

«УТВЕРЖДАЮ»  
Декан геологического факультета МГУ  
академик Д.Ю. Пущаровский  
«2» сентября 2015 года



### Рабочая программа дисциплины (модуля)

1. Код и наименование дисциплины (модуля)- **Современные проблемы рентгеноструктурного анализа**
2. Уровень высшего образования – подготовка научно-педагогических кадров в аспирантуре.
3. Направление подготовки **05.06.01\_\_Науки о Земле**. Направленность программы \_\_\_ (*если дисциплина (модуль) относится к вариативной части*) **Минералогия, кристаллография.**
4. Место дисциплины (модуля) в структуре ООП **относится к вариативной части ООП и является элективом для освоения на определенном периоде обучения (2-й год, 3-й семестр).**
5. Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), соотнесенные с планируемыми результатами освоения образовательной программы (компетенциями выпускников)

Формируемые компетенции  
(код компетенции)

Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)

<p><b>УК-1</b> Способность к критическому анализу и оценке современных научных достижений, генерированию новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях</p>	<p><b>З1 (УК-1) Знать</b> основные методы научно-исследовательской деятельности.</p> <p><b>У1 (УК-1) Уметь</b> выделять и систематизировать основные идеи в научных текстах; критически оценивать любую поступающую информацию, вне зависимости от источника; избегать автоматического применения стандартных формул и приемов при решении задач.</p> <p><b>В1(УК-1) Владеть</b> навыками сбора, обработки, анализа и систематизации информации по теме исследования; навыками выбора методов и средств решения задач исследования</p>
<p><b>ОПК-1</b> способность самостоятельно осуществлять научно-исследовательскую деятельность в области минералогии и кристаллографии с использованием современных методов исследования и информационно-коммуникационных технологий</p>	<p><b>З1 (ОПК-1) ЗНАТЬ:</b> цели и задачи научных исследований по направлению деятельности, базовые принципы и методы их организации; основные источники научной информации и требования к представлению информационных материалов</p> <p><b>У1 (ОПК--1) УМЕТЬ:</b> составлять общий план работы по заданной теме, предлагать методы исследования и способы обработки результатов, проводить исследования по согласованному с руководителем плану, представлять полученные результаты</p> <p><b>В1(ОПК--1) ВЛАДЕТЬ:</b> систематическими знаниями по направлению деятельности; углубленными знаниями по выбранной направленности подготовки, базовыми навыками проведения научно-исследовательских работ по предложенной теме</p>
<p><b>ПК1</b> Владение методологией теоретических и экспериментальных исследований в области минералогии и кристаллографии</p>	<p><b>З1(ПК-1) ЗНАТЬ:</b> методологию теоретических и экспериментальных исследований в области минералогии и кристаллографии</p> <p><b>Код У1(ПК-1) УМЕТЬ:</b> пользоваться результатами современных теоретических и экспериментальных исследований в области минералогии и кристаллографии</p> <p><b>Код В1(ПК-1) ВЛАДЕТЬ:</b> современными методами теоретических и экспериментальных исследований в области минералогии и кристаллографии</p>
<p><b>ПК2</b> Владение современными методами научных исследований в области минералогии и кристаллографии, в том числе с использованием новейших информационно-коммуникационных</p>	<p><b>З-1(ПК2) ЗНАТЬ:</b> новейшие информационно-коммуникационных технологии в области минералогии и кристаллографии</p> <p><b>У-1(ПК-2) УМЕТЬ:</b> пользоваться новейшими информационно-</p>

технологий	коммуникационных технологиями в области минералогии и кристаллографии <b>В-1(ПК-2) ВЛАДЕТЬ:</b> современными методами научных исследований в области минералогии и кристаллографии, в том числе с использованием новейших информационно-коммуникационных технологий
<b>ПК4</b> способность выдвигать и обосновывать новые гипотезы в области минералогии и кристаллографии.	<b>З-1(ПК4) ЗНАТЬ:</b> современные дискуссионные темы в области минералогии и кристаллографии <b>У-1(ПК-4) УМЕТЬ:</b> выдвигать и обосновывать новые гипотезы в области минералогии и кристаллографии <b>В-1(ПК-4) ВЛАДЕТЬ:</b> методическими навыками проведения дискуссий по обсуждению новых гипотез в области минералогии и кристаллографии
<b>ПК5</b> способность обобщать и использовать результаты исследований для выявления новых явлений, закономерностей, законов и теоретических положений в области минералогии и кристаллографии.	<b>З-1(ПК-5) ЗНАТЬ:</b> новые явления, закономерности и теоретические положения в области минералогии и кристаллографии <b>У-1(ПК-5) УМЕТЬ:</b> обобщать и использовать результаты исследований для выявления новых явлений, закономерностей, законов и теоретических положений в области своей научной специальности <b>В-1(ПК-5) ВЛАДЕТЬ:</b> навыками выдвижения новых теоретических положений в области минералогии и кристаллографии
<b>ПК6</b> способность обобщать и использовать результаты научных исследований в области минералогии и кристаллографии для решения практических задач хозяйственной деятельности.	<b>З-1(ПК-6) ЗНАТЬ:</b> практические направления применения результатов своей научной деятельности <b>У-1(ПК-6) УМЕТЬ:</b> обобщать и использовать результаты научных исследований для решения практических задач <b>В-1(ПК-6) ВЛАДЕТЬ:</b> приемами решения задач прикладного характера на основании результатов своей научной деятельности

Оценочные средства для промежуточной аттестации по дисциплине (модулю) приведены в Приложении.

6. Объем дисциплины (модуля) в зачетных единицах с указанием количества академических или астрономических часов, выделенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу обучающихся:

Объем дисциплины составляет 6 зачетных единиц, всего 216 часов, из которых 72 часа составляет контактная работа обучающегося с преподавателем (24 часа занятий лекционного типа, 36 часов индивидуальные консультации, 12 часов мероприятия промежуточной аттестации), 144 часа составляет самостоятельная работа обучающегося

7. Входные требования для освоения дисциплины (модуля), предварительные условия (если есть): **не требуются**

8. Образовательные технологии (отметить, если применяется электронное обучение и дистанционные технологии): **Дисциплина реализуется с использованием электронного обучения и дистанционных технологий кафедры кристаллографии и кристаллохимии, в том числе баз данных кристаллических структур ICSD, Mincrust, Mindat, а также известных серверов SCOPUS, Web of Knowledge, доступных в режиме удаленного пользователя**

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

**Краткая аннотация.** Курс посвящен исследованию проблем структурных расшифровок и их преодолению на современном уровне. В нем рассматриваются кратко современные методы получения экспериментальных данных и их обработки, а также суммирован опыт проблем расшифровок и их преодоления. Материал подается на примерах новейших расшифровок как в нашей стране, так и, главным образом, на основе многочисленных исследований перспективных классов соединений боратов и йодатов за рубежом. Многие из них находят применение как нелинейно-оптические кристаллы или ионные проводники. В связи с этим, чрезвычайно важным является точное структурное определение положений атомов, в том числе в позициях, занятых с дефицитом, что подробно разбирается на ряде примеров. В результате прослушанного курса аспиранты овладевают также методом поиска новейшей структурной информации с помощью известных интернет-ресурсы.

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						Самостоятельная работа обучающегося, часы		
		из них						из них		
Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа	Групповые консультации	Индивидуальные консультации	Учебные занятия, направленные на проведение текущего контроля успеваемости коллоквиумы, практические контрольные занятия и др)*	Всего	Выполнение домашних заданий	Подготовка рефератов и т.п..	Всего		
Тема 1. Современная аппаратура и компьютерные программы - база современного рентгеноструктурного анализа: 1. Дифрактометры для монокристалльного и порошкового метода, современные струк-	17	2	0	0	3	5	12		12	

<p>турные комплексы для расшифровок.</p> <p>2.«Трудные структуры» - эффекты псевдосимметрии, двойничкования и их преодоление на основе современных возможностей</p> <p>3.Проблема выбора пространственной группы, проверка симметрии измерением свойств исследуемых кристаллов</p>										
<p><b>Тема 2. Достижения и проблемы рентгеноструктурного анализа боратов:</b></p> <p>1.Гексабораты, Цепочечные, их разновидности и эффекты разупорядочения структурный тип стилвеллита</p> <p>Слоевые и разнообразие в разветвлениях</p>	17	2		3				12		12

Каркасные и вариации симметрии и блоков									
2.Пентабораты, Слоевые, различие в распространенности структур от блока, Каркасные, структурный тип хильгардита и локализация вариаций через определение позиций атомов в каналах	17	2			3			12	12
Новые типы слоев с сочленением и без, Экзотический блок 5(4Δ+1Т) и его влияние на типы структур	17	2			3			12	12
3.Трибораты, Новые каркасы и их связь с известными на основе структурных расшифровок	17	2			3			12	12
4.Дибораты, Аналогии с силикатами простейшие слои типа слюд и их вариации Структуры с Рb и Vi 5.Полибораты,	17	2			3			12	12

Структуры с Li, Na, Ag Слоевые структуры с Ln, Ba и структурные проблемы распределе- ний ионов в полостях	17	2			3			12		12
Нонабораты, фиксация канальных ионов и комплексов Додекабораты и та же структурная проблема	17	2			3			12		12
Полибораты только из тетраэдров Сложные слои с разнообразием блоков: Nd, Sm, Ba-K- Zn, Ba, Na, Zn Разупорядоченные структуры в кубиче- ской симметрии	17	2			3			12		12
<b>Тема 3. Достижения и проблемы рентгено- структурного анализа йодатов:</b> Простейшие структу- рные типы и их	17	2			3			12		12

расшифровки Иодаты с In и их разновид- ности, иодаты с Ag и их разновидности, способы определения структур	17	2			3			12		12
Иодаты с Bi, перспек- тивные кристаллы, иодаты Ta, Mo, Ln и смешанные со щелоч- ными металлами	17	2			3			12		12
	72	24			36					144
Промежуточная аттестация _____ (указывается форма проведения)** проходит в виде балльно-рейтинговой системы оценивания ответов на вопросы и тесты по темам 1-11	12	6						6		
<b>Итого</b>	216	72								144

*\*Текущий контроль успеваемости может быть реализован в рамках занятий семинарского типа, групповых или индивидуальных консультаций*

*\*\* Промежуточная аттестация может проходить как в традиционных форма (зачет, экзамен), так и в иных формах (балльно-рейтинговая система, портфолио и др.)*

**Промежуточная аттестация проходит по балльно-рейтинговой системе**

10. Перечень учебно-методического обеспечения для самостоятельной работы аспирантов по дисциплине (модулю).

**Сандомирский П.А., Белов Н.В. Кристаллохимия смешанных анионных радикалов**

**Пушаровский Д.Ю. Структурная минералогия силикатов и их синтетических аналогов**

11. Ресурсное обеспечение:

- Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»
- **компьютерный класс с выходом в интернет**

**Сайт SCOPUS:** <http://scopus.elsevier.com>

**Сайт MINDAT:** <http://www.mindat.org/>

- Перечень используемых информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса, включая программное обеспечение, информационные справочные системы (при необходимости):

**Допуск в базу данных ICSD кафедры кристаллографии и кристаллохимии**

- Описание материально-технической базы.

**Для проведения занятий: интерактивных лекций-визуализаций, презентаций рефератов на семинарах – используется LCD проектор. Для самостоятельной работы аспирантов используется компьютерный класс с выходом в Интернет, доступ к базам данных по кристаллохимии и структурным данным, программное обеспечение для решения кристаллохимических задач, библиотека геологического факультета МГУ. Для интерактивной самоподготовки используется компьютер с выходом в Интернет. Для экспериментов имеется монокристалльный дифрактометр XCalibur-S, порошковый STOE**

12. Язык преподавания- **русский.**

13. Преподаватель (преподаватели) –д.х.н., доцент, профессор Белоконева Елена Леонидовна, [elbel@geol.msu.ru](mailto:elbel@geol.msu.ru).

## Приложение

### Оценочные средства для промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)\_ Современные проблемы рентгеноструктурного анализа на основе карт компетенций выпускников

Планируемые результаты обучения	Критерии и показатели оценивания результата обучения					Оценочные средства
	менее 15 баллов по БРС	от 15 до 39 баллов по БРС	от 40 до 59 баллов по БРС	или от 60 до 79 баллов по БРС	80 и более баллов по БРС	
ЗНАТЬ: методы критического анализа и оценки современных научных достижений, а также методы генерирования новых идей при решении исследовательских и практических задач, в том числе	Отсутствие знаний	Фрагментарные знания методов критического анализа и оценки современных научных достижений, а также методов генерирования новых идей при решении исследовательских и практических задач	Общие, но не структурированные знания методов критического анализа и оценки современных научных достижений, а также методов генерирования новых идей при решении исследовательских и практических задач	Сформированные, но содержащие отдельные пробелы знания основных методов критического анализа и оценки современных научных достижений, а также методов генерирования новых идей при решении	Сформированные систематические знания методов критического анализа и оценки современных научных достижений, а также методов генерирования новых идей при решении исследовательских и практических	Баллы определяются на основе количественных оценок ПК

<p>В междисциплинарных областях <b>Код З1(УК-1)</b></p>				<p>исследовательских и практических задач, в том числе междисциплинарных</p>	<p>задач, в том числе междисциплинарных</p>	
<p><b>УМЕТЬ:</b> анализировать альтернативные варианты решения исследовательских и практических задач и оценивать потенциальные выигрыши/проигрыши реализации этих вариантов <b>Код У1 (УК-1)</b></p>	<p>Отсутствие умений</p>	<p>Частично освоенное умение анализировать альтернативные варианты решения исследовательских и практических задач и оценивать потенциальные выигрыши/проигрыши реализации этих вариантов</p>	<p>В целом успешно, но не систематически осуществляемые анализ альтернативных вариантов решения исследовательских и практических задач и оценка потенциальных выигрышей/проигрышей реализации этих вариантов</p>	<p>В целом успешно, но содержащие отдельные пробелы анализ альтернативных вариантов решения исследовательских задач и оценка потенциальных выигрышей/проигрышей реализации этих вариантов</p>	<p>Сформированное умение анализировать альтернативные варианты решения исследовательских и практических задач и оценивать потенциальные выигрыши/проигрыши реализации этих вариантов</p>	<p>Баллы определяются на основе количественных оценок ПК</p>
<p><b>ВЛАДЕТЬ:</b> навыками анализа методологических проблем, возникающих при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных областях <b>Код В1 (УК-1)</b></p>	<p>Отсутствие навыков</p>	<p>Фрагментарное применение навыков анализа методологических проблем, возникающих при решении исследовательских и практических задач</p>	<p>В целом успешное, но не систематическое применение навыков анализа методологических проблем, возникающих при решении исследовательских и практических задач</p>	<p>В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы применение навыков анализа методологических проблем, возникающих при решении исследовательских и практических задач</p>	<p>Успешное и систематическое применение навыков анализа методологических проблем, возникающих при решении исследовательских и практических задач, в том числе в междисциплинарных</p>	<p>Баллы определяются на основе количественных оценок ПК</p>

					ых областях	
<p>ЗНАТЬ: цели и задачи научных исследований по направлению деятельности, базовые принципы и методы их организации; основные источники научной информации и требования к представлению информационных материалов <b>Код 31 (ОПК-1)</b></p>	Отсутствие знаний	Фрагментарные представления о современных способах использования информационно-коммуникационных технологий в выбранной сфере деятельности	В целом успешные, но не систематические представления о современных способах использования информационно-коммуникационных технологий в выбранной сфере деятельности	В целом успешные, но содержащие отдельные пробелы, представления о современных способах использования информационно-коммуникационных технологий в выбранной сфере деятельности	Сформированные представления о современных способах использования информационно-коммуникационных технологий в выбранной сфере деятельности	Баллы определяются на основе количественных оценок ПК
<p>УМЕТЬ: составлять общий план работы по заданной теме, предлагать методы исследования и способы обработки результатов, проводить исследования по согласованному с руководителем плану, представлять</p>	Отсутствие умений	Фрагментарное использование умения выбирать и использовать экспериментальные и расчетно-теоретические методы для решения научной задачи	В целом успешное, но не систематическое использование умения выбирать и использовать экспериментальные и расчетно-теоретические методы для решения научной задачи	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы использование умения выбирать и использовать экспериментальные и расчетно-теоретические методы для решения научной задачи	Сформированное умение выбирать и использовать экспериментальные и расчетно-теоретические методы для решения научной задачи	Баллы определяются на основе количественных оценок ПК

полученные результаты <b>Код У1(ОПК-1)</b>						
ВЛАДЕТЬ: систематическими знаниями по направлению деятельности; углубленными знаниями по выбранной направленности подготовки, базовыми навыками проведения научно-исследовательских работ по предложенной теме <b>Код В1(ОПК-1)</b>	Отсутствие навыков	Фрагментарное применение навыков поиска и критического анализа научной и технической информации	В целом успешное, но не систематическое применение навыков поиска и критического анализа научной и технической информации	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы применение навыков поиска и критического анализа научной и технической информации	Успешное и систематическое применение навыков поиска и критического анализа научной и технической информации	Баллы определяются на основе количественных оценок ПК
Знание методологии теоретических и экспериментальных исследований в области минералогии и кристаллографии <b>Код З1(ПК-1)</b>	0 баллов	1 балл	2-3 балла	4-5 баллов	6-7 баллов	Индивидуальная работа по расшифровке структуры с анализом современной зарубежной литературы

<p>Уметь пользоваться результатами современных теоретических и экспериментальных исследований в области минералогии и кристаллографии <b>Код У1(ПК-1)</b></p>	0 баллов	1 балл	2-3 балла	4-5 баллов	6-7 баллов	Индивидуальные собеседования (по количеству тем)
<p>Владеть современными методами теоретических и экспериментальных исследований в области минералогии и кристаллографии <b>Код В1(ПК-1)</b></p>	0 баллов	1 балл	2-3 балла	4-5 баллов	6-7 баллов	Индивидуальная работа по расшифровке структуры с демонстрацией практических навыков
<p>Знание новейших информационно-коммуникационных технологий в области минералогии и кристаллографии <b>Код З-1(ПК2)</b></p>	0 баллов	1 балл	2-3 балла	4-5 баллов	6-7 баллов	Индивидуальное кристаллохимическое описание структуры с анализом современной зарубежной литературы

<p>Уметь пользоваться новейшими информационно-коммуникационными технологиями в области минералогии и кристаллографии <b>Код У-1(ПК-2)</b></p>	0 баллов	1 балл	2-3 балла	4-5 баллов	6-7 баллов	Индивидуальные собеседования (по количеству тем)
<p>Владеть современными методами научных исследований в области минералогии и кристаллографии, в том числе с использованием новейших информационно-коммуникационных технологий <b>Код В-1(ПК-2)</b></p>	0 баллов	1 балл	2-3 балла	4-5 баллов	6-7 баллов	Индивидуальная расшифровка структуры с демонстрацией практических навыков
<p>Знать современные дискуссионные темы в области минералогии и кристаллографии <b>Код З-1(ПК4)</b></p>	0 баллов	1 балл	2-3 балла	4-5 баллов	6-7 баллов	Индивидуальная расшифровка структуры с анализом современной зарубежной литературы

Уметь выдвигать и обосновывать новые гипотезы в области минералогии и кристаллографии <b>Код У-1(ПК-4)</b>	0 баллов	1 балл	2-3 балла	4-5 баллов	6-7 баллов	Индивидуальное представление результатов в форме статьи
Владеть методическими навыками проведения дискуссий по обсуждению новых гипотез в области минералогии и кристаллографии <b>Код В-1(ПК-4)</b>	0 баллов	1 балл	2-3 балла	4-5 баллов	6-7 баллов	Индивидуальное представление результатов в форме статьи с демонстрацией практических навыков
Знать новые явления, закономерности и теоретические положения в области минералогии и кристаллографии <b>Код З-1(ПК-5)</b>	0 баллов	1 балл	2-3 балла	4-5 баллов	6-7 баллов	Индивидуальное представление результатов в форме статьи с анализом современной зарубежной литературы
Уметь обобщать и использовать результаты	0 баллов	1 балл	2-3 балла	4-5 баллов	6-7 баллов	Индивидуальное представление результатов в

исследований для выявления новых явлений, закономерностей, законов и теоретических положений в области своей научной специальности <b>Код У-1(ПК-5)</b>						форме статьи
Владеть навыками выдвижения новых теоретических положений в области минералогии и кристаллографии <b>Код В-1(ПК-5)</b>	0 баллов	1 балл	2-3 балла	4-5 баллов	6-7 баллов	Индивидуальное представление результатов в форме статьи с демонстрацией практических навыков
Знать практические направления применения результатов своей научной деятельности <b>Код З-1(ПК-6)</b>	0 баллов	1 балл	2-3 балла	4-5 баллов	6-7 баллов	Индивидуальное представление результатов в форме статьи с анализом современной зарубежной литературы
Уметь обобщать и использовать результаты	0 баллов	1 балл	2-3 балла	4-5 баллов	6-7 баллов	Индивидуальное представление результатов в

научных исследований для решения практических задач <b>Код У-1(ПК-6)</b>						форме статьи
Владеть приемами решения задач прикладного характера на основании результатов своей научной деятельности <b>Код В-1(ПК-6)</b>	0 баллов	1 балл	2-3 балла	4-5 баллов	6-7 баллов	Индивидуальное представление результатов в форме статьи с демонстрацией практических навыков

*Для оценивания результатов обучения в виде знаний используются следующие виды оценочных средств:*

- тестирование;
- индивидуальное собеседование,
- письменные ответы на вопросы.
- т.п.

**Используется тестирование и индивидуальное собеседование**

*Для оценивания результатов обучения в виде умений и владений используются следующие виды оценочных средств*

- практические индивидуальные расчеты кристаллических структур с описание действий, которые следует выполнить, и описание результатов в сопоставлении с имеющимися кристаллохимическими данными.

**Темы тестов и типовых вопросов, необходимых для оценки результатов обучения:**

1. Возможности современных дифрактометров для решения задач структурного анализа.
2. Выбор монокристалльного метода или метода Ритвельда, возможности в сопоставлении
3. Влияние псевдосимметрии на проблемы в структурных расшифровках, примеры
4. Особенности структур гексаборатов и применение их в практическом структурном анализе
5. Способы определение заселений пустот в пентаборатах, слоевых и каркасных
6. Способы определение заселений пустот в мегаборатах, слоевых и каркасных
7. Конфигурация иодатных группировок и роль неподеленных пар для проявления свойств
8. Оценка возможного проявления свойств из структурных особенностей, привлечение дополнительных измерений
9. Способ извлечения структурных данных из различных баз
10. Способ извлечения структурных данных из интернет-ресурсов SCOPUS и другие
11. Способы сопоставления собственных результатов и зарубежных

**Разработчик** МГУ им. М.В,  
Ломоносова, Геологический ф-т  
профессор



Белоконева Е.Л.