

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова
Геологический факультет

УТВЕРЖДАЮ

Декан Геологического факультета
академик

_____ /Д.Ю.Пушаровский/

«__» _____ 20 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ
РЕНТГЕНОСТРУКТУРНЫЙ АНАЛИЗ МИНЕРАЛОВ

Авторы-составители: Н.В. Зубкова, Е.Л. Белоконева

Уровень высшего образования:
Магистратура

Направление подготовки:
05.04.01 Геология

Направленность (профиль) ОПОП:
Геохимия

Магистерская программа
Минералогия (ИМ)

Форма обучения:

Очная

Рабочая программа рассмотрена и одобрена
Учебно-методическим Советом Геологического факультета
(протокол № _____, _____)

Москва 20__

Рабочая программа дисциплины (модуля) разработана в соответствии с самостоятельно установленным МГУ образовательным стандартом (ОС МГУ) для реализуемых основных профессиональных образовательных программ высшего образования по направлению подготовки «Геология» (*программы бакалавриата, магистратуры, реализуемых последовательно по схеме интегрированной подготовки*) в редакции приказа МГУ № 1674 от 30 декабря 2016 г.

Год (годы) приема на обучение – 2019.

© Геологический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова
Программа не может быть использована другими подразделениями университета и другими вузами без разрешения факультета.

Цель и задачи дисциплины

Целью дисциплины «Рентгеноструктурный анализ» является получение новых теоретических знаний и практических навыков по использованию рентгенографических методов для исследования кристаллических структур минералов и неорганических соединений.

Задачи

- изучение свойств рентгеновского излучения;
- введение понятия обратной решетки, изучение модели дифракции на основе концепции обратной решетки;
- введение понятий атомного фактора рассеяния, структурной амплитуды, законов погасания для различных видов центрированных решеток, плоскостей скользящего отражения, винтовых осей; определение возможных пространственных групп с использованием законов погасания;
- краткое введение в метод Ритвельда и уточнение кристаллических структур по порошковым данным;
- знакомство с предварительным этапом структурных исследований; освоение методов определения параметров и симметрии элементарной ячейки (методы Лауэ, Вейсенберга);
- знакомство с работой монокристалльного дифрактометра (геометрия съёмки, принцип работы, программное обеспечение), овладение приёмами обработки экспериментальных данных, полученных с монокристалльного дифрактометра;
- изучение особенностей работы с основными современными программными комплексами, используемыми для расшифровки кристаллических структур.

1. Место дисциплины в структуре ОПОП ВО – вариативная часть, профессиональный цикл, обязательная дисциплина, курс I, семестр – 1.

2. Входные требования для освоения дисциплины, предварительные условия:

Освоение дисциплин «высшая математика», «информатика», «физика», «химия общая», «кристаллография», «рентгенография минералов».

Обучающийся должен знать основы физики, математики и химии, владеть компьютером. Необходимы навыки работы и теоретические знания по рентгенографии минералов.

Обучающийся должен знать основы физики, математики и химии, владеть компьютером.

Необходимы навыки работы и теоретические знания по рентгенографии минералов.

3. Результаты обучения по дисциплине, соотнесенные с требуемыми компетенциями выпускников.

Компетенции выпускников, формируемые (полностью или частично) при реализации дисциплины:

ОПК-4.М Способность применять на практике знания фундаментальных и прикладных разделов дисциплин, определяющих профиль подготовки

ОПК-5.М Способность использовать современные вычислительные методы и компьютерные технологии для решения задач профессиональной деятельности

ПК-3.М Способность самостоятельно проводить научные исследования с помощью современного оборудования, информационных технологий, с использованием новейшего отечественного и зарубежного опыта

Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю):

знать: особенности структурного исследования с использованием рентгендифракционных методов.

уметь: проводить работы на рентгеновском оборудовании и пользоваться основными приемами структурной расшифровки.

владеть: основными методиками структурного анализа.

4. Формат обучения – лекционные и семинарские занятия.

5. Объем дисциплины (модуля) составляет 3 з.е., в том числе 56 академических часа, отведенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (14 часов – занятия лекционного типа, 42 часов – занятия семинарского типа, 5 часов – мероприятия текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации), 47 академических часа на самостоятельную работу обучающихся. Форма промежуточной аттестации – экзамен.

6. Содержание дисциплины (модуля), структурированное по темам (разделам) с указанием отведенного на них количества академических часов и виды учебных занятий

Краткое содержание дисциплины (аннотация):

Дисциплина «Рентгеноструктурный анализ минералов» включает следующие основные разделы:

- Понятие рентгеновской дифракции. Модели дифракции.
 - Обратная решетка и модель дифракции на основе концепции обратной решетки.
 - Понятие атомного фактора рассеяния. Структурная амплитуда и структурный фактор.
 - Законы погасаний: вывод и применение.
 - Знакомство с методом Ритвельда.
 - Проведение предварительных исследований, метод Лауэ и съёмка в камере РКООП.
 - Рентгенгонометрические методы.
- Современные технологии в структурном анализе на основе монокристаллических данных. Работа с основными программными комплексами для структурной расшифровки и уточнения. Критерии оценки правильности структурного уточнения

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины (модуля), Форма промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)	Всего (часы)	В том числе				Самостоятельная работа обучающегося, часы * (виды самостоятельной работы – эссе, реферат, контрольная работа и пр. – указываются при необходимости)
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем) Виды контактной работы, часы				
		Занятия лекционного типа	Занятия лабораторного типа	Занятия семинарского типа	Всего	
Раздел 1. Введение. Рентгеновские лучи и рентгеновская дифракция. Обратная решетка.	3			9	12	
Раздел 2. Структурная амплитуда.	4			12	16	расчетные работы, 20 часов
Раздел 3. Законы погасания. Определение параметров элементарной ячейки методами Лауэ и качания в камере РКОП	3			9	12	расчетные работы, 15 часов
Раздел 4. Теоретический рентгendifракционный спектр. Метод Ритвельда. Рентгенгонометры.	3			6	9	расчетные работы, 7 часов
Раздел 5. Современные технологии в структурном анализе.	1			6	7	расчетные работы, 5 часов
Промежуточная аттестация <u>экзамен</u>						5
Итого	108			56		52

Содержание дисциплины

1. Введение. Рентгеновские лучи и рентгеновская дифракция. Обратная решетка.

Основные типы рассеяния рентгеновских лучей. Когерентное и некогерентное рассеяние. Свойства рентгеновских лучей и их получение. Модели дифракции. Понятие обратной решетки. Модель дифракции на основе концепции обратной решетки.

2. Структурная амплитуда.

Атомный фактор рассеяния. Рассеяние рентгеновских лучей атомом. Рассеяние рентгеновских лучей кристаллом. Понятие структурной амплитуды и структурного фактора. Расчет структурных амплитуд. Фактор Лоренца и поляризационный фактор. Интенсивность отражений, интегральная интенсивность, сканирование. Проведение предварительных исследований и получение экспериментальных данных для структурных определений.

3. Законы погасания. Определение параметров элементарной ячейки методами Лауэ и качания в камере РКОП.

Законы погасания и их вывод. Использование законов погасания для определения пространственной группы. Метод Лауэ и качания. Определение параметров элементарной ячейки в камере РКОП.

4. Теоретический рентгendifракционный спектр. Рентгенгонометры.

Получение рентгенограмм вращения и развёрток слоевых линий в рентгенгонометре Вейсенберга и в камере фотографирования обратной решетки (КФОР). Расчет рентгенограммы качания. Юстировка кристалла вдоль особого направления для съёмки в камере Вейсенберга.

Тепловые колебания атомов. Влияние тепловых колебаний атомов на интенсивность отражений. Расчет теоретического рентгendifракционного спектра. Знакомство с методом полнопрофильного анализа (метод Ритвельда). Возможности метода.

5. Современные технологии в структурном анализе .

Проведение предварительных исследований и получение экспериментальных данных для структурных определений. Современные технологии в структурном анализе.

Монокристалльный дифрактометр XCaliburS CCD. Отбор и центрировка кристалла. Знакомство с основными программными комплексами для структурной расшифровки и уточнения. Критерии оценки правильности структурного уточнения.

Содержание семинаров

Фотометоды. Метод Лауэ и съёмка в камере РКОП. Юстировка кристалла. Определение параметров элементарной ячейки методом качания.

Знакомство с устройством рентгенгонометра Вейсеберга. Определение параметров элементарной ячейки.

Получение развёрток слоевых линий в рентгенгонометре Вейсенберга.

Индицирование развёртки 0-й слоевой с помощью интерференционных кривых и с

помощью круга единичного радиуса. Определение метрики элементарной ячейки и её симметрии.

Индицирование рентгенограмм.

Сбор экспериментальных данных и их обработка на дифрактометре XCalibur S CCD: подготовка образца, центрировка кристалла. Предварительный эксперимент: автоматический выбор элементарной ячейки, альтернативные возможности выбора.

Выбор режима для съемки полного набора экспериментальных данных. Обработка наборов экспериментальных интенсивностей. Уточнение параметров элементарной ячейки, введение поправки на поглощение.

Рекомендуемые образовательные технологии:

Технология обучения как учебного исследования - основные этапы: столкновение с проблемой, сбор данных («верификация»), сбор данных (экспериментирование), построение объяснения, анализ хода исследования, выводы.

Технология постановки цели - предполагает формулировку целей через результаты обучения, выраженные в таких действиях учеников, которые можно реально оценить. Цели ранжируются по уровням: знание, понимание, применение, синтез, анализ, оценка.

7. Фонд оценочных средств (ФОС) для оценивания результатов обучения по дисциплине (модулю)

7.1. Типовые контрольные задания или иные материалы для проведения текущего контроля успеваемости.

Текущий контроль усвоения дисциплины осуществляется при сдаче каждым студентом выполненных расчетных работ.

Примерный перечень вопросов для проведения текущего контроля

1. По рентгendifракционному спектру кубического вещества проиндицируйте отражения и определите параметр элементарной ячейки.
2. Рассчитайте структурную амплитуду конкретного отражения для данного соединения. Пренебрегая зависимостью атомного фактора рассеяния от угла θ и λ , рассчитайте значение интенсивности для этого рефлекса.
3. Используя известные законы погасания, определите дифракционный класс и возможные пространственные группы.

Расчетные домашние задания:

Расчет параметра элементарной ячейки для кубического кристалла.

Расчет структурных амплитуд.

Определение типа центрировки элементарной ячейки с использованием законов погасаний. Поиск возможных плоскостей скользящего отражения и винтовых осей.

Расчет теоретического рентгendifракционного спектра на основе известной кристаллической модели.

Определение параметров элементарной ячейки методами Лауэ и качания. Расчет рентгенограмм качания.

Расчет рентгенограмм полного вращения. Определение параметров элементарной ячейки для вейсенбергограмм.

Отбор монокристаллов для съемки в монокристалльном дифрактометре XCalibur S CCD.

Обработка массивов экспериментальных данных. Некоторые примеры расчета кристаллических структур на основе монокристалльных данных.

7.2. Типовые контрольные задания или иные материалы для проведения промежуточной аттестации.

Примерный перечень вопросов при промежуточной аттестации:

Различные типы рентгеновского рассеяния. Модели дифракции.

Понятие обратного пространства и обратной решетки.

Атомный фактор рассеяния. Структурная амплитуда.

Законы погасания: вывод и применение.

Метод Лауэ и съёмки в камере РКОП. Метод Вейсенберга.

Расчет параметров элементарных ячеек.

Современные технологии в структурном анализе.

Получение монокристалльных экспериментальных данных и их обработка.

Обработка наборов экспериментальных интенсивностей. Введение поправки на поглощение.

Работа с основными программными комплексами для структурной расшифровки.

Шкала и критерии оценивания результатов обучения по дисциплине.

Результаты обучения	«Неудовлетворительно»	«Удовлетворительно»	«Хорошо»	«Отлично»
Знания: основных законов дифракции, понятия обратного пространства и обратной решетки. Принципов работы на рентгенодифракционном оборудовании.	Знания отсутствуют	Фрагментарные знания	Общие, но не структурированные знания	Систематические знания
Умения: использовать	Умения отсутствуют	В целом успешное, но не	В целом успешное, но	Успешное умение

законы погасаний для определения пространственной группы, расчет параметров эл. я. и получение необходимых экспериментальных данных.		систематическое умение, допускает неточности непринципиального характера	содержащее отдельные пробелы умение.	использовать основные законы дифракции для получения первичных сведений о кристалле (параметры эл.я., пространственная группа).
Владения: методами рентгеноструктурного анализа для получения данных о кристалле.	Навыки владения отсутствуют	Фрагментарное владение методикой, наличие отдельных навыков	В целом сформированные навыки получения данных.	методами рентгеноструктурного анализа для решения некоторых структурных задач.

8. Ресурсное обеспечение:

А) Перечень основной и дополнительной литературы.

Основная литература

Пуцаровский Д.Ю. *Рентгенография минералов*. М.-«Геоинформмарк», 2000, 292 с.

Пуцаровский Д.Ю., Урусов В.С. *“Структурные типы минералов”*, М., МГУ, 1990.

Дополнительная литература

Crystal structure analysis. Principles and practice. 2-nd edition. ed. W. Clegg. Oxford Univ. press, 2009, 387 p.

Jenny Pickworth Glusker, Kenneth N. Trueblood. Crystal structure analysis. A Primer. 3-rd edition, 2010, 276 p.

“Руководство по рентгеновскому исследованию минералов”, под ред. В.А.Фрэнк-Каменецкого. Л., “Недра”, 1976.

Ковба Л.М., Трунов В.К. “Рентгенофазовый анализ”, М., МГУ, 1976.

б) дополнительная литература:

Липсон Г., Стилл Г. “Интерпретация порошковых рентгенограмм”, М., Мир, 1972.

Васильев Е.К., Нахмансон М.С. “Качественный рентгенофазовый анализ”, Новосибирск, “Наука”, СО РАН, 1986.

Б) Перечень лицензионного программного обеспечения пакеты программ Microsoft Office Excel, Microsoft Office PowerPoint (при необходимости), *базы данных ICSD, ICDD*

Г) программное обеспечение и Интернет-ресурсы: *пакеты программ CrysAlis, SHELX, Jana2006,*

Д) Материально-техническое обеспечение дисциплины

Лаборатория кристаллохимии и рентгеноструктурного анализа кафедры кристаллографии и кристаллохимии Геологического факультета МГУ оснащена 4 дифрактометрами (3 порошковых (1 из порошковых дифрактометров оснащен высокотемпературной камерой) и 1 монокристалльный), компьютерным классом, светостолами для обработки фотопленок, таблицами Гиллера, Интернациональные Таблицы, лицензионным программным

обеспечением, включающим современные специализированные программы для обработки рентгенодифракционных данных и базы данных.

9. Язык преподавания – русский.

10. Преподаватель (преподаватели) – Зубкова Н.В., Белоконева Е.Л.

11. Автор (авторы) программы - Зубкова Н.В., Белоконева Е.Л.