

Правительство Российской Федерации
Санкт-Петербургский государственный университет
Геологический факультет

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА
УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ**

**КРИСТАЛЛОХИМИЯ И РЕНТГЕНОСТРУКТУРНЫЙ АНАЛИЗ
(ДОПОЛНИТЕЛЬНЫЕ ГЛАВЫ)**

специальная дисциплина образовательной программы подготовки аспиранта
специальность 25.00.05 "Минералогия, кристаллография"

Язык(и) обучения _____ *русский* _____

Трудоёмкость _____ **3** _____ зачётных единиц

Регистрационный номер
рабочей программы:

/	/
---	---

Санкт-Петербург
2012

Раздел 1. Характеристики, структура и содержание учебных занятий

1.1. Цели и задачи учебных занятий

Целью курса является ознакомление аспирантов со специальными навыками по проведению и обработке результатов рентгеноструктурного анализа, а также рассмотрение кристаллохимических особенностей соединений с анионоцентрированными комплексами. Разобрать с аспирантами те вопросы, которые возникают на всех этапах рентгеноструктурного анализа: проведение эксперимента, обработка полученных данных - получение набора интенсивностей, расшифровка структуры, уточнение структуры. Рассмотреть особенности и принципы кристаллохимии соединений с анионоцентрированными тетраэдрами.

1.2. Требования к подготовленности обучающегося к освоению содержания учебных занятий (пререквизиты):

Для успешного освоения дисциплины аспирант должен иметь предварительную подготовку по программам дисциплин "Кристаллохимия", "Рентгеноструктурный анализ" и "Кристаллография".

1.3. Знания, умения, навыки, осваиваемые обучающимся

Полное представление о рентгеноструктурном анализе и умение решать практические вопросы, связанные с рентгеноструктурным анализом кристаллических веществ (минералов, синтетических соединений), таких как: особенности проведения рентгеноструктурного эксперимента на различных современных дифрактометрах; обработка экспериментальных данных с использованием программного обеспечения фирм Stoe и Bruker; расшифровка и уточнение кристаллических структур в программах Shelx и Platon. Визуализация результатов в программе Diamond. Способность использовать полученные знания в своей профессиональной деятельности.

1.4. Перечень и объём активных и интерактивных форм учебных занятий

Программа курса предусматривает 30 часов аудиторных (консультаций, семинарских и практических) занятий и 70 часов самостоятельных занятий, на которых аспиранты выполняют самостоятельные задания с использованием специальных компьютерных программ (Shelx, Platon, Diamond и др.), в том числе в присутствии преподавателя.

1.5. Организация учебных занятий

Трудоёмкость, объёмы учебной работы и наполняемость групп обучающихся

Код модуля в составе дисциплины, практики и т.п.	Аудиторная учебная работа обучающихся	Самостоятельная работа	Трудоёмкость, зач. ед.
	30	70	3

Виды, формы и сроки

текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации

Текущая аттестация проводится в сроки, предусмотренные учебным планом.

Форма аттестации - зачет.

1.6. Структура и содержание учебных занятий

I. Программа X-area – управление сбором и обработкой данных на дифрактометре STOE IPDS II. Аудиторные 5 час., самостоятельные занятия 15 час.

1. Отбор и подготовка кристалла для проведения монокристалльных исследований.
2. Структура основного меню программы X-area.
3. Проведение эксперимента PCA на дифрактометре STOE IPDS.
4. Обработка результатов эксперимента. Индексирование. Интеграция данных.

II. Общие принципы работы программы SHELX. Аудиторные 10 час., самостоятельные занятия 10 час.

1. Исходные данные рентгеноструктурного анализа.
2. Основные этапы PCA и критерии истинности
3. Принципы работы SHELX
4. Структура файла INS: примеры.
5. Структура файла INS: перечисление основных инструкций.
6. Структура файла .lst: примеры

III. Расшифровка и уточнение кристаллических структур в SHELX. Аудиторные 10 час., самостоятельные занятия 40 час.

1. Метод тотального уточнения
2. Файлы кристаллографической информации
3. Проверка структурных данных на кристаллохимическую достоверность.
4. Примеры решения структур минералов и неорганических соединений.

IV. Кристаллохимия анионоцентрированных соединений. Аудиторные 5 час., самостоятельные занятия 5 час.

1. Кристаллохимическая природа тетраэдров (XA4) и систематика комплексов анионоцентрированных тетраэдров.
2. Топологические и геометрические характеристики комплексов анионоцентрированных тетраэдров.
3. Кристаллические структуры соединений с комплексами анионоцентрированных тетраэдров: систематика и основные структурные принципы. Особенности уточнения структур.
4. Примеры решения структур минералов и неорганических соединений с анионоцентрированными комплексами.

Раздел 2. Обеспечение учебных занятий

2.1. Методическое обеспечение

2.1.1. Методическое обеспечение аудиторной работы

Подготовленные разработчиком презентации по всем темам курса

2.1.2. Методика обеспечения самостоятельной работы

- а) программа курса (в электронном виде);
- б) копии некоторых печатных работ, входящих в список рекомендуемой основной и дополнительной литературы;
- в) специальные компьютерные программы для выполнения самостоятельных заданий
- г) массивы дифракционных данных для выдачи аспирантам для выполнения самостоятельных заданий

2.1.3. Методика проведения текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации и критерии оценивания

Усвоение изучаемого материала проверяется в результате текущего контроля, проводимого в форме опроса. Зачет проводится в письменной форме (50% оценки) с учетом выполнения практических работ (50% оценки). При отсутствии сданных практических заданий ответ не зачитывается.

Критерием оценки результатов (зачет/незачет) является качество выполненных практических заданий и решенных кристаллических структур, глубина раскрытия темы и умение ответить на вопросы преподавателя.

2.1.4. Методические материалы для проведения текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации (контрольно-измерительные материалы)

Методические материалы для промежуточной аттестации включают:

- а) перечень индивидуальных заданий, массивов дифракционных данных для самостоятельного выполнения и решения аспирантами;
 - б) раздаточные материалы для выполнения самостоятельных заданий;
- Критерии оценки знаний и формальные требования к выполнению самостоятельных работ доводятся преподавателем до сведения обучающихся на первом занятии.

2.2. Кадровое обеспечение

2.2.1. Требования к образованию и (или) квалификации штатных преподавателей и иных лиц, допущенных к преподаванию дисциплины

К проведению занятий должны привлекаться преподаватели с высшим специальным образованием (специальность "Минералогия и кристаллография"), обладающие достаточным уровнем знаний и практическим опытом работы в области рентгеноструктурного анализа, а также имеющие опыт планирования и организации учебного процесса. Предпочтение отдаётся лицам, имеющим учёную степень и/или учёное звание.

2.2.2. Требования к обеспеченности учебно-вспомогательным и (или) иным персоналом

Учебно-вспомогательный персонал должен иметь соответствующее образование и обладать навыками организации работы с пользовательскими программными продуктами.

2.2.3. Методические материалы для оценки обучающимися содержания и качества учебного процесса

Методические материалы материалы и порядок оценки устанавливаются и утверждаются Ученым советом Геологического факультета СПбГУ

2.3. Материально-техническое обеспечение

2.3.1. Требования к аудиториям (помещениям, местам) для проведения занятий

Лекции и практические занятия проводятся в аудиториях, приспособленных для демонстрации мультимедийных презентаций. Большая часть практических занятий проводится в компьютерном классе, где установлены специальные программы, необходимые для изучения курса.

2.3.2. Требования к аудиторному оборудованию, в том числе к неспециализированному компьютерному оборудованию и программному обеспечению общего пользования

Для мультимедийных презентаций необходим компьютер, оснащенный программой Microsoft Office PowerPoint и полнофункциональной антивирусной программой, мультимедийный проектор и экран. Аудитория должна быть оснащена доской и мелом.

2.3.3. Требования к специализированному оборудованию

Специализированное оборудование не требуется

2.3.4. Требования к специализированному программному обеспечению

Необходимо наличие специализированных программ для работы по расшифровке и уточнению кристаллических структур, а также их визуализации.

2.3.5. Требования к перечню и объёму расходных материалов

1 пачка писчей бумаги (100 листов) для проведения аттестации, 1 ч/б картридж для лазерного принтера

2.4. Информационное обеспечение

2.4.1. Список обязательной литературы

1. The SHELX-97 Programm Manual.
2. G. M. Sheldrick A short history of SHELX Acta Cryst. (2008). A64, 112-122
3. Кривовичев С.В. Практические вопросы рентгеноструктурного анализа. 2. Расшифровка и уточнение кристаллических структур в комплексе SHELX. Санкт-Петербург, Санкт-Петербургский государственный университет, 2007, 112 с.
4. Кривовичев С.В. Практические вопросы рентгеноструктурного анализа. 1. Работа на монокристалльном дифрактометре Stoe IPDS. Санкт-Петербург, Санкт-Петербургский государственный университет, 2007, 84 с.

2.4.2. Список дополнительной литературы

1. D.W. Bennet Understanding single-crystal x-ray crystallography. Wiley, 2010.
2. С.В. Кривовичев, С.К. Филатов Кристаллохимия минералов и неорганических соединений с комплексами анионоцентрированных тетраэдров. Из-во С.-Пб университета. 2001. С. 199.

2.4.3. Перечень иных информационных источников

Раздел 3. Процедура разработки и утверждения рабочей программы

Разработчик(и) рабочей программы

Фамилия, имя, отчество	Учёная степень	Учёное звание	Должность	Контактная информация (служебный адрес электронной почты, служебный телефон)
Сийдра Олег Иоханнесович			доцент кафедры кристаллографии	e-mail: siidra@mail.ru тел 328-9647

В соответствии с порядком организации внутренней и внешней экспертизы образовательных программ проведена двухуровневая экспертиза:

первый уровень (оценка качества содержания рабочей программы и применяемых педагогических технологий)		
Наименование кафедры	Дата заседания	№ протокола
Кафедра кристаллографии	05.04.2013	№2
Кафедра минералогии		
второй уровень (соответствие целям подготовки и учебному плану образовательной программы)		
Экспертиза второго уровня выполнена в порядке, установленном приказом		
<i>должностное лицо</i>	<i>дата приказа</i>	<i>№ приказа</i>
Уполномоченный орган (должностное лицо)	Дата принятия решения	№ документа
Учебно-методическая комиссия Геологического факультета		

Иные документы об оценке качества рабочей программы

Документ об оценке качества	Дата документа	№ документа

Утверждение рабочей программы

Уполномоченный орган (должностное лицо)	Дата принятия решения	№ документа

Внесение изменений в рабочую программу

Уполномоченный орган (должностное лицо)	Дата принятия решения	№ документа