералов). Учебное пособие. М: Изд-во МГУ, 2005, 105 с.

#### - дополнительная литература:

Brese, N.E. and O'Keeffe, M. (1991) Bond-valence parameters for solids. Acta Crystallographica B, **47**, 192-197.  
Gagné, O.C. and Hawthorne, F.C. (2015) Comprehensive derivation of bond-valence parameters for ion pairs involving oxygen. Acta Cryst., **B71**, 562–578.  
Ковба Л.М., Трунов В.К. “Рентгенофазовый анализ”, М., МГУ, 1976.  
Пушаровский Д.Ю., Урусов В.С. “Структурные типы минералов”, М., МГУ, 1990.

Б) Перечень лицензионного программного обеспечения пакеты программ Microsoft Office Excel, Microsoft Office PowerPoint (при необходимости);

В) Перечень профессиональных баз данных и информационных справочных систем: база данных ICSD;

Г) программное обеспечение и Интернет-ресурсы (лицензионное программное обеспечение не требуется): пакеты программ Aren; Atoms, Diamond, Shelx

Д) Материально-технического обеспечение: - персональные компьютеры, монокристалльный дифрактометр Xcalibur S с CCD детектором, лицензионным программным обеспечением, включающим современные специализированные программы для обработки рентгендифракционных данных.

9. Язык преподавания – русский.

10. Преподаватель (преподаватели) – Зубкова Н.В.

11. Автор (авторы) программы – Зубкова Н.В.