

Правительство Российской Федерации
Санкт-Петербургский государственный университет
Геологический факультет

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА
УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ**

**Рентгено-дифракционные методы изучения природных и синтетических
материалов**

X-ray Powder Diffraction of Natural and Synthetic Materials

Язык(и) обучения русский

Трудоёмкость 2 зачётных единиц

Регистрационный номер
рабочей программы:

код
года утверждения

/

код факультета или иного структурного
подразделения

Санкт-Петербург
2012

Раздел 1. Характеристики, структура и содержание учебных занятий

1.1. Цели и задачи учебных занятий

Освоение студентами фундаментальных знаний в области рентгendifракционных методов анализа моно- и поликристаллов и выработка практических навыков рентгенофазового и рентгеноструктурного анализов веществ, применение этих знаний и навыков для исследования природных и синтетических материалов.

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

Для успешного освоения дисциплины студенту необходимо иметь предварительную подготовку по математике, химии, физике в объеме средней школы, а также по курсу "Кристаллография и кристаллохимия".

1.3. Перечень формируемых компетенций (результаты обучения)

Представление о возможностях применения современной порошковой дифрактометрии для получения информации о фазовом составе и кристаллохимических характеристиках веществ. Представление о решениях практических вопросов, связанных с рентгеноструктурным анализом кристаллических веществ таких как: особенности проведения рентгеноструктурного эксперимента, обработка экспериментальных данных, расшифровка и уточнение кристаллических структур. Способность использовать полученные знания в своей профессиональной деятельности.

1.4. Знания, умения, навыки, осваиваемые обучающимся

Навыки экспериментальной работы с современными дифрактометрами, умение грамотной интерпретации полученных данных. Развитие практических навыков проведения рентгенофазового анализа, получения информации о фазовом составе и кристаллохимических характеристиках веществ с использованием данных порошковой дифрактометрии. Опыт решения конкретных кристаллохимических вопросов рентгеноструктурного анализа соединений, развитие навыков кристаллохимического описания минералов и синтетических соединений. Использование в дальнейшей работе возможностей рентгеноструктурного и рентгенофазового методов.

1.5. Перечень и объём активных и интерактивных форм учебных занятий

Лекции - 10 часов, практические занятия - 19 часов, промежуточная аттестация - 1 час, самостоятельная работа под руководством преподавателя - 30, самостоятельная работа с использованием методических материалов - 23 часа.

1.6. 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				
	лекции	семинары	консультации	практические занятия	лабораторные работы	коллоквиумы	текущий контроль	промежуточная аттестация	под руководством преподавателя	в присутствии преподавателя	в т.ч. с использованием методических	текущий контроль
<i>по формам обучения</i>												
	10			19				1	30		23	
	студентов	студентов	студентов	студентов	студентов	студентов	студентов	студентов	студентов	студентов	студентов	студентов
ИТОГО:	10			19				1	30		23	

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
<i>очная форма обучения</i>			
Модули не предусмотрены	зачет	с 25 декабря	3 индивидуальные задачи

1.7. Структура и содержание учебных занятий

1. Введение. Назначение курса. Лекций - 1 час.

Основные понятия и терминология рентгенодифракционного метода исследования вещества. Задачи, решаемы с помощью рентгенофазового и рентгеноструктурного анализа. Значение рентгенодифракционных методов для геологических наук (минералогии, петрографии, геохимии, литологии, экологии и др.)

2. Природа и свойства рентгеновских лучей. Лекций - 2 часа. Практических занятий - 1 часа.

Природа рентгеновских лучей. Условия, необходимые для получения рентгеновских лучей. Белый и характеристический спектры рентгеновского излучения. Зависимость от режима работы трубки и вещества анода. Основные свойства рентгеновских лучей. Поглощение рентгеновских лучей. Вторичное рентгеновское излучение. β -фильтры и монохроматоры. Дифракция рентгеновских лучей на кристаллах. Уравнение Брэгга-Вульфа. Условие дифракции. Задачи, решаемые с помощью уравнения Брэгга-Вульфа. Способы вывода кристалла в отражающее положение. Способы регистрации рентгеновских лучей.

3. Метод и аппаратура рентгенофазового анализа. Лекций - 2 часа. Практических занятий - 1 часа.

Схема дифракции рентгеновских лучей в порошковом методе. Рентгеновские дифрактометры. Фокусировка по Брэггу-Брентано. Использование монохроматоров и β -фильтров. Счетчики рентгеновского излучения.

4. Съемка дифракционной картины порошка (дифрактограммы), обработка дифрактограммы. Лекций - 3 часа. Практических занятий - 10 часов. Самостоятельная работа под руководством преподавателя -18 часов.

Подготовка образца к съемке. Внутреннее и внешнее эталонирование. Режимы съемки на дифрактометре. Особенности дифрактометрии на приборе Rigaku Miniflex II. Обработка экспериментальных данных с использованием комплекса программ PDXL (Rigaku). Определение интенсивности (I) и положения (2θ) дифракционного максимума, описание формы фона и рентгеновского максимума с помощью различных функций. Калибровка по эталону. База рентгеновских данных PDF2 (международного центра дифракционных данных ICDD) и качественный рентгенофазовый анализ поликристаллов. Идентификация вещества, в том числе для сложной смеси фаз с использованием данных химического анализа и без. Форматы вывода результатов. Полуколичественный фазовый анализ с использованием метода RIR. Определение параметров элементарной ячейки однофазного образца с использованием программы PDXL и/или UNITCELL.

5. Практические вопросы рентгеноструктурного анализа. Лекций – 2 час. Практические занятий – 7 часов. Самостоятельная работа под руководством преподавателя -12 часов.

Основы рентгеноструктурного анализа (РСА) минералов и синтетических соединений. Дифракция рентгеновских лучей от монокристаллов. Монокристалльный дифрактометр. Рентгеноструктурный эксперимент: отбор образцов, подготовка оборудования и условий эксперимента. Съемка образцов на современных дифрактометрах (STOE IPDS2 и BRUKER SMART APEX 2). Обработка полученных экспериментальных данных. Формирование конечных файлов экспериментов: *.cif, *.ins, *.hkl. Работа с программным обеспечением STOE, BRUKER. Расшифровка (решение) кристаллических структур на основе полученных экспериментальных данных. Работа с программами Shelx и Sir. Работа в программных оболочках Wingx и Olex. Практические вопросы расшифровки кристаллических структур минералов и неорганических соединений: работа с файлами *.ins, *.res, *.lst, определение координат и степени заселённости позиций, тепловых факторов, межатомных расстояний. Визуализация структурных данных: программы Atoms, Mercury и Diamond. Работа со структурными базами данных (ICSD, CCDC).

Раздел 2. Обеспечение учебных занятий

2.1. Методическое обеспечение

2.1.1. Методическое обеспечение аудиторной работы

Не требуется

2.1.2. Методическое обеспечение самостоятельной работы

Не требуется

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

Два индивидуальных задания по съемке и обработке дифрактограмм однофазного и двухфазного образцов; одно задание по съемки и обработки монокристалльного образца

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

Перечень проверочных задач:

Съемка и фазовый анализ вещества кубической сингонии. Определение параметра элементарной ячейки.

Съемка и фазовый анализ двухфазного образца. Определение параметра элементарной ячейки вещества средней категории.

Практическое решение контрольной задачей по рентгеноструктурному анализу.

2.2. Кадровое обеспечение

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

Преподаватели с высшим специальным образованием, специализирующиеся в области рентгеновской дифрактометрии

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

Учебно-вспомогательный персонал должен обладать навыками организации аудиторной работы

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

Не предусмотрены

2.3. Материально-техническое обеспечение

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

Стандартная аудитория, оснащенная демонстрационным проектором

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

Компьютерный класс на 5-6 мест

2.3.3. Требования к специализированному оборудованию

- Дифрактометр рентгеновский: порошковый и монокристалльный
- 2.3.4. Требования к специализированному программному обеспечению
Программное обеспечение, комплектующее дифрактометр. Программы: Shelx, Sir, Platon, Wingx, Olex, для работы со структурными данными; Atoms, Mercury и Diamond для визуализации; базы данных ICSD, CCDC
- 2.3.5. Требования к перечню и объёму расходных материалов
1 пачка бумаги А4
- 2.4. Информационное обеспечение
- 2.4.1. Список обязательной литературы
1. Пушаровский Д.Ю. Рентгенография минералов. ЗАО "Геоинформмарк" Москва, 2000.- 288 с.
 2. Франк-Каменецкий В.А. Руководство по рентгеновскому исследованию минералов. Л., Недра, 1975. - 399с.
 3. Кривовичев С.В. Практические вопросы по РСА. 2. Расшифровка и уточнение кристаллических структур в комплексе Shelx. СПб. 2007.
 - 4.Порай-Кошиц М.А. Основы структурного анализа химических соединений. М.: Высшая школа.1989.
- 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.
 5. TOPAS and FULLPROF Manuals.
 6. Кривовичев С.В. Практические вопросы по РСА.1. Работа с программным комплексом STOE. СПб. 2006.
- 2.4.3. Перечень иных информационных источников
Не требуется

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	канд.геол.-мин.наук		доцент	krzhizhanovskaya@mail.ru
Золотарев Андрей Анатольевич	канд.геол.-мин.наук		доцент	aazolotarev@gmail.com
Авдонцева Евгения Юрьевна			старший преподаватель	evgenia.avd@gmail.com

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

первый уровень (оценка качества)		
Наименование кафедры	Дата заседания	№ протокола
кристаллографии	23.11.2012	№16
минералогии	19.12.2012	№ 14
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>
(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