

Правительство Российской Федерации  
Санкт-Петербургский государственный университет  
Геологический факультет

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА  
УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ**

**МЕТОД РИТВЕЛЬДА**

специальная дисциплина образовательной программы подготовки аспиранта  
специальность 25.00.05 - минералогия, кристаллография

Язык(и) обучения \_\_\_\_\_ *русский* \_\_\_\_\_  
\_\_\_\_\_  
\_\_\_\_\_

Трудоёмкость \_\_\_\_\_ 2 \_\_\_\_\_ зачётных единиц

Регистрационный номер  
рабочей программы:

/	/
---	---

## Раздел 1. Характеристики, структура и содержание учебных занятий

### 1.1. Цели и задачи учебных занятий

Курс дает аспирантам основные представления об особенностях применения метода Ритвельда в рентгеновской порошковой дифрактометрии для определения и уточнения кристаллической структуры вещества, количественного и качественного рентгенофазового анализа и т.д.

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

Для успешного освоения дисциплины аспирант должен иметь предварительную подготовку по программам курсов «Кристаллография» и «Кристаллохимия», желательно иметь начальные знания о рентгенографии и рентгенофазовом анализе

### 1.3. Знания, умения, навыки, осваиваемые обучающимся

Курс дает представление о возможностях применения современной порошковой дифрактометрии для изучения структурных особенностей минералов и синтетических. Развитие навыков осуществления дифракционного эксперимента для проведения профильного анализа, качественного и количественного анализов, уточнение атомной структуры кристаллов с использованием данных порошковой дифрактометрии методом Ритвельда.

### 1.4. Перечень и объём активных и интерактивных форм учебных занятий

Программа курса предусматривает 16 часов аудиторных (семинары и практических) занятий и 64 часа самостоятельных занятий, на которых аспиранты выполняют самостоятельные задания с использованием специальных компьютерных программ (Toras, Fullprof 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.
	15	60	2

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**

1. Введение. Профильный анализ (2 часа семинар, 10 часов самостоятельные занятия). Проведение и предварительная обработка дифракционного эксперимента. Сглаживание, вычитание фона. Профильный анализ. Общий вид дифракционного максимума. Понятие о профильной функции. Основные профильные функции: функция Лоренца, Гаусса, Войта, псевдо-Войта, Пирсона. Полуширина и асимметрия рефлекса. Моделирование фона с помощью полинома и линейная экстраполяция. Порядок уточнения, сходимостъ МНК. Автоиндцирование.
2. Теоретические основы метода Ритвельда (2 часа семинар). Выражение для расчета интенсивности рефлексов. Подбор структурной модели для каждой из фаз в смеси. Учет фона, выбор степени полинома, экспериментальный фон. Учет геометрии съемки. Профильные и структурные факторы достоверности (R-факторы). Разностная дифрактограмма. Порядок уточнения параметров, общие уточняемые параметры, индивидуальные параметры фаз. Нестабильность уточнения. Корреляционная матрица.
3. Пакеты программ для проведения уточнения методом Ритвельда (FULLPROF, TOPAS) (3 часа семинар, 5 часов практические занятия, 40 часов самостоятельные занятия). Особенности уточнения сложных структур с тяжелыми и легкими атомами. Уточнение заселенностей позиций атомов. Уточнение структуры с использованием связанных параметров, фиксированных полиэдров/молекул. Понятие текстурирования, зависимость текстурирования от пробоподготовки и геометрии съемки. Методы минимизации текстуры. Причины уширения рефлексов на дифрактограмме.
4. Количественный рентгенофазовый анализ (1 час семинар, 2 часа практических занятий, 14 часов самостоятельные занятия). Методы внутреннего и внешнего стандартов. Общее выражение для расчета объемных долей фаз. Метод внутреннего стандарта, основные стандартные материалы. Метод внешнего стандарта, корундовые числа. Использование корундовых чисел в количественном РФА. Использование метода Ритвельда в количественном РФА.

## 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 слайдов презентаций, необходимых для решения самостоятельных задач;
- в) специальные компьютерные программы 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 - 3 задачи (50% оценки). При отсутствии сданных практических заданий ответ не зачитывается.

Критерием оценки результатов (зачет/незачет) является качество выполненных практических заданий и письменного ответа, 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 для самостоятельного выполнения 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.

Перечень контрольных задач:

Уточнение кристаллической структуры однофазного образца

Уточнение структур твердых растворов. Заселенность позиций атомов

Количественный анализ смеси с использованием м. Ритвельда

### 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, магистр геологии, химии), обладающие достаточным уровнем знаний и практическим опытом работы в области кристаллохимии и 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**

не требуется

### **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 занятия**

Лекции проводятся в аудиториях, приспособленных для демонстрации мультимедийных презентаций. 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.

### **2.3.3. Требования к специализированному оборудованию**

Специализированное оборудование не требуется

### **2.3.4. Требования к специализированному программному обеспечению**

Необходимо наличие специализированных программ для уточнения кристаллических структур методом Ритвельда

### **2.3.5. Требования к перечню и объёму расходных материалов**

1 пачка писчей бумаги (100 листов) для проведения аттестации

## **2.4. Информационное обеспечение**

### **2.4.1. Список обязательной литературы**

1. Пущаровский Д.Ю. Рентгенография минералов. ЗАО "Геоинформмарк" Москва, 2000.- 288 с.
2. Франк-Каменецкий В.А. Руководство по рентгеновскому исследованию минералов. Л., Недра, 1975. - 399с.

### **2.4.2. Список дополнительной литературы**

1. Порай-Кошиц М.А. Основы структурного анализа неорганических соединений. М.: Изд-во МГУ, 1982.
2. Бокий Г.Б. Кристаллохимия. М.: Наука, 1971.
3. Jcovazzo C. Fundamentals of Crystallography. 1st, 2nd, 3rd editions. Oxford University Press, 1992, 2002, 2011.
4. Young R.A. The Rietveld Method. Oxford University Press, 1993.

### **2.4.3. Перечень иных информационных источников**

Описание к специализированным программам Topas и Fullprof

### 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)
Кржижановская Мария Георгиевна	к.г. -		доцент кафедры кристаллографии	e-mail: <a href="mailto:mariya.krzhizhanovskaya@spbu.ru">mariya.krzhizhanovskaya@spbu.ru</a> , тел. 3501778
	М.Н.			

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