

Правительство Российской Федерации  
Санкт-Петербургский государственный университет  
Геологический факультет

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА  
УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ**

**Кристаллохимия и рентгенофазовый анализ  
«Crystallochemistry and X-Ray Analysis»**

**Уровень - бакалавриат  
Направление - 020700 Геология  
Профиль: Геохимия**

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

**Трудоёмкость** \_\_\_\_\_ 4 \_\_\_\_\_ **зачётных единиц**

Регистрационный номер  
рабочей программы:

/	/
---	---

Санкт-Петербург  
2013

## КРИСТАЛЛОХИМИЯ

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

#### 1.1. Цели и задачи учебных занятий

*Целью и задачами курса:*

Обучение студентов основам учения о кристаллическом строении вещества и получения навыков описания кристаллических структур минералов и химических соединений различных классов.

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

Для успешного освоения дисциплины студент должен иметь предварительную подготовку по программам дисциплин «Физика», «Химия», «Кристаллография», «Минералогия», «Кристаллохимия».

#### 1.3. Перечень формируемых компетенций (результаты обучения)

Понимание физических основ дифракции рентгеновских лучей на кристаллических материалах и методов рентген-дифракционного качественного фазового анализа кристаллических материалов природного и синтетического происхождения. Способность использовать полученные знания в своей профессиональной деятельности:

КП-1. Способен проводить качественный анализ фазового состава минералов и других кристаллических веществ и их смесей методом рентгенофазового анализа;

КП-2. Способен проводить экспериментальные работы по изучению структурных особенностей минералов и других кристаллических веществ рентген-дифракционным методом с использованием порошковых образцов;

КП-3. Готов решать задачи по определению основных характеристик кристаллических веществ (параметры элементарной ячейки, тип решетки Браве, рентгеновская плотность);

КП-4. Готов проводить работы по получению веществ и материалов с полезными свойствами.

КП-5. Готов решать задачи по изучению физических свойств кристаллов и их интерпретации на основе знания основных параметров кристаллической структуры;

#### 1.4. Знания, умения, навыки, осваиваемые обучающимися

- владение кристаллографической терминологией и классификацией, используемой отечественными и зарубежными кристаллографами при проведении рентгенофазового анализа;
- знание физических основ методов рентгеновской дифракции, современных подходов к постановке дифракционного эксперимента и решению кристаллохимических задач на поликристаллах;
- умение правильно выбрать подходящие методики рентген-дифракционного исследования;
- навыки самостоятельной работы с рентгеновскими дифрактометрами и специализированным программным обеспечением;

- владение специальными программными комплексами и базами порошковых данных, в том числе свободное использование базы данных ICDD – PDF–2 (международная база порошковых рентгендифракционных данных);
- владение современными методиками рентгенофазового анализа для определения фазового состава образцов минералов и пород, а также при исследовании изоморфизма, полиморфизма и политипии в минералах;
- владение практическими приемами изучения состава и структуры различных минералов и синтетических соединений с использованием современной порошковой рентгенографии.

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

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 зачетные единицы или 62 часа, в том числе 45 аудиторных занятий ( 7 часов лекций, 8 часов семинаров и 30 лабораторных работ) и 17 час самостоятельных занятий студентов. В курсе предусматривается широкое использование активных и интерактивных форм проведения занятий. Учащиеся знакомятся с современными рентгенографическими методами, используемыми для диагностики минералов, а также для исследования особенностей их состава и структуры. По результатам внеаудиторной работы (работа с литературными источниками, ресурсами Интернет, базами данных, рентгендифракционными спектрами) студенты под руководством преподавателя готовят решение индивидуальных задач по основным разделам дисциплины и защищают их на семинарах.

### 1.6. Организация учебных занятий

Трудоемкость, объёмы учебной работы и наполняемость групп обучающихся

Код модуля в составе дисциплины, практики и т.п.	Аудиторная учебная работа обучающихся										Самостоятельная работа				Трудоёмкость	
	лекции	семинары	консультации	практические занятия	лабораторные работы	контрольные работы	коллоквиумы	текущий контроль	промежуточная аттестация	под руководством преподавателя	в присутствии преподавателя	в т.ч. с использованием методических	текущий контроль	промежуточная аттестация		Объём занятий в интерактивных формах
<i>по формам обучения</i>																
Кристаллохимия	34			16					1			6			30	2
Рентгенофазовый анализ	7	8			30					8	6	6			24	2
<b>ИТОГО:</b>	<b>41</b>	<b>8</b>		<b>16</b>	<b>30</b>				<b>1</b>	<b>8</b>	<b>6</b>	<b>12</b>			<b>54</b>	<b>4</b>

### Виды, формы и сроки текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации

Код модуля в составе дисциплины, практики и т.п.	Промежуточная аттестация		Текущий контроль	
	Виды	Сроки	Формы	Сроки
<i>очная форма обучения</i>				
Кристаллохимия	Зачет	Проводится в сроки, предусмотренные учебным планом	Проверка освоения студентами каждого вида работы после завершения соответствующей лабораторной темы	Проводится в сроки, предусмотренные учебным планом
Рентгенофазовый анализ				

## 1.7. Структура и содержание учебных занятий

Введение. Лекции 1 ч.

Обусловленность свойств веществ их кристаллическим строением. Кристаллы как периодичные в трех измерениях постройки из атомов. Причины образования кристаллов. Распространенность кристаллических веществ. Кристаллическая структура. Кристаллохимия. Некоторые вехи из истории развития кристаллохимии. Методы экспериментального определения кристаллической структуры. Предсказательная сила кристаллохимии.

## 1. ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ КРИСТАЛЛОХИМИЯ

### 1.1. Симметрия структуры кристаллов

Понятие о преобразованиях и элементах симметрии кристаллов. Список точечных элементов симметрии. Кристаллографические системы координат.

Трансляционные (открытые) элементы симметрии. Трансляция. Кристаллические решетки, их разнообразие по геометрии, по типу центрированности, 14 типов кристаллических решеток. Винтовые оси симметрии и плоскости скользящего отражения: определение, разнообразие, обозначение, изображение.

Взаимодействие трансляционных элементов симметрии, примеры: взаимодействие элементов симметрии 2-го порядка с трансляцией, перпендикулярной осям и плоскостям, параллельной им и косо расположенной по отношению к ним; взаимодействие трансляционной компоненты элемента симметрии 2-го порядка с центром инверсии.

Пространственные группы симметрии кристаллов. Определение, понятие о выводе на примере триклинных и моноклинных групп. Обозначения пространственных групп в различных сингониях. Правильные системы точек (орбиты): определение, кратность, симметрия и степени свободы позиций, частные и общие позиции.

### 1.2. Принципы формирования и описания кристаллических структур

Плотнейшие упаковки. Слой плотнейшей упаковки. Чередование и обозначение слоев плотнейшей упаковки. Заполнение пустот упаковки. Принцип плотнейшей упаковки. Распространенность плотнейших упаковок в ионных кристаллах. Физические свойства кристаллов, обусловленные плотнейшей упаковкой.

Правила Полинга, их современное значение.

Описание и изображение кристаллических структур. Выбор элементарной ячейки. Позиционные и тепловые параметры атомов, заселенность позиций. Кристаллохимические формулы. Число формульных единиц в ячейке. Структурный тип, неоднозначность его определения. Графическое изображение структур. Справочники и банки структурных данных.

Ионная связь. Теория ионной связи Косселя. Образование LiF, NaCl. Роль плотнейшей упаковки в формировании ионных кристаллов.

Ковалентная связь. Теория и схематическое изображение ковалентной связи Льюиса. Образование молекул фтора F<sub>2</sub>, воды H<sub>2</sub>O, водорода H<sub>2</sub>, аммиака NH<sub>3</sub>. Гибридные орбитали sp<sup>3</sup> (метан CH<sub>4</sub>, алмаз C, кремний Si, германий Ge, ионы SiO<sub>4</sub>, PO<sub>4</sub>, SO<sub>4</sub> и др.), орбитали sp<sup>2</sup> (молекула метильного радикала CH<sub>3</sub>, слой графита C, ионы CO<sub>3</sub>, NO<sub>3</sub>, BO<sub>3</sub>), орбитали d<sup>2</sup>sp<sup>3</sup> (переходные металлы в октаэдрах) и др. Неподделенные электронные пары, строение молекул аммиака NH<sub>3</sub> и воды H<sub>2</sub>O; неполновалентные катионы Pb<sup>2+</sup>, Bi<sup>3+</sup> и др., стереоактивные и нестереоактивные неподделенные электронные пары.

Донорно-акцепторная связь. Сфалерит, вюртцит ZnS. Промежуточные типы связи.

Металлическая связь: ее место среди других типов химической связи, примеры.

Межмолекулярные взаимодействия. Диполь-дипольное взаимодействие, зависимость от величины диполя, структура HCl. Ван-дер-ваальсово взаимодействие, зависимость от размера молекул, кристаллы инертных газов.

Водородная связь. Природа водородной связи, структура льда. Роль электроотрицательности атомов в образовании водородной связи.

Гомодесмические и гетеродесмические соединения, примеры, зависимость свойств соединения от типа химической связи.

Межатомные расстояния и размеры атомов-ионов. Атомные радиусы. Ионные радиусы: классические и кристаллические, их зависимость от координационного числа иона, его заряда, спина переходных металлов; закономерности изменения в периодах и группах периодической системы химических элементов, примеры. Радиусы межмолекулярного

#### **1.4. Кристаллохимические явления**

Вывод и систематика основных кристаллохимических явлений.

Изоструктурность. Определение. Беспараметрические (галит NaCl, сильвин KCl, периклаз MgO, галенит PbS и др.) и параметрические изоструктурные соединения (напр., рутил TiO<sub>2</sub>, касситерит SnO<sub>2</sub>, стишовит SiO<sub>2</sub>), неоднозначность выделения изоструктурности.

Полиморфизм. Определение. Типы полиморфных превращений. Термодинамическое разделение на превращения I и II рода. Структурные типы полиморфизма: реконструктивные превращения и превращения типа смещения. Превращения типа порядок-беспорядок. Ротационный полиморфизм. Обратимые (энантиотропные) и необратимые (монотропные) превращения. «Изоструктурные полиморфные переходы» как пример изоструктурности. Примеры.

Тенденции изменения симметрии полиморфных модификаций и координационного числа катионов с температурой и давлением.

Полиптипия как частный случай полиморфизма, примеры.

Изоморфизм. Определение. Типы изоморфных замещений: замещение атомов, ионов, комплексов, вакансий. Изовалентные замещения, гетеровалентные замещения с вычитанием или заполнением пространства. Несовершенный (ограниченный) и совершенный (неограниченный) изоморфизм. Изодиморфизм.

Критерии изоморфизма: размер атомов-ионов, тип химической связи, температура, структурное разнообразие позиций, полярность замещений. Гомогенизация и распад твердых растворов, порядок-беспорядок в них. Диагональные ряды изоморфизма, их природа, вертикальные ряды, примеры.

Морфотропия: определение, примеры морфотропных рядов.

## 2. ОПИСАТЕЛЬНАЯ КРИСТАЛЛОХИМИЯ

### 2.1. Структуры простых веществ

Молекулярные структуры простых веществ: правило Юм-Розери, направленность изменения температуры плавления в рядах Ne-Ar-Kr-Xe; Cl<sub>2</sub>-Br<sub>2</sub>-I<sub>2</sub>; S-Se-Te. Атомные структуры простых веществ: СТ алмаза, химическая связь, причина понижения твердости в ряду соединений C – Si – Ge – Sn СТ алмаза, двойные алмазоподобные полупроводники; структура графита, химическая связь, графен; структуры лонсдейлита, C<sub>60</sub>, C<sub>70</sub>. Структуры металлов: СТ α-Fe, СТ Cu, СТ Mg.

### 2.2. Структуры соединений металла с металлом

Твердые растворы металлов. Причины полной изоморфной смесимости в ряду Ni-Co и несмесимости Au и Al. Частичная смесимость (Cu-Au), зависимость от температуры. Упорядоченные твердые растворы.

Интерметаллиды. Упорядоченные фазы металлов. Фазы Юм-Розери. Фазы Лавеса.

### 2.3. Структуры металлических фаз внедрения

Система Fe-C: кузнечное железо, сталь, мартенсит, аустенит, чугуны, цементит.

**2.4. Структуры соединений неметалла с неметаллом.** Структуры SiC. Структуры BN.

**2.5. Структуры галогенидов.** Химическая связь в галогенидах, СТ галита NaCl, СТ CsCl, СТ флюорита CaF<sub>2</sub>, СТ CdCl<sub>2</sub>, СТ CdI<sub>2</sub>.

**2.6. Структуры оксидов и гидроксидов.** Химическая связь в оксидах и гидроксидах. Периклаз MgO, торанит ThO<sub>2</sub>, брусит Mg(OH)<sub>2</sub>, гиббсит Al(OH)<sub>3</sub>, диоктаэдрический и триоктаэдрический слои. СТ корунда Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> – гематита Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>; ильменит FeTiO<sub>3</sub>. Структура льда H<sub>2</sub>O. Октаэдрические структуры с туннелями. Морфотропный ряд оксидов CO<sub>2</sub>, SiO<sub>2</sub>, TiO<sub>2</sub>, ZrO<sub>2</sub>, ThO<sub>2</sub>. СТ: пироклора. СТ перовскита. СТ шпинели: MgAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub> (прямая шпинель), магнетит Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> (обратная шпинель).

**2.7. Структуры сульфидов.** Особенности электронного строения и химических свойств атома серы по сравнению с атомом кислорода, типы химической связи в сульфидах.

Сульфиды щелочных и щелочноземельных элементов; тетраэдрические структуры с донорно-акцепторной связью, СТ сфалерита и вюртцита ZnS; сульфиды с донорно-акцепторной и ковалентной связью, пирит FeS<sub>2</sub>, кобальтин CoAsS, арсенопирит FeAsS; сульфиды с донорно-акцепторной и металлической связью, пирротин FeS, никелин NiAs, пентландит (Fe,Ni)<sub>9</sub>S<sub>8</sub>; сульфиды, переходные к металлическим, галенит PbS; молекулярные сульфиды: реальгар AsS, аурипигмент As<sub>2</sub>S<sub>3</sub>, киноварь HgS. Структуры сульфосолей: химическая связь в сульфосолях, основные черты структур.

**2.8. Кислородные соединения с треугольными TO<sub>3</sub> и тетраэдрическими TO<sub>4</sub> комплексами.** Их систематика по валентности центрального атома и отношению O:T.

Возможности полимеризации треугольников и тетраэдров в разных классах кислородных соединений. Общие закономерности изменения прочностных свойств (температура плавления, тепловое расширение и т.п.) для кислородных соединений.

**2.9. Структуры карбонатов, нитратов и боратов с треугольными радикалами.** СТ кальцита и СТ арагонита, морфотропные ряды кальцит-арагонит для карбонатов, нитратов и боратов, сопоставление свойств карбонатов и нитратов сходного строения. Основные черты структуры малахита Cu<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>(OH)<sub>2</sub>.

**2.10. Структуры боратов.** Основные черты кристаллического строения, жесткие борокислородные группировки, примеры структур.

**2.11. Структуры силикатов.** Кремнекислородные тетраэдр и октаэдр, их средние геометрические характеристики, способы объединения в кристаллических структурах, термодинамические условия образования. Классификации силикатов по Бреггу и по Либбау. Силикаты, содержащие кремнекислородные октаэдры (октаэдрические силикаты): общие черты их строения, распространенность, стишовит SiO<sub>2</sub> и др. примеры.

Знакомство с кристаллическими структурами, выделенными курсивом в программе курса лекций. Выполнение практических работ является допуском к экзамену.

## **Раздел 2. Обеспечение учебных занятий**

### **2.1. Методическое обеспечение**

#### **2.1.1. Методическое обеспечение аудиторной работы**

Подготовленные разработчиком презентации ко всем темам курса.

#### **2.1.2. Методика обеспечения самостоятельной работы**

- а) программа курса (в электронном виде);
- б) коллекции моделей и кристаллических структур для проведения практических занятий;
- в) компьютеры с доступом к программам рисования кристаллических структур по структурным данным, программное обеспечение для решения кристаллографических задач;
- г) Структурные базы данных ICSD ( база порошковых рентгенодифракционных данных) и ICSD (международная база кристаллических структур).

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

Усвоение изучаемого материала проверяется во время семинарских занятий, а также в результате текущего контроля. Текущий контроль осуществляется путем непосредственного контакта преподавателя с каждым студентом во время семинарских и индивидуальных занятий, путем проверки, анализа и обсуждения персональных заданий (описание кристаллических структур). Промежуточная аттестация проводится по окончании каждой темы практических занятий.

Итоговая оценка выставляется с использованием балльно-рейтинговой системы (см. п. 2.1.4).

Критерии оценивания результатов работы на семинарах:

10 – активное участие в дискуссии, глубокое и всестороннее знание обсуждаемых тем предмета в результате подготовки с использованием всех предложенных методических материалов (включая дополнительную литературу и Интернет-ресурсы), умение быстро и правильно отвечать на задаваемые вопросы.

5 баллов – недостаточная активность во время дискуссии, неуверенные ответы на задаваемые вопросы, неглубокое знание учебного материала, знакомство лишь с основными учебными пособиями.

Менее 5 баллов – незнание основного учебного материала, недостаточная подготовка к участию в семинарах.

Результаты работы во время семинарских занятий учитываются при итоговой аттестации студентов (см. ниже).

Критерии оценивания результатов самостоятельной работы:

30 баллов – полное и правильное выполнение всех домашних заданий (см. п. 1.7) .

15 баллов – выполнение домашних заданий с незначительными ошибками.

Менее 10 баллов – выполнение менее 50% домашних заданий.

Промежуточная аттестация проводится в виде зачета в письменной форме.

Экзаменационный билет содержит два вопроса из приведенного ниже списка (см. п. 2.1.4). Кроме того, обучающемуся могут быть заданы дополнительные вопросы из списка, предложенного для самоподготовки (см. п. 2.1.4).

Критерии оценивания результатов письменной работы:

60 баллов – ответ, обнаруживающий всестороннее, систематическое и глубокое знание учебного материала, предусмотренного программой.

50 баллов – ответ, показывающий полное и систематическое знание учебного материала, предусмотренного программой, усвоение основной литературы.

40 баллов – ответ, демонстрирующий знание основного учебного материала в объёме, необходимом для дальнейшей учёбы и предстоящей работы по профессии.

Менее 40 баллов – ответ, показывающий незнание основного учебного материала и слабое знакомство с основной литературой, рекомендованной программой.

При подготовке к семинарам, самостоятельной работе и промежуточной аттестации (зачету) рекомендуются вопросы для самопроверки (см. п. 2.1.4), примерные вопросы к экзамену (см. п. 2.1.4), учебные пособия (см. п. 2.4.1 – список обязательной литературы) и иные источники (см. п. 2.4.2 – список дополнительной литературы).

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

Методические материалы для текущего контроля и промежуточной аттестации включают:

- а) перечень вопросов для самопроверки и текущего контроля;
- б) примерный перечень вопросов для вынесения на экзамен;
- в) условия промежуточной (заключительной) аттестации по дисциплине



**вопросы для самопроверки и текущего контроля.**

**1. Вопросы по теоретической кристаллохимии**

- 1.1. Кристаллическое состояние вещества: основное свойство, причины образования, распространенность в Земле.
- 1.2. Понятие о трансляционных преобразованиях и элементах симметрии кристаллических веществ: типы решеток (почему решеток 14, а не 7?), винтовые оси, плоскости скользящего отражения.
- 1.3. Теорема о взаимодействии элементов симметрии 2-го порядка с трансляцией, косо расположенной по отношению к осям и плоскостям.
- 1.4. Теорема о взаимодействии трансляционной компоненты элемента симметрии 2-го порядка с центром инверсии.
- 1.5. Пространственные группы симметрии кристаллов: определение, понятие о выводе на примере триклинных и моноклинных групп.
- 1.6. Международные (сокращенные) обозначения пространственных групп симметрии кристаллов в разных сингониях.
- 1.7. Правильные системы точек (орбиты) пространственных групп: определение, кратность, симметрия и степень свободы позиции, частные и общие позиции.
- 1.8. Принцип плотнейшей упаковки; представленность идеальной плотнейшей упаковки и принципа плотнейшей упаковки в минералах земной коры. Свойства минералов, обусловленные плотнейшей упаковкой.
- 1.9. Правила Полинга формирования координационного полиэдра (правила I, II, V) и сочленения полиэдров между собой (правила III, IV) для соединений с ионно-ковалентным характером химической связи.
- 1.10. Кристаллохимические формулы. Структурные типы.
- 1.11. Роль ионной и металлической связей в частом проявлении геометрии

#### **4. Вопросы по описательной кристаллохимии**

- 2.1. Молекулярные структуры простых веществ: правило Юм-Розери, направленность изменения температуры плавления в рядах Ne-Ar-Kr-Xe, Cl<sub>2</sub>-Br<sub>2</sub>-I<sub>2</sub>, S-Se-Te.
- 2.2. Атомные структуры простых веществ: СТ алмаза, причина понижения твердости в ряду соединений C – Si – Ge – Sn СТ алмаза, двойные алмазоподобные полупроводники; СТ графита, химическая связь, графен; структура лонсдейлита.
- 2.3. Структуры металлов: СТ α-Fe (ОЦК), СТ Cu или γ-Fe (ГЦК), СТ Mg (ГПУ).
- 2.3. Твердые растворы металла в металле: пределы замещения в рядах Ni-Co, Au-Al и Cu-Au в атмосферных условиях, зависимость пределов от температуры, упорядочение при охлаждении.
- 2.4. Интерметаллиды: упорядоченные фазы металлов, электронные фазы Юм-Розери, фазы Лавеса.
- 2.5. Структуры металлических фаз внедрения: система Fe-C – кузнечное железо, сталь, мартенсит, аустенит, чугуны.
- 2.6. Структуры соединений неметалла с неметаллом: политипия SiC, алмазная и графитовая модификации BN.
- 2.7. Структуры галогенидов. Химическая связь в галогенидах, СТ галита NaCl, СТ CsCl, СТ флюорита CaF<sub>2</sub>, СТ CdCl<sub>2</sub>, СТ CdI<sub>2</sub>.
- 2.8. Структуры оксидов и гидроксидов: периклаз MgO, торианит ThO<sub>2</sub>, брусит Mg(OH)<sub>2</sub>, гиббсит Al(OH)<sub>3</sub>, корунд Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, гематит Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, ильменит FeTiO<sub>3</sub>, перовскит CaTiO<sub>3</sub>, шпинель MgAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub>, магнетит Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>, лед H<sub>2</sub>O, «туннельные» соединения.
- 2.9. Структуры сульфидов, химическая связь в них: сульфиды щелочных и Условия промежуточной (заключительной) аттестации:

В итоговой оценке учитываются:

- результаты письменной работы на зачете (от 40 до 60 баллов, но не менее 50% от итоговой оценки);
- результаты работы на семинарских занятиях (от 5 до 10 баллов);
- результаты самостоятельных занятий (от 5 до 30 баллов).

Максимальное количество баллов, которое может получить обучающийся за изученный курс, составляет 100 баллов.

Для получения итоговой оценки «зачет» необходимо набрать 70–100 баллов.

График (сроки) текущего контроля, критерии оценки знаний при текущем контроле и условия промежуточной аттестации 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 чтению лекций и проведению лабораторных занятий должны привлекаться преподаватели с высшим специальным образованием (специальность кристаллография, магистр геологии), обладающие достаточным уровнем знаний и практическим опытом работы в области порошковой дифрактометрии, 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 должен обладать навыками работы с порошковыми дифрактометрами и программными комплексами.

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

Студентам предлагается анонимная анкета-отзыв для оценки качества преподавания дисциплины. Обобщённые данные анкет используются для совершенствования учебного процесса. Анкета содержит четыре вопроса, каждый оценивается по шкале от 1 до 5 баллов. В вопросах оценивается:

- информативность курса;
- педагогическое мастерство (доступность изложения материала и качество методических материалов);
- личные качества преподавателя (доброжелательность и тактичность);
- объективность в оценке знаний обучающихся.

### **2.3. Материально-техническое обеспечение**

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

Стандартная аудитория, оснащенная демонстрационным LCD проектором. Для самостоятельной работы студентов используются компьютеры с профессиональным программным обеспечением, доступ к базам структурных данных.

#### **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.

Лабораторные занятия проводятся в компьютерном классе на 5-6 мест, требуется принтер.

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

Модели кристаллических структур

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

Програмное обеспечение, комплектующее дифрактометр, MS Office

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

1 пачка писчей бумаги формата А4 для печати отчетов по лабораторным занятиям, выполнения самостоятельной работы и проведения зачета.

## **2.4. Информационное обеспечение**

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

1. Бокий Г.Б. Кристаллохимия. 3-е издание, 1971; 2-е издание, 1960, М.: Наука.
2. Брегг У., Кларингбул Г. Кристаллическая структура минералов. М.: Мир, 1967.
3. Бубнова Р.С., Филатов С.К. Высокотемпературная кристаллохимия боратов и боросиликатов. СПб: Наука, 2008. 760 с.
4. Доливо-Добровольский В.В. Кристаллохимия. СПб: Изд. СПбГИ, 1999.
- Либау Ф. Структурная химия силикатов. М.: Мир, 1988.
5. Пушаровский Д.Ю., Урусов В.С. Структурные типы минералов. М.: Изд. МГУ, 1987.
6. Урусов В.С. Теоретическая кристаллохимия. М.: Изд-во МГУ. 1987.
7. Урусов В.С., Еремин Н.Н. Кристаллохимия. М.: Изд-во МГУ, 2010. 255 с.
8. Филатов С.К. Высокотемпературная кристаллохимия. Л.: Недра. 1990.

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

1. Егоров-Тисменко Ю.К., Литвинская Г.П., Загальская Ю.Г. Кристаллография. М.: Изд-во МГУ. 1992.
2. Котельникова Е.Н., Филатов С.К. Кристаллохимия парафинов. СПб: Изд-во журнала «Нева», 2002.
3. Кривовичев С.В., Филатов С.К. Кристаллохимия минералов и неорганических соединений с комплексами анионоцентрированных тетраэдров. СПб: Изд-во СПбГУ, 2001.
4. Нараи-Сабо И. Неорганическая кристаллохимия. Будапешт: Изд. АН Венгрии, 1969.
- Пушаровский Д.Ю., Пушаровский Ю.М. Состав и строение мантии Земли. СОЖ. 1998. N 11. С. 111-119.
5. Рингвуд А.Е. Состав и петрология мантии Земли. М.: Недра, 1981.
6. Filatov S.K., Hazen R.M. High-temperature and high-pressure crystal chemistry. In: Advanced mineralogy. Ed. A.S.Marfunin. Springer-Verlag. 1994. Vol. 1. P. 76-90.
7. Hazen R.M., Finger L.W. Comparativ crystal chemistry. London. 1982.

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

<http://www.iucr.org> International Tables for X-ray crystallography. Vol.A, A1  
<http://truff.geo.arizona.edu/AMS/amcsd.php> (База данных кристаллических структур American Mineralogist)

### 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)
Филатов Станислав Константинович	Д. геол. мин. наук	Проф	Профессор	<a href="mailto:filatov.stanislav@gmail.com">filatov.stanislav@gmail.com</a> <a href="tel:3501778">350 17 78</a>

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
кристаллографии	05.04.2013	№2
минералогии	12.04.2013	№6
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

#### 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

---

## РЕНТГЕНОФАЗОВЫЙ АНАЛИЗ

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

#### 1.1. Цели и задачи учебных занятий

*Целью курса:*

Получение студентами теоретических основ и практических навыков по использованию порошковых рентгенографических методов для диагностики минералов, а также для исследования особенностей их состава и структуры. Подготовка к освоению других кристаллографических дисциплин («Метод Ритвельда», «Рентгеновские методы изучения дефектов в кристаллах», «Кристаллохимия и рентгенография глин» и др.).

Различные взгляды на объект и предмет стратиграфии.

*Задачи курса:*

Изучение физических основ дифракции рентгеновских лучей в кристаллах;

Освоение методов рентгенографической съемки на современных порошковых дифрактометрах;

Изучение приемов обработки рентгендифракционных спектров при решении задач качественного рентгенофазового анализа, а также при исследовании изоморфизма, полиморфизма и политипии в минералах;

Освоение методов определения параметров элементарной ячейки на основе рентгендифракционных спектров, полученных на современных дифрактометрах;

Овладение практическими приемами изучения состава и структуры различных минералов с использованием порошковой рентгенографии.

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

Для успешного освоения дисциплины студент должен иметь предварительную подготовку по программам дисциплин «Физика», «Химия», «Кристаллография», «Минералогия», «Кристаллохимия».

#### 1.3. Перечень формируемых компетенций (результаты обучения)

Понимание физических основ дифракции рентгеновских лучей на кристаллических материалах и методов рентген-дифракционного качественного фазового анализа кристаллических материалов природного и синтетического происхождения. Способность использовать полученные знания в своей профессиональной деятельности:

КП-1. Способен проводить качественный анализ фазового состава минералов и других кристаллических веществ и их смесей методом рентгенофазового анализа;

КП-2. Способен проводить экспериментальные работы по изучению структурных особенностей минералов и других кристаллических веществ рентген-дифракционным методом с использованием порошковых образцов;

КП-3. Готов решать задачи по определению основных характеристик кристаллических веществ (параметры элементарной ячейки, тип решетки Браве, рентгеновская плотность);

КП-4. Готов проводить работы по получению веществ и материалов с полезными свойствами.

КП-5. Готов решать задачи по изучению физических свойств кристаллов и их интерпретации на основе знания основных параметров кристаллической структуры;

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

- владение кристаллографической терминологией и классификацией, используемой отечественными и зарубежными кристаллографами при проведении рентгенофазового анализа;

- владение специальными программными комплексами и базами порошковых данных, в том числе свободное использование базы данных ICDD – PDF–2 (международная база

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

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 зачетные единицы или 62 часа, в том числе 45 аудиторных занятий ( 7 часов лекций, 8 часов семинаров и 30 лабораторных работ) и 17 час самостоятельных занятий студентов. В курсе предусматривается широкое использование активных и интерактивных форм проведения занятий. Учащиеся знакомятся с современными рентгенографическими методами, используемыми для диагностики минералов, а также для исследования особенностей их состава и структуры. По результатам внеаудиторной работы (работа с литературными источниками, ресурсами Интернет, базами данных, рентгендифракционными спектрами) студенты под руководством преподавателя готовят решение индивидуальных задач по основным разделам дисциплины и защищают их на семинарах.

### 1.6. Организация учебных занятий

Трудоемкость, объёмы учебной работы и наполняемость групп обучающихся

Код модуля в составе дисциплины, практики и т.п.	Аудиторная учебная работа обучающихся										Самостоятельная работа				Трудоемкость	
	лекции	семинары	консультации	практические занятия	лабораторные работы	контрольные работы	коллоквиумы	текущий контроль	промежуточная аттестация	под руководством преподавателя	в присутствии преподавателя	в т.ч. с использованием методических материалов	текущий контроль	промежуточная аттестация		Объём занятий в интерактивных формах
<i>по формам обучения</i>																
Кристаллохимия	34			16								6			30	2
Рентгенофазовый анализ	7	8			30				1	8	6	6			24	2
<b>ИТОГО:</b>	<b>41</b>	<b>8</b>		<b>16</b>	<b>30</b>				<b>1</b>	<b>8</b>	<b>6</b>	<b>12</b>			<b>54</b>	<b>4</b>

#### Виды, формы и сроки

Код модуля в составе дисциплины, практики и т.п.	Промежуточная аттестация		Текущий контроль	
	Виды	Сроки	Формы	Сроки
<i>очная форма обучения</i>				
Кристаллохимия	Зачет	проводится в сроки	проверка освоения студентами каждого вида	проводится в сроки, предусмотренные
Рентгенофазовый анализ				

## 1.7. Структура и содержание учебных занятий

### 1. Введение. Лекции 1 ч.

Применение современных методов рентгенографии в изучении структуры кристаллов. Краткий обзор проблематики этих исследований.

Задачи курса.

### 2. Физические основы рентгенографии кристаллов. Лекции 1 ч. Семинары 1 ч.

Открытие и свойства рентгеновских лучей. Сплошной и характеристический спектры. Рентгеновские трубки. Взаимодействие рентгеновских лучей с кристаллами. Поглощение рентгеновских лучей и выбор рентгеновского излучения. Применение  $\beta$ -фильтров и монохроматоров для монохроматизации рентгеновских лучей. Дифракция рентгеновских лучей в кристаллах. Уравнение Брэгга-Вульфа.

### 3. Аппаратура и методы получения рентген-дифракционных спектров. Лекции 1 ч.

Семинары 1 ч.

Основные схемы фокусировки в порошковых дифрактометрах и фотокамерах. Дифракционная картина при съемке в камере Дебая-Шерера и расчет рентгендифракционного спектра. Метод порошка в дифрактометрическом варианте. Современные рентгеновские дифрактометры. Автоматический дифрактометр Rigaku MiniFlex II. Основные узлы рентгеновского дифрактометра: трубка, счетчик, гониометр и их основные параметры. Оптическая схема гониометра. Монохроматоры. Щели, ограничивающие горизонтальную и вертикальную расходимость пучка. Особенности геометрии дифракции рентгеновских лучей при различных фокусирующих системах, съемка на отражение и прохождение.

### 4. Качественный фазовый анализ. Лекции 1 ч. Семинары 1 ч.

Диагностика мономинеральных фаз и качественный рентгенофазовый анализ смесей минералов и химических соединений (программный комплекс «PDXL2»). Определители фаз. Базы рентгеновских данных ICDD – PDF-2 (международная база порошковых рентгендифракционных данных) и ICSD (база структур неорганических соединений).

### 5. Индексирование рентгеновских спектров. Лекции 1 ч. Семинары 1 ч.

Индексы интерференции. Квадратичная формула уравнения Брэгга-Вульфа. Вывод на примере кубической сингонии. Индексирование кристалла кубической сингонии. Индексирование кристаллов различной симметрии по известным параметрам с использованием квадратичных формул (программа «INDX»). Значение индексирования при рентгеновском исследовании минералов. Контроль надежности индексирования порошкограмм по Де-Вольфу.

Закономерные погасания дифракционных рефлексов. Определение типа решетки Браве.

Определение параметра элементарной ячейки кубического кристалла и погрешности его измерения. Расчет параметров элементарной ячейки минерала методом наименьших квадратов. Программа «Unit Cell». Причины небольших изменений параметров элементарной ячейки. Систематические и случайные ошибки (дифрактометрический метод) и способы получения точных значений параметров элементарной ячейки. Рекомендации по выбору максимумов для определения линейных и угловых параметров ячейки различной симметрии.

Рентгеновская плотность вещества (минерала)  $D_x \pm \Delta D_x$ . Сопоставление с экспериментальным значением  $D_{\text{эксп}}$ . Причины их расхождений.



7. Определение состава и структурных особенностей минералов по рентгенографическим данным. Семинары 2 ч.

Рентгеновская диагностика слоистых силикатов. Определение состава и структурного состояния полевых шпатов. Определение состава пирита, соотношения S/As в арсенипирите и его типоморфная роль.

8. Лабораторные занятия и индивидуальная работа студентов под руководством преподавателя. 38 ч.

Занятие 1. Знакомство с рентгеновской лабораторией и правилами техники безопасности. Способы приготовления образцов для съемки в рентгеновском порошковом дифрактометре. Приготовление образца для съемки задачи 1 (минерал кубической сингонии).

Занятие 2. Коллоквиум по методу рентгенофазового анализа, рентгентехнике и технике безопасности. Съемка на автоматическом дифрактометре Rigaku MiniFlex II. Порядок включения и выключения дифрактометра. Знакомство с управляющим программным обеспечением. Задание условий съемки рентгенограмм. Съемка рентгенограммы минерала кубической сингонии (задача 1).

Занятие 3-4. Знакомство с программным обеспечением для обработки рентгенограмм и идентификации фаз, рентген-дифракционными базами данных. Обработка учебной рентгенограммы. Проведение качественного фазового анализа.

Занятие 5-6. Индексирование порошковых рентгенограмм. Определение типа решетки Браве. Расчет параметра элементарной ячейки и рентгеновской плотности минерала кубической сингонии. Подготовка отчета по первой задаче.

Занятие 7-8. Съемка на дифрактометре образца, представленного смесью двух фаз (минерал средней категории и вещество кубической сингонии) (задача 2). Обработка учебной рентгенограммы. Диагностика двухфазного образца (программный комплекс «PDXL2»). Использование метода коэффициентов для количественного анализа двухфазного образца.

Занятие 9-10. Эталонирование съемки. Определение параметров элементарной ячейки, включая уточнение индексирования, на примере минералов средней категории (программы «INDX», «Unit Cell», расчетные программы Excel). Подготовка отчета по второй задаче.

Занятие 11-12. Рентгенографическое исследование минералов низшей категории (задача 3).

Занятие 13-14. Рентгеновская диагностика основных типов породообразующих минералов (слоистые силикаты, полевые шпаты и др.).

Занятие 15-16. Съемка на дифрактометре контрольного образца. Обработка полученной рентгенограммы. Определение фазового состава. Эталонирование съемки и расчет параметров элементарной ячейки. Отчет по контрольной задаче.

## Раздел 2. Обеспечение учебных занятий

### 2.1. Методическое обеспечение

#### 2.1.1. Методическое обеспечение аудиторной работы

Подготовленные разработчиком презентации ко всем темам курса.

#### 2.1.2. Методика обеспечения самостоятельной работы

а) программа курса (в электронном виде);

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

Усвоение изучаемого материала проверяется во время семинарских занятий, а также в результате текущего контроля. Текущий контроль осуществляется путем непосредственного контакта преподавателя с каждым студентом во время семинарских и индивидуальных занятий, путем проверки, анализа и обсуждения персональных заданий (результаты обработки рентген-дифракционных спектров, таблицы с результатами расчета межплоскостных расстояний, интенсивностей рефлексов, их погрешностей, определение фазового состава образцов, типа решетки Браве, результаты индифференцирования и расчета параметров элементарной ячейки).

Промежуточная аттестация проводится в форме зачета.

Итоговая оценка выставляется с использованием балльно-рейтинговой системы (см. п. 2.1.4).

#### Критерии оценивания результатов работы на семинарах:

10 – активное участие в дискуссии, глубокое и всестороннее знание обсуждаемых тем предмета в результате подготовки с использованием всех предложенных методических материалов (включая дополнительную литературу и Интернет-ресурсы), умение быстро и правильно отвечать на задаваемые вопросы.

5 баллов – недостаточная активность во время дискуссии, неуверенные ответы на задаваемые вопросы, неглубокое знание учебного материала, знакомство лишь с основными учебными пособиями.

Менее 5 баллов – незнание основного учебного материала, недостаточная подготовка к участию в семинарах.

Результаты работы во время семинарских занятий учитываются при итоговой аттестации студентов (см. ниже).

#### Критерии оценивания результатов самостоятельной работы:

30 баллов – полное и правильное выполнение всех домашних заданий (см. п. 1.7).

15 баллов – выполнение домашних заданий с незначительными ошибками.

Менее 10 баллов – выполнение менее 50% домашних заданий.

Промежуточная аттестация проводится в виде зачета в письменной форме. Экзаменационный билет содержит два вопроса из приведенного ниже списка (см. п. 2.1.4). Кроме того, обучающемуся могут быть заданы дополнительные вопросы из списка, предложенного для самоподготовки (см. п. 2.1.4).

Критерии оценивания результатов письменной работы:

60 баллов – ответ, обнаруживающий всестороннее, систематическое и глубокое знание учебного материала, предусмотренного программой.

50 баллов – ответ, показывающий полное и систематическое знание учебного материала, предусмотренного программой, усвоение основной литературы.

40 баллов – ответ, демонстрирующий знание основного учебного материала в объёме, необходимом для дальнейшей учёбы и предстоящей работы по профессии.

Менее 40 баллов – ответ, показывающий незнание основного учебного материала и слабое знакомство с основной литературой, рекомендованной программой.

При подготовке к семинарам, самостоятельной работе и промежуточной аттестации (зачету) рекомендуются вопросы для самопроверки (см. п. 2.1.4), примерные вопросы к экзамену (см. п. 2.1.4), учебные пособия (см. п. 2.4.1 – список обязательной литературы) и иные источники (см. п. 2.4.2 – список дополнительной литературы).

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

Методические материалы для текущего контроля и промежуточной аттестации включают:

- а) перечень вопросов для самопроверки и текущего контроля;
- б) примерный перечень вопросов для вынесения на экзамен;
- в) условия промежуточной (заключительной) аттестации по дисциплине

Вопросы для самопроверки и текущего контроля.

К разделу 1.

Задачи, решаемые методами рентгенофазового анализа.

К разделу 2.

Природа рентгеновских лучей. Опыт Лауэ.

Спектр рентгеновского излучения и его основные свойства (зависимость от силы тока, напряжения, вещества анода).

Серии рентгеновских лучей, используемые в рентгеноструктурном анализе.

Природа соотношения  $\lambda_{K\alpha} > \lambda_{K\beta}$ ,  $I_{K\alpha} > I_{K\beta}$ .

Аноды, используемые в рентгенофазовом анализе. Критерии выбора анода для изучения различных кристаллических веществ.

Можно ли получить рентгенограмму пирита  $FeS_2$  на  $Cu$  - излучении?

Обоснуйте ответ.

Предельные условия дифракционного эффекта ( $d \min$ ).

К разделу 3.

Устройство рентгеновской трубки.

$\beta$ -фильтры и монохроматоры.

Основные схемы фокусировки рентгеновских дифрактометров. Съёмки на отражение и на прохождение.

Блок-схема автоматического дифрактометр Rigaku MiniFlex II.

Программы обработки данных на автоматического дифрактометр Rigaku MiniFlex II. Поиск пиков.

Техника безопасности при работе в рентгеновской лаборатории.+

К разделу 4.

Возможности определения фазового состава образца с использованием порошковой базы данных ICDD – PDF–2

Порядок работы при определении кристаллической фазы (минерала) с использованием комплекса программ «PDXL2».

Фазовый анализ поликомпонентной смеси.

К разделу 5.

Индексы интерференции.

Значение индицирования при рентгеновском исследовании минералов.

Индицирование рентгенограммы с использованием программы «INDX»

Проверка надежности индицирования порошкограмм.

Погасание дифракционных максимумов в случае центрированных решеток.

К разделу 6.

Методы определения параметра элементарной ячейки кубического кристалла и погрешности его измерения..

Расчет параметров элементарной ячейки минерала методом наименьших квадратов

Прецизионное определение параметров элементарной ячейки. Причины их изменения.

Сопоставление рентгеновской плотности минерала  $D_x$  с экспериментальным значением  $D_{\text{эксп}}$ . Причины их расхождений.

### К разделу 7.

Возможности определения состава и структурных особенностей минералов по рентгенографическим данным.

Определение состава и структурного состояния полевых шпатов.

### Примерные вопросы на экзамене.

1. Природа и свойства рентгеновских лучей.
2. Тормозное рентгеновское излучение. Его источник, спектральный состав, коротковолновая граница, непрерывность, максимум, зависимость от напряжения и силы тока в трубке, от вещества анода.
3. Характеристическое рентгеновское излучение. Его источник, спектральный состав, зависимость от напряжения и силы тока в трубке, от вещества анода, соотношение  $\lambda_{K\alpha}$  и  $\lambda_{K\beta}$ ,  $IK\alpha$  и  $IK\beta$ ,  $\lambda_{K\alpha 1}$  и  $\lambda_{K\alpha 2}$ ,  $IK\alpha 1$  и  $IK\alpha 2$ , порог возбуждения и оптимальное напряжение.
4. Дифракция рентгеновских лучей. Уравнение Брэгга-Вульфа. Предельные условия дифракционного эффекта ( $d_{\min}$ ).
5. Поглощение рентгеновских лучей. Вторичное рентгеновское излучение.
6. Рентгеновская аппаратура (технические характеристики и основные узлы рентгеновского дифрактометра RIGAKU MiniFlexII).
  
7. Метод порошка в дифрактометрическом варианте. Описание оптической системы.
8. Аноды, используемые в рентгенофазовом анализе. Влияние состава образца на выбор излучения..
9. Схема регистрации рентгеновской дифракционной картины на аппарате RIGAKU MiniFlexII в непрерывном и пошаговом режимах. Выбор условий съемки (величина шага сканирования по углу  $2\theta^\circ$ , время накопления импульсов в точке и др. параметры).
10. Метод порошка в фотографическом варианте, его разновидности.
11. Обработка рентгеновских дифракционных экспериментальных данных. Выделение максимумов, определение их положения, расчет интенсивностей.
  
12. Расчет межплоскостных расстояний. Систематические и случайные ошибки определения межплоскостных расстояний (на примере дифрактометрического метода).
13. Эталонирование съемки.
14. Определение кристаллической фазы (минерала). Компьютерная база данных ICDD – PDF–2
15. Определение кристаллической фазы (минерала). Комплекс программ «PDXL2».
16. Квадратичная формула уравнения Брэгга-Вульфа. Вывод на примере кубической сингонии.
17. Индексирование рентгенограммы кристалла кубической сингонии.
18. Индексирование кристаллов по известным параметрам с использованием квадратичных формул. Программа «INDX».

19. Определение типа решетки Браве по дебаеграмме.
20. Определение параметра элементарной ячейки кубического кристалла и погрешности его измерения.
21. Расчет параметров элементарной ячейки минерала методом наименьших квадратов. Программа «Unit Cell».
22. Рентгеновская плотность вещества (минерала)  $D_x \pm \Delta D_x$ .
23. Рентгеновская диагностика слоистых силикатов.
24. Определение состава пирротина и арсенопирита по рентгенографическим данным.

Условия промежуточной (заключительной) аттестации:

В итоговой оценке учитываются:

- результаты письменной работы на зачете (от 40 до 60 баллов, но не менее 50% от итоговой оценки);
- результаты работы на семинарских занятиях (от 5 до 10 баллов);
- результаты самостоятельных занятий (от 5 до 30 баллов).

Максимальное количество баллов, которое может получить обучающийся за изученный курс, составляет 100 баллов.

Для получения итоговой оценки «зачет» необходимо набрать 70–100 баллов.

График (сроки) текущего контроля, критерии оценки знаний при текущем

## **2.2. Кадровое обеспечение**

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

К чтению лекций и проведению лабораторных занятий должны привлекаться преподаватели с высшим специальным образованием (специальность кристаллография, магистр геологии), обладающие достаточным уровнем знаний и практическим опытом работы в области порошковой дифрактометрии, 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 должен обладать навыками работы с порошковыми дифрактометрами и программными комплексами.

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

Студентам предлагается анонимная анкета-отзыв для оценки качества преподавания дисциплины. Обобщённые данные анкет используются для совершенствования учебного процесса. Анкета содержит четыре вопроса, каждый оценивается по шкале от 1 до 5 баллов. В вопросах оценивается:

- информативность курса;
- педагогическое мастерство (доступность изложения материала и качество методических материалов);
- личные качества преподавателя (доброжелательность и тактичность);
- объективность в оценке знаний обучающихся.

## **2.3. Материально-техническое обеспечение**

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

Стандартная аудитория, оснащенная демонстрационным LCD проектором. Для самостоятельной работы студентов используются компьютеры с профессиональным программным обеспечением для рентгенофазового анализа, доступ к базам по порошковым и структурным данным.

### **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.

Лабораторные занятия проводятся в компьютерном классе на 5-6 мест, требуется принтер.

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

3 рентгеновских порошковых дифрактометра Rigaku MiniFlex II, агатовые ступки для растирания проб .

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

Програмное обеспечение, комплектующее дифрактометр, MS Office

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

1 пачка писчей бумаги формата А4 для печати отчетов по лабораторным занятиям, выполнения самостоятельной работы и проведения зачета.

### **2.4. Информационное обеспечение**

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

1. Пушаровский Д.Ю. Рентгенография минералов. М.: Геоинформмарк. 2000. 296 с.
2. Руководство по рентгеновскому исследованию минералов. Л.: Недра. 1973. 399 с.
3. Рентгенография основных типов породообразующих минералов. Л.: Недра. 1983. 359 с.
4. Ковба Л.М., Трунов В.К. Рентгенофазовый анализ. М., МГУ, 1976. 231 с.
5. Шепелев Ю.Ф. Инструментальные методы рентгеновской дифрактометрии поликристаллов. Учебное пособие. СПб: Изд-во СПбГУ. 2004. 56 с.
6. International Tables for X-ray crystallography. Vol.A. Space- Group symmetry. 5th edit. Springer. 2005. 750 p.

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

1. Азаров Л., Бургер М. Метод порошка в рентгенографии. М., изд. ИЛ, 1961.
2. Васильев В.К., Нахмансон М.С. Качественный рентгенофазовый анализ. Новосибирск: Наука. 1986.
3. Липсон Г., Стипл Г. Интерпретация порошковых рентгено-грамм. М.: Мир. 1972 284 с
4. Modern Powder Diffraction. Reviews in Mineralogy / Eds. D.L.Bish, J.E.Post. Washington, 1989. Vol. 20

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

<http://www.iucr.org> International Tables for X-ray crystallography. Vol.A, A1  
<http://rruff.geo.arizona.edu/AMS/amcsd.php> (База данных кристаллических структур American Mineralogist)

### **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)
Семепнова Татьяна Федоровна	К. геол. мин. наук	Доц.	Доцент	<a href="mailto:tfsemenova@yandex.ru">tfsemenova@yandex.ru</a> <a href="mailto:t.semenova@spbu.ru">t.semenova@spbu.ru</a> 350 17 78

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

первый уровень (оценка качества)		
Наименование кафедры	Дата заседания	№ протокола
кристаллографии	05.04.2013	№2
минералогии	12.04.2013	№6
второй уровень		
Экспертиза второго уровня выполнена в порядке, установленном приказом		
<i>должностное лицо</i>	<i>дата приказа</i>	<i>№ приказа</i>
(должностное лицо)	Дата принятия решения	№ документа

Иные документы об оценке качества рабочей программы

Документ об оценке качества	Дата документа	№ документа

Утверждение рабочей программы

(должностное лицо)	Дата принятия решения	№ документа

Внесение изменений в рабочую программу

(должностное лицо)	Дата принятия решения	№ документа