

**КОМПЬЮТЕРНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ
В ПРЕПОДАВАНИИ КУРСА КРИСТАЛЛОХИМИИ
НА ХИМИЧЕСКОМ ФАКУЛЬТЕТЕ МГУ ИМЕНИ М.В.ЛОМОНОСОВА**

Богдан Т.В., Словохотов Ю.Л.¹, Миняйлов В.В., Абрамович А.И., Гринева О.В.

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Химический факультет, Россия, 119991, ГСП-1, Москва, Ленинские горы, д.1, стр. 3.

¹ Институт проблем управления им. В.А. Трапезникова РАН,
Россия, 117997, Москва, ул. Профсоюзная, 65
+7(495) 9393571, chemist2014@yandex.ru

Базовый курс кристаллохимии (КХ) на химическом факультете Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова состоит из следующих разделов: симметрия (точечная и пространственная); основы дифракционных методов исследования структуры кристаллов; описательная кристаллохимия (принципы строения кристаллов различных классов соединений). В сжатые сроки (один семестр) студенты должны овладеть формальным описанием групп симметрии, изучить математический аппарат структурного анализа и освоить базовые структурные типы кристаллических структур. Вопросы, рассматриваемые в курсе, очень многоплановы, и в связи с этим при изложении материала возникает необходимость использовать наглядные иллюстрации. В преподавании курса активно используются трехмерные модели кристаллических структур. Однако наилучших успехов в усвоении материала удастся добиться с помощью компьютерных технологий: программ визуализации кристаллических структур и компьютерных тестов в системе дистанционного образования.

Доступные программы визуализации кристаллических структур (Vesta, Diamond, Mercury) позволяют увидеть геометрический мотив расположения атомов в кристаллической структуре, измерить расстояния между атомами, а также валентные и торсионные углы, выделить структурообразующие контакты, представить кристаллическую структуру в координационных полиэдрах, построить проекции элементарных ячеек вдоль разных координатных направлений, выявить присущие кристаллу элементы симметрии. Рабочими файлами для программ визуализации являются текстовые файлы *.cif, которые можно экспортировать из структурных банков данных CSD и ICSD. В рамках такого подхода большинство занятий проводится в компьютерном классе. Студенты быстро осваивают программы визуализации и с интересом работают с ними. Качество знаний и понимание материала при этом улучшается. Следует отметить, что использование современных баз структурных данных позволяет корректировать информацию о давно изученных структурах и получать сведения о строении новых материалов, еще не включенных в учебники.

В докладе будут рассмотрены основные темы изучаемых разделов курса, выделены наиболее сложные для понимания вопросы и показаны примеры использования компьютерных технологий для улучшения качества усвоения материала.