

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/

«20» мая 2019 г.

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)**  
**Компьютерные базы термодинамических и структурных данных**

**Уровень высшего образования:**  
Специалитет

---

**Направление подготовки (специальность):**  
04.05.01 Фундаментальная и прикладная химия

**Направленность (профиль) ОПОП:**  
Химия твердого тела

**Форма обучения:**  
очная

---

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

Москва 2019

Рабочая программа дисциплины разработана в соответствии с самостоятельно установленным МГУ образовательным стандартом (ОС МГУ) для реализуемых основных профессиональных образовательных программ высшего образования по направлению подготовки / специальности 04.05.01 «Фундаментальная и прикладная химия» (программа специалитета), утвержденного приказом МГУ от 30 декабря 2016 года № 1671.

Год (годы) приема на обучение

2015/2016, 2016/2017, 2017/2018, 2018/2019

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	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю)
<b>ОПК-7.С.</b> Способность собирать, анализировать, обрабатывать и представлять информацию с использованием современных компьютерных технологий, общих и профессиональных баз данных	<b>Знать:</b> Способы поиска в базах данных, способы извлечения информации и способы ее интерпретации
<b>СПК-1.С.</b> Способность использовать современную теорию строения твердых тел, представления о взаимосвязи электронного строения, кристаллической структуры и физических свойств твердых тел для синтеза новых веществ и материалов с заданными свойствами	<b>Знать:</b> Современные теории, описывающие структуру, электронное строение и свойства твердых тел. <b>Уметь:</b> Находить взаимосвязи между составом, строением, физическими и химическими свойствами твердых тел и объяснять их.

3. 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 (модуля) составляет 2 зачетных единицы, всего 72 часа, из которых 32 часа составляет контактная работа студента с преподавателем (14 часов занятия лекционного типа, 14 часов занятия семинарского типа, 2 часа – промежуточной аттестации, 2 часа групповые консультации), 40 часов составляет самостоятельная работа студента.*

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

Обучающийся должен

**Знать:** общие положения неорганической и физической химии, кристаллохимии, современной теории строения твердых тел.

**Уметь:** предсказывать физические свойства твердых тел, исходя из их пространственной и электронной структуры, интерпретировать диаграммы состояния, определять фазовый состав системы заданного состава при заданных условиях.

**Владеть:** навыками работы с персональными компьютерами и использования сети Internet.

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
<b>Тема 1. Термодинамические базы данных</b>	<b>18</b>	4	4				<b>8</b>	10		<b>10</b>
<b>Тема 2. Кристаллографические базы данных</b>	<b>22</b>	6	6				<b>12</b>	10		<b>10</b>
<b>Тема 3. Архивирование и визуализация структурных данных, геометрические расчеты.</b>	<b>18</b>	4	4				<b>8</b>	10		<b>10</b>
Промежуточная аттестация <i>зачет</i>	<b>14</b>			2		2	<b>4</b>	10		<b>10</b>
<b>Итого</b>	<b>72</b>	14	14	2		2	<b>32</b>	40		<b>40</b>

Содержание тем:

**Тема 1. Термодинамические базы данных.** Первичные данные: калориметрические, давление паров, диаграммы состояния. Проблема согласования первичных данных. Таблицы "Термические константы веществ", CODATA, NBS, JANAF. Температурная зависимость

термодинамических потенциалов. Базы данных индивидуальных веществ on-line: ТКВ, ИВТАНТЕРМО, NIST Webbook. Термодинамическое моделирование растворов. Базы данных и программы SGTE. Базы данных Thermo-Calc.

**Тема 2. Кристаллографические базы данных.** База органических структур CSD. Поиск структур по фрагменту, формуле, параметрам ячейки, библиографическим данным. Комбинированный поиск. Визуализация результатов поиска и их статистическая обработка (Mercury). База неорганических структур (ICSD). База данных белковых структур (PDB). База данных структур нуклеиновых кислот (NDB). База данных структур металлов и интерметаллидов (CRYSTMET). База данных кристаллических структур и фазовых диаграмм бинарных систем (Pauling File/AtomWork).

**Тема 3. Архивирование и визуализация структурных данных, геометрические расчеты.** Структура cif-файла. Программы визуализации неорганических и органических структур: Diamond, Ortep, Pluton. Полиэдрическая графика. Программа визуализации белковых структур VMD. Программа геометрических расчетов Platon. Основы кристаллохимического анализа: длины связей, углы, среднеквадратичные плоскости, полиэдры, конформация циклов, межмолекулярные водородные связи и контакты, пустоты, плотность упаковки.

#### 6. Образовательные технологии.

Проводятся традиционные лекции с использованием мультимедийных презентаций, а также лекции-демонстрации проблемного характера. В ходе семинарских занятий студенты решают задачи, нацеленные на практическое усвоение лекционного материала, обсуждают предложенные преподавателем проблемы, а также отвечают на вопросы преподавателя.

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

Студентам предоставляется программа курса, план занятий и перечень заданий для самостоятельной работы. По каждой теме указывается материал в источниках из списков основной и вспомогательной литературы, а также из интернет-ресурсов. Дополнительные материалы размещаются на сайте кафедры общей химии: [www.chem.msu.ru/rus/teaching/general-spec.html](http://www.chem.msu.ru/rus/teaching/general-spec.html)

#### 8. Ресурсное обеспечение:

- Перечень основной и вспомогательной учебной литературы ко всему курсу

##### **Основная литература**

1. Борщевский А.Я. Физическая химия, т. I: Общая и химическая термодинамика. М.: ИНФРА-М, 2017.
2. Воронин Г.Ф. Основы термодинамики. М.: Изд-во МГУ, 1987.
3. Мюллер У. Структурная неорганическая химия. Долгопрудный: «Интеллект», 2010.

## Дополнительная литература

1. А.С. Илюшин, А.П. Орешко Дифракционный структурный анализ. М.: Изд. дом «Крепостновъ», 2013.
  2. Ladd M., Palmer R. Structure Determination by X-ray Crystallography. Analysis by X-rays and Neutrons. New York: Springer, 2013.
- Перечень используемых информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса, включая программное обеспечение, информационные справочные системы (при необходимости):
    1. Springer Materials Landolt-Börnstein Database: [www.springermaterials.com/docs/index.html](http://www.springermaterials.com/docs/index.html)
    2. База данных «Термические Константы Веществ»: [www.chem.msu.su/cgi-bin/tkv.pl?show=welcome.html](http://www.chem.msu.su/cgi-bin/tkv.pl?show=welcome.html)
    3. База структурных и термодинамических данных для бинарных систем AtomWork Национального института материаловедения NIMS (Япония): <http://crystdb.nims.go.jp>
    4. База термодинамических и теплофизических данных Национального института стандартов и технологий NIST (США): <http://webbook.nist.gov>
    5. База данных белковых структур: [www.rcsb.org/pdb](http://www.rcsb.org/pdb)
  - Периодическая литература:  
In-Ho Jung I.-H. // Overview of the applications of thermodynamic databases to steelmaking processes // CALPHAD **2010** 34. pp. 332-362
  - Описание материально-технической базы.  
Занятия проводятся в аудитории, оснащенной мультимедийным экраном и персональными компьютерами.

9. Язык преподавания – русский

10. Преподаватели:

д.х.н., профессор Яценко Александр Васильевич, [yatsenko@struct.chem.msu.ru](mailto:yatsenko@struct.chem.msu.ru), 8(495)939-50-89.

к.х.н., доцент Кузнецов Виктор Николаевич, [vnk1999@mail.ru](mailto:vnk1999@mail.ru) 8(495)939-38-35.

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

Формой текущего контроля является опрос на семинарах и проверка выполнения домашних заданий. Промежуточная аттестация осуществляется в форме зачета. На зачете осуществляется достижение результатов обучения, перечисленных в п. 2.

### **Образцы контрольных вопросов для текущего контроля усвоения материала:**

1. Какие виды первичной информации можно использовать для определения термодинамических характеристик веществ?
2. Каким образом вычисляются термодинамические потенциалы при различных температурах? Какая информация необходима для этого?
3. Каким образом выбирается стандартное состояние чистых веществ и компонентов растворов?
4. Как рассчитываются термодинамические характеристики растворов?
5. Как рассчитываются температуры фазовых переходов?
6. По каким признакам можно осуществлять поиск в базе данных CSD?
7. В каком формате осуществляется архивирование и деархивирование кристаллографической информации?
8. По каким признакам осуществляется поиск в базе данных ICSD?
9. В чем состоит кристаллохимический анализ структур? Какие расчеты проводятся в его рамках?
10. Какую информацию можно получить из базы данных Pauling file/AtomWork?

### **Примеры домашних заданий**

1. Используя термодинамические базы данных, вычислите константу равновесия предложенной газофазной реакции при заданной температуре.
2. Используя термодинамические базы данных, рассчитайте термодинамические характеристики раствора заданной концентрации.
3. Используя термодинамические базы данных, определите температуры фазовых переходов и постройте диаграмму состояния индивидуального вещества.
4. По базе данных Pauling file/AtomWork найдите диаграмму состояния заданной двойной системы и структуры фаз, присутствующих в ней.
5. Проведите поиск в базе данных CSD по заданному фрагменту.
6. Проведите статистическую обработку результатов поиска в базе данных CSD по заданным геометрическим критериям.
7. Экспортируйте кристаллографические данные из базы данных CSD для заданного соединения, визуализируйте его кристаллическую структуру при помощи программы Mercury и проведите ее кристаллохимический анализ с использованием программы Platon.
8. Проведите поиск в базе данных ICSD для заданного класса соединений, комбинируя запросы по составу и по структурному типу.

9. Визуализируйте кристаллическую структуру, найденную в базе данных ICSD, при помощи программы Diamond, определите координационные числа всех атомов и охарактеризуйте их координационные полиэдры.
10. Найдите в базе данных PDB структуру заданного белка и визуализируйте ее при помощи программы VMD. Определите тип вторичной структуры на различных участках молекулы.

#### **Примерный перечень вопросов к зачету:**

1. Термодинамические потенциалы, их зависимость от температуры. Выбор стандартного состояния для индивидуальных веществ и компонентов раствора.
2. Проблема согласования первичных данных. Точность определения значений термодинамических величин.
3. Расчет термодинамических функций растворов. Коэффициенты активности.
4. Методы поиска в базе данных ТКВ. Использование результатов поиска для расчета химических равновесий.
5. Методы поиска в базе данных NIST. Использование результатов поиска для расчета химических равновесий.
6. Методы расчета диаграмм состояния по термодинамическим данным.
7. Содержание базы данных Pauling file/AtomWork и поиск в ней.
8. Расчет термодинамических функций из первых принципов методами квантовой химии.
9. Структура и формат cif-файлов.
10. Способы поиска в базе данных CSD по структурному фрагменту.
11. Поиск в базе данных CSD по формуле и параметрам решетки.
12. Комбинированный поиск в базе данных CSD.
13. Возможности поиска в базе данных ICSD
14. Кристаллохимический анализ структур. Характеристики, используемые при кристаллохимическом анализе.
15. Поиск в базе данных PDB. Визуализация результатов с учетом вторичной структуры белка.

#### **Примерный перечень практических контрольных заданий к зачету:**

1. В базе данных Pauling File/AtomWork найдите диаграммы состояния заданной двойной системы и дайте их обзор
2. В базе термодинамических данных ТКВ найдите данные для расчета термодинамических характеристик заданной реакции
3. В базе данных Pauling File/AtomWork найдите кристаллохимические характеристики заданного двойного соединения и визуализируйте ее при помощи программы DIAMOND
4. В базе данных CSD найдите структуры, отвечающие заданным спецификациям по структурному фрагменту и химическому составу и дайте их обзор



5. В базе данных PDB найдите структуру заданного металлопротеина и визуализируйте ее.

### Методические материалы для проведения процедур оценивания результатов обучения

Шкала оценивания знаний, умений и навыков приведена в таблице ниже

<b>ШКАЛА И КРИТЕРИИ ОЦЕНИВАНИЯ РЕЗУЛЬТАТА ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)</b>				
Оценка Результат	2	3	4	5
Знания	Обрывочные знания или их отсутствие	В целом систематические, но неглубокие знания со значительными пробелами	Систематические, общие, но недостаточно структурированные знания	Сформированные систематические знания
Умения	Отдельные умения или их отсутствие	Ограниченное умение, успешное только в простейших ситуациях	В целом успешное, но содержащее отдельные пробелы умение (допускает неточности непринципиального характера)	Успешное и систематическое умение
Навыки (владения)	Отдельные навыки или их отсутствие	Шаблонные навыки, пригодные для решения простейших задач	В целом сформированные навыки, но не все в активной форме	Сформированные навыки, применяемые при решении различных задач

<b>РЕЗУЛЬТАТ ОБУЧЕНИЯ по дисциплине (модулю)</b>	<b>ФОРМА ОЦЕНИВАНИЯ</b>
<b>Знать:</b> способы поиска в базах данных, способы извлечения информации и способы ее интерпретации <b>Знать:</b> современные теории, описывающие структуру, электронное строение и свойства твердых тел.	Устный опрос на зачете
<b>Уметь:</b> находить взаимосвязи между составом, строением, физическими и химическими свойствами твердых тел и объяснять их.	Устный опрос на зачете, выполнение практического контрольного задания