

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

УТВЕРЖДАЮ
Декан геологического факультета
МГУ имени М.В. Ломоносова
чл.-корр. РАН Еремин Н.Н.



«18» сентября 2025г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ (МОДУЛЯ)

Наименование дисциплины (модуля):

Вар – Рентгеноструктурный анализ

Уровень высшего образования:
бакалавриат

Направление подготовки/ специальность:
05.03.01 Геология

Профиль программы бакалавриата:
Геохимия

Форма обучения:
Очная

Рабочая программа рассмотрена и одобрена
Учебно-методическим Советом Геологического факультета
(протокол № 6 от 08сентября 2025 г.)

Москва 2025

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 05.03.01 Геология, утвержденным приказом по МГУ от 21.12.2021 № 1404 (в действующей редакции).

Год приема на обучение: 2023

© 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

Цели: изучение физических основ дифракции рентгеновских лучей в кристаллах и математического аппарата, используемого для описания этого явления, а также практических приемов, необходимых для получения кристаллографических характеристик, данных о составе минералов и диагностики их важнейших групп

Задачи:

- введение в методы рентгеноструктурного анализа поликристаллических и монокристалльных образцов и теорию рассеяния рентгеновских лучей кристаллом;
- изучение модели дифракции на основе концепции обратной решетки;
- овладение практическими приемами изучения состава и структуры различных минералов с использованием порошковой рентгенографии;
- освоение методов определения пространственных групп и параметров ячейки на основе рентгендифракционных спектров;
- овладение приемами определения пространственных групп на основе трехмерных наборов рефлексов, полученных на современных дифрактометрах;
- изучение структурных принципов и опыта использования рентгеновских методов для диагностики глинистых минералов;
- изучение основ сканирующей электронной микроскопии и сопряженных методов, применяемых для локального исследования вещества.

Краткое содержание дисциплины (аннотация):

Первая часть курса (5 семестр) “Рентгеноструктурный анализ” включает следующие основные разделы:

- физические и кристаллографические принципы теории рассеяния рентгеновских лучей кристаллами;
- основные положения концепции обратной решетки и ее применение для интерпретации дифракции электромагнитных волн в кристаллах;
- знакомство с методами решения типовых рентгенографических задач и используемой с этой целью аппаратурой;
- изучение практических приемов прецизионных определений параметров элементарных ячеек и их изменений в зависимости от состава кристаллов и физико-химических условий кристаллогенезиса.
- основные приемы при исследовании структурных особенностей и диагностики глинистых минералов;
- электронно-зондовый анализ с использованием сканирующего электронного микроскопа.

1. Место дисциплины (модуля) в структуре ОПОП ВО – относится к вариативной части ОПОП, является дисциплиной по выбору, курс – III, семестр – 5.

2. Входные требования для освоения дисциплины (модуля), предварительные условия:

освоение дисциплин Высшая математика, Информатика, Физика, Химия общая, Рентгенография минералов

3. Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), соотнесенные с требуемыми компетенциями выпускников.

Компетенции выпускников (коды)	Индикаторы (показатели) достижения компетенций	Планируемые результаты обучения по дисциплине (модулю), сопряженные с компетенциями
Б.ОПК-1. Способен применять знания	Б.ОПК-1. И-1. Использует базовые	<i>знать:</i> физические основы дифракции рентгеновских лучей в кристаллах:

фундаментальных разделов наук о Земле, базовые знания естественно-научного и математического циклов при решении стандартных профессиональных задач.	знания фундаментальных разделов математических и естественных наук в профессиональной деятельности Б.ОПК-1. И-2. Использует базовые знания фундаментальных разделов наук о Земле в профессиональной деятельности	рассеяния поляризованных рентгеновских лучей электроном, атомом и кристаллом
Б.ПК-2. Способен в составе научно-исследовательского коллектива участвовать в получении и интерпретации информации (в соответствии с профилем подготовки).	Б.ПК-2. И-1. Под руководством специалиста высокой квалификации участвует в получении информации по объектам исследования (в соответствии с профилем подготовки), составляет рефераты и аналитические обзоры по собранной информации. Б.ПК-2. И-2. Владеет навыками по обработке полученных результатов согласно требованиям, принятым в профессиональном сообществе. Б.ПК-2. И-3. Готовит отчетную документацию по выполненной работе.	знать: математический аппарат, применяемый для описания явлений дифракции рентгеновских лучей в кристаллах
Б.ПК-5. Готов к работе на современных полевых/лабораторных приборах, установках и оборудовании в соответствии с профилем подготовки.	Б.ПК-5. И-1. Знает физические принципы и технические характеристики стандартного современного полевого/лабораторного оборудования (по профилю подготовки). Б.ПК-5. И-2. Имеет базовые навыки работы под руководством специалиста высокой квалификации на	владеть: теоретическими основами и практическими навыками по использованию порошковых рентгенодифракционных методов при исследовании состава и структуры кристаллов

	полевом/лабораторном оборудовании (по профилю подготовки). Б.ПК-5. И-3. Знает правила техники безопасности при работе на полевом/лабораторном оборудовании (по профилю подготовки).	
Б.ПК-12. Способен организовывать мероприятия, направленные на соблюдение правил по охране труда и контроль за соблюдением правил техники безопасности.	Б.ПК-12. И-1. Знает правила по охране труда и контролю за соблюдением техники безопасности при поведении полевых/лабораторных работ. Б.ПК-12. И-2. Имеет базовые навыки организации мероприятий по соблюдению правил по охране труда и контролю за соблюдением правил техники безопасности.	Знать: основные правила обращения с оборудованием с рентгеновским излучением.
Б.СПК-1.Способность к поиску, критическому анализу, обобщению и систематизации научной информации в области наук геохимического цикла (формируется частично).	Б.СПК-1. И-1. Владеет методами поиска и анализа информации в области наук геохимического цикла, в том числе – с применением современных информационно-коммуникационных технологий. Б.СПК-1. И-2. Владеет навыками систематизации и интерпретации данных в области наук геохимического цикла.	уметь: на основе результатов рентгеновской съемки кристаллов определять параметры, тип и пространственную группу элементарной ячейки, моделировать теоретический рентгендифракционный спектр кристалла, готовить образцы для электронно-зондового анализа и диагностики глинистых минералов.

4. Объем дисциплины (модуля) Общая трудоемкость: 8 зачетных единиц, 288 академических часов, 3 часа в неделю (5 семестр), 3 часа в неделю (6 семестр), 4 часа в неделю (8 семестр), в том числе в 5 семестре **48** академических часов, отведенных на контактную работу обучающихся с преподавателем (**24** часов – занятия лекционного типа, **24** часов – занятия семинарского типа, **60** академических часа на самостоятельную работу обучающихся. Форма промежуточной аттестации – зачет

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

Наименование и краткое содержание разделов и тем дисциплины (модуля), Форма промежуточной аттестации по дисциплине (модулю)	Всего (часы)	В том числе				
		Контактная работа (работа во взаимодействии с преподавателем) Виды контактной работы, часы				Самостоятельная работа обучающегося, часы * (виды самостоятельной работы – эссе, реферат, контрольная работа и пр. – указываются при необходимости)
		Занятия лекционного типа	Занятия лабораторного типа	Занятия семинарского типа	Всего	
Введение.		2		1		
Рассеяние рентгеновских лучей		3		6		3 сдача расчетных работ
Понятие обратной решетки		4		2		10 сдача расчетных работ
Вывод формул для расчета параметров ячейки для кристаллов низшей категории		2		1		6 сдача расчетных работ
Закономерные погасания рефлексов.		4		2		4 сдача расчетных работ
Подходы к решению задач в процессе рентгенографического исследования минералов		2		1		6 сдача расчетных работ
Расчет теоретического рентгендифракционного спектра		1		2		10 сдача расчетных работ
Методы рентгеновской съемки кристаллов при высоких температурах и давлениях		2		4		4 сдача расчетных работ
Рентгеновские методы для исследования состава и структуры глинистых минералов		2		4		4 сдача расчетных работ
Основы электронно-зондового анализа кристаллов		2		1		10 сдача расчетных работ
ПРОМЕЖУТОЧНАЯ АТТЕСТАЦИЯ						ЗАЧЕТ
ВСЕГО	108	48				60

Содержание разделов дисциплины:

Введение.

Проблематика современных исследований минералов рентгенографическими методами.

Рассеяние рентгеновских лучей.

Волновые и материальные свойства фотонов электромагнитного излучения. Преломление, отражение и дифракция – следствие волновых свойств фотонов. Когерентное рассеяние – результат упругого столкновения фотонов с электронами (брэгговские рефлексы).

Некогерентное рассеяние (эффект Комптона) – результат неупругого столкновения фотонов с электронами. Изменение длины волны при неупругом рассеянии рентгеновских лучей в зависимости от угла рассеяния. Вероятность эффекта Комптона в зависимости от энергии X-лучей. Учет этого эффекта в прецизионном РСА для локализации электронов.

Тепловые колебания атомов, порождающие фононы акустических волн. Энергия фононов.

Взаимодействие X-квантов с фононами

Диффузное рассеяние при исследовании структурных дефектов. Диффузное рассеяние и структурная разупорядоченность (нарушение симметрии кристалла). Ослабление фона на отфильтрованном излучении.

Рассеяние электроном поляризованного излучения. Рассеяние электроном

неполяризованного излучения. Поляризационный фактор. Рассеяние рентгеновских лучей

атомом. Атомный фактор рассеяния. Рассеяние рентгеновских лучей кристаллом.

Структурная амплитуда. Фаза волны, рассеянной элементарной ячейкой. Понятие обратной решетки. Вывод квадратичных формул для кристаллов средней и низшей категории. Модель дифракции с использованием представлений о сфере Эвальда. Фактор Лоренца. Фактор повторяемости. Рассеяние рентгеновских лучей системой атомов.

Закономерные погасания рефлексов. Вывод правил погасаний для разных типов ячеек и элементов симметрии. Определение пространственных групп. Неоднозначность, связанная с законом Фриделя.

Влияние температуры на интенсивность брэгговских отражений. Сопоставление теоретического и экспериментального рентгендифракционного спектра (на примере флюорита).

Подходы к решению задач в процессе рентгенографического исследования минералов.

Применение рентгенографии для исследования микронапряжений в кристаллах и определения размеров частиц в образце. Интегральная ширина пика, поправка на междублетное расщепление.

Методы рентгеновской съемки кристаллов при высоких температурах и давлениях.

Высокотемпературная камера Гинье: оптическая схема, расчет спектра. Порошковая камера сверхвысоких давлений. Современные проблемы кристаллохимии и рентгенографии высоких давлений и температур.

Прецизионное определение параметров элементарных ячеек. Причины небольших изменений параметров элементарной ячейки. Влияние примесей на изменение параметров. Установление связи параметр - состав. Зависимость изменения параметров ячейки от условий кристаллизации. Линейный регрессионный анализ изменений параметров.

Ошибки метода и способы получения точных значений параметров элементарной ячейки.

Рекомендации по выбору максимумов для определения линейных и угловых параметров ячейки различной симметрии. Контроль надежности индирования порошкограмм по Де-Вольфу.

Определение состава и структурных особенностей минералов по рентгенографическим данным (отношение S/As в арсенопирите и его типоморфная роль; оценка содержания различных металлов в пирротине; изоморфизм в кварце и его петрогенетическое значение и др.).

Принципы классификации и диагностики глинистых минералов.

Структурные принципы глинистых минералов. Их место в общей минералогической систематике. Особенности строения минералов типа 1:1 и 2:1, величина и локализация заряда слоя, состав поглощенного комплекса.

Аппаратурные особенности при рентгеновской съемке глинистых минералов с использованием рентгеновского дифрактометра ULTIMA-IV. Методические подходы к пробоподготовке для решения различных задач по структурной характеристике глинистых минералов.

Особенности строения различных групп глинистых минералов и принципы их исследования методами рентгеновской дифракции (группа каолинит-серпентина, истинных слюд, слюд с дефицитом межслоя, смектитов, вермикулитов, палыгорскит-сепиолита, смешанослойных минералов).

Представления о степени порядка в наложении слоев и в составе слоя глинистых минералов. Применение метода инфракрасной спектроскопии для анализа состава слоя. Принципы идентификации минералов подгруппы каолинита (каолинит-диксит-накрит), слюдистых минералов (мусковит-селадонит-глауконит и др.). Определение взаимного сдвига и разворота слоев в структурах минералов подгруппы каолинита и анализ степени их упорядочения на основе результатов использования рентгеновской дифракции и инфракрасной спектроскопии.

Принципы детальной классификации минералов группы смектита. Распределение заряда пакета между октаэдрическими и тетраэдрическими слоями, и применение специальных методических приемов для этих исследований.

Распределение вакансий в составе октаэдрических сеток по цис- и транс-мотиву, применение методов термического анализа для идентификации цис- и транс-вакантных минералов групп слюд и смектитов.

Сканирующая электронная микроскопия и сопряженные методы локального исследования вещества.

Устройство сканирующего электронного микроскопа, принципы получения и интерпретации электронных изображений во вторичных и отраженных электронах. Вторичное электромагнитное излучение, его возникновение и использование в электронной микроскопии.

Основы электронно-зондового рентгеноспектрального микроанализа (РСМА). Волновой дифракционный и энергодисперсионный методы РСМА: принципы, возможности и ограничения. Эффект дифракции отраженных электронов, его использование для изучения кристаллического строения вещества. Преимущества и недостатки метода дифракции обратнорассеянных электронов в сравнении с рентгенографическими методами.

Содержание семинаров

Определение параметров элементарной ячейки и индентификация рентгенограмм кристаллов средней и низшей категории.

Расчет структурной амплитуды и интенсивности рентгеновских отражений.

Вывод формул в случае погасаний рефлексов в зависимости от симметрии кристалла. Определение пространственной группы.

Съемка образцов для определения параметров элементарных ячеек в дифрактометре ДРОН-УМ1. Подготовка образца для съемки. Получение рентгendifракционного спектра, расчет спектра, идентификация вещества. Расчет параметров элементарной ячейки.

Подготовка образца для съемки в автоматическом порошковом дифрактометре STOE STADI-MP. Способы приготовления образца для различной геометрии съемки. Съемка в капилляре. Порошковая рентгенография при высокой температуре.

Влияние режима съемки на вид рентгendifракционного спектра.

Расчет теоретического рентгendifракционного спектра.

Оценка микронапряжений и определение размеров частиц в образце на основе рентгendifракционных спектров. Программа для расчета размера микрокристаллитов в порошковом образце (WinX^{Pow}, Size).

Приготовление ориентированных и неориентированных препаратов из природных и искусственных смесей глинистых минералов. Знакомство с работой рентгеновского дифрактометра ULTIMA-IV, съемка приготовленных препаратов.

Определение базальных рефлексов и идентификация глинистых минералов реальных образцов по ориентированным препаратам в воздушно-сухом состоянии, а также после насыщения этиленгликолем и прокаливании при 550°C в течение 2 часов.

Идентификация особенностей строения глинистых минералов методами рентгеновской дифракции, определение политипов диоктаэдрических слюд, ди- и три-октаэдрических разностей смектитов, смешанослойных минералов. Теоретический расчет модельных рентгеновских дифракционных картин смешанослойных глинистых минералов.

Сканирующий электронный микроскоп и основы электронно-зондового рентгеноспектрального микроанализа.

Рекомендуемые образовательные технологии

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.

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

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

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

Текущий контроль усвоения дисциплины осуществляется при сдаче каждым студентом выполненных лабораторных/практических/расчетных работ (при наличии).

Для текущего контроля студентов в ходе семестра проводятся контрольные работы/опросы.

Шкала и критерии оценивания результатов обучения по дисциплине применяется для всех типов контроля.

Примерный перечень вопросов для проведения текущего контроля/ Темы контрольных работ:

Расчет теоретического рентгенодифракционного спектра

Идентификация образца и расчет параметров элементарной ячейки

От каких факторов зависит интенсивность дифракционного отражения?

В чем заключается сложность в определении пространственной группы?

Расчетные домашние задания:

Подготовка образца для съемки в порошковом дифрактометре ДРОН-УМ1. Выбор режима съемки, расчет спектра, идентификация вещества. Расчет параметров элементарной ячейки.

Расчет теоретического рентгенодифракционного спектра по программе “Lazy Pulverix”.

Оценка микронапряжений и определение размеров частиц в образце на основе рентгенодифракционных спектров: освоение программы WinX^{Pow}. Size.

Обработка порошковой дифрактограммы, идентификация образца и расчет параметров элементарной ячейки.

Определите тип элементарной ячейки кристаллических веществ, рентгенограммы которых содержат следующие отражения:

а) 110, 200, 103, 202, 211

б) 111, 200, 113, 220, 222

в) 100, 110, 111, 200, 210

г) 001, 110, 200, 111, 201

2. Дифракционная картина ромбического кристалла струвита характеризуется погасаниями $k+l=2n+1$ среди рефлексов $0kl$. Определите дифракционный класс и возможные пр. группы.

3. Дифракционная картина ромбических кристаллов Li_3AlP_2 содержит следующие погасания:

$h+k+l=2n+1$ среди hkl , $0kl$ - $k=2n+1$; $h0l$ - $l=2n+1$; $hk0$ - $h=2n+1$. Определите дифракционный символ и пр. группу.

4. Дифракционная картина моноклинного кристалла содержит следующие погасания: среди рефлексов hkl $h+k=2n+1$; $h0l$ - $h=2n+1$; $0k0$ - $k=2n+1$. Определите возможные пр.гр.

5. Дифракционная картина ромбического кристалла содержит следующие погасания: среди рефлексов $0kl$ - $k+l=2n+1$; $h0l$ - $l=2n+1$. Определите возможные пр.гр.

6. В структуре сфалерита атом Zn находится в начале координат, а атом S - в $.25 .25 .25$. Выведите уравнения структурной амплитуды для рефлексов 111, 200, 220. Пренебрегая зависимостью атомного фактора рассеяния от угла θ и λ , рассчитайте значения интенсивности для этих рефлексов.

7. В структуре кремния атомы Si расположены аналогично Zn (000) и S ($.25 .25 .25$) в

структуре сфалерита. Выведите уравнения структурной амплитуды для рефлексов 111, 200, 220 для структуры Si. Пренебрегая зависимостью атомного фактора рассеяния от угла θ и λ рассчитайте значение интенсивности для этих рефлексов.

8. Выведите уравнение структурной амплитуды для SrTiO_3 (с.т. перовскита): Атомы расположены в следующих позициях: Sr $\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}$; Ti 0 0 0; O $\frac{1}{2}$ 0 0, 0 $\frac{1}{2}$ 0, 0 0 $\frac{1}{2}$.

9. Утверждается, что каждый кристалл характеризуется специфической порошковой рентгенограммой, которая может быть использована для его идентификации. Обдумайте это заключение и объясните, по каким признакам различаются рентгенограммы двух веществ – NaCl и KCl, кристаллизующиеся в одном структурном типе.

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

Примерный перечень вопросов при промежуточной аттестации:

Определение тип элементарной ячейки кристаллических веществ по отражениям рентгенограммы

Определение дифракционного символа и пр. группы по погасаниям

Определение дифракционного класса по погасаниям

Расчет значения интенсивности для определенного рефлекса

Вывод уравнения структурной амплитуды для определенного структурного типа

Различия рентгенограмм веществ, кристаллизующихся в одном структурном типе

Шкала и критерии оценивания результатов обучения по дисциплине.

Результаты обучения	«Неудовлетворительно»	«Удовлетворительно»	«Хорошо»	«Отлично»
Знания: Теоретических основ рентгеноструктурного анализа поликристаллических и монокристаллических образцов, а также явлений, связанных с рассеянием рентгеновских лучей кристаллом	Знания отсутствуют или весьма фрагментарны	Знания есть, но отсутствует их систематичность	Знания систематические, но имеются пробелы	Систематические знания в достаточном объеме
Умения: - получить экспериментальный материал для первого этапа структурного определения; Рассчитать теоретические величины интенсивностей дифракционных отражений для их сопоставления с экспериментальными данными	Умения отсутствуют	В целом успешное, но не систематическое умение, допускает ошибки при решении задач (расчет структурных амплитуд и определение пространственных групп)	В целом успешное, демонстрирует правильный ход решения задач, но возможны пробелы в понимании физического смысла некоторых явлений, связанных с рассеянием рентгеновских	Успешное умение решения практических задач и понимание вопросов, рассмотренных в курсе

			лучей	
Владения: практическими приемами изучения состава и структуры минералов с использованием порошковой рентгенографии; -освоение методов определения пространственных групп и параметров ячейки на основе рентгендифракционных спектров	Навыки расчета структурных амплитуд, параметров ячейки и определения пространственных групп отсутствуют	Фрагментарное владение методикой, наличие отдельных навыков	В целом сформированные навыки решения пройденных задач, но возможны численные ошибки в их решении	Владение методиками и решения задач первого этапа рентгено-структурного анализа

7. Ресурсное обеспечение:

А) Перечень основной и дополнительной литературы.

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

Пуцаровский Д.Ю., Фетисов Г.В. Построение дифрактограмм поликристаллов по структурным данным. М., МГУ, 1991, с.56.

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

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

“The Rietveld Method” edited by R.A. Young. IUCr Oxford Science Publications, 1993, 299 p.

б) дополнительная литература:

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

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

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

Б) Перечень лицензионного программного обеспечения пакеты программ Microsoft Office Excel, Microsoft Office PowerPoint (при необходимости)

В) Перечень профессиональных баз данных и информационных справочных систем базы данных ICSD, ICDD

Г) программное обеспечение и Интернет-ресурсы (лицензионное программное обеспечение не требуется): пакеты программ Wyrite 3.3, FullProf, SHELX-97

Д) Материально-техническое обеспечение:

- аудитория, рассчитанная на группу из 8 учащихся;
- компьютерный класс, рассчитанные на группу из 8 учащихся с лицензионным программным обеспечением, включающим современные специализированные программы для обработки рентгендифракционных данных и базы данных;

б) оборудование:

- 4 порошковых дифрактометра (1 из порошковых дифрактометров оснащен высокотемпературной камерой)
- монокристалльный дифрактометр
- мультимедийный проектор

8. Язык преподавания – русский.

9. Преподаватель (преподаватели) – профессор, академик Д.Ю. Пуцаровский

10. Разработчики программы – профессор, академик Д.Ю. Пуцаровский