

Правительство Российской Федерации  
Санкт-Петербургский государственный университет  
*Геологический факультет*

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА  
УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ**

**Метод Ритвельда  
Rietveld Method**

Язык(и) обучения русский

Трудоёмкость 1 зачётных единиц

Регистрационный номер  
рабочей программы:

<small>код года утверждения</small>	/	<small>код факультета или иного структурного подразделения</small>	/	<small>порядковый номер или шифр</small>
---	---	--	---	--

Санкт-Петербург  
2011

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

### 1.1. Цели и задачи учебных занятий

Дисциплина "Метод Ритвельда" изучается магистрантами в 1 семестре 1 курса и является курсом по выбору. Курс дает студентам основные представления об особенностях применения метода Ритвельда в рентгеновской порошковой дифрактометрии для определения и уточнения кристаллической структуры вещества, количественного и качественного рентгенофазового анализа.

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

Для успешного освоения дисциплины студенту необходимо иметь предварительную подготовку по кристаллографии, кристаллохимии. Желательно иметь представление об основах рентгенографии и рентгенофазовом анализе.

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

Представление о возможностях применения современной порошковой дифрактометрии для изучения структурных особенностей минералов и синтетических соединений, физические основы методов рентгеновской дифракции, современные подходы к постановке дифракционного эксперимента и решению кристаллической структуры на поликристаллах

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

Развитие навыка проведения профильного анализа, качественного и количественного анализов, уточнение атомной структуры кристаллов с использованием данных порошковой дифрактометрии методом Ритвельда.

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

Лекции - 10 часа, практические занятия - 20 часов, самостоятельные занятия - 6 часов.

### 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						Объём активных и интерактивных форм учебных занятий	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		
<i>по формам обучения</i>																
	10			19					1	25		11			19	1
ИТОГО:	10			19					1	25		11		9	19	1

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>				
Модули не предусмотрены	зачет	с 25 декабря	4 индивидуальные задачи	в течение семестра

### 1.7. Структура и содержание учебных занятий

#### 1. Профильный анализ. Лекций -2 часа., практика - 4 часа.

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, сходимость МНК. Автоиндексирование.

#### 2. Основы структурного анализа. Особенности решения кристаллической структуры ab-initio по данным порошковой рентгенографии. Лекций -2 часа.

Теоретическая рентгенограмма. Электронная плотность. Фазы и амплитуды рефлексов, Фурье-синтез. Координаты атомов, параметры атомных смещений. Общее выражение для интенсивности рефлекса. Понятие о факторах достоверности (R-фактор). CIF-файлы. База структурных данных ICSD. Методы ab-initio определения кристаллической структуры с использованием порошковых данных. Метод Монте-

#### 3. Метод Ритвельда. Лекций – 6 час., практика – 16 час.

Тема 1. Теоретические основы метода Ритвельда. 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.

Тема 2. Пакеты программ для проведения уточнения методом Ритвельда FULLPROF, TOPAS. 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.

Тема 3. Количественный рентгенофазовый анализ. 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

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

Четыре индивидуальных задания по уточнению структур методом Ритвельда в течение семестра

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

Перечень проверочных задач:

Уточнение кристаллической структуры однофазного образца

Уточнение структур твердых растворов. Заселенность позиций атомов

Количественный анализ смеси с использованием м. Ритвельда

Уточнение многоатомной структуры в смеси с использованием связанных па

### 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 порошковой дифрактометрии

#### 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

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

- 2.3.4. Требования к специализированному программному обеспечению  
Программное обеспечение, комплектующее дифрактометр
- 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. 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.
5. TOPAS and FULLPROF Manuals.

##### 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	<a href="mailto:krzhizhanovskaya@mail.ru">krzhizhanovskaya@mail.ru</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	10.05.2012	№5
минералогии	04.05.2012	№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