

Приложение к приказу проректора
по учебно-методической работе

от _____ № _____

Санкт-Петербургский государственный университет

**РАБОЧАЯ ПРОГРАММА
УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ**

Качественный рентгенофазовый анализ с использованием ПО фирмы "RIGAKU"
Qualitative Powder X-ray Diffraction Analysis Using "RIGAKU" Corporation Software

Язык(и) обучения

Трудоемкость в зачетных единицах: 1

Регистрационный номер рабочей программы: 042115

Санкт-Петербург

2014

Раздел 1. Характеристики учебных занятий

1.1. Цели и задачи учебных занятий

Повышение квалификации в области рентгеновского фазового анализа для работников исследовательских и производственных лабораторий

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

специалисты, имеющие высшее образование в области кристаллохимии, технологии создания материалов.

1.3. Перечень результатов обучения (learning outcomes)

Знать:

- терминологический аппарат;
- принципы работы, возможности и ограничения приборов, используемых при рентгенофазовом анализе.

Уметь:

- определять качественный фазовый состав моно- и многофазных образцов.

Владеть:

- навыками приготовления образцов для рентгенофазового анализа;
- навыками работы на порошковых дифрактометрах фирмы «Ригаку»;
- навыками работы в программах обработки дифракционных данных;
- навыками работы в порошковой базе данных.

1.4. Перечень и объём активных и интерактивных форм учебных занятий

30 часов практических занятий

Раздел 2. Организация, структура и содержание учебных занятий

2.1. Организация учебных занятий

2.1.1

Основной

курс

Трудоёмкость, объёмы учебной работы и наполняемость групп обучающихся																		
Код модуля в составе дисциплины, практики и т.п.	Контактная работа обучающихся с преподавателем											Самостоятельная работа				форм учебных занятий	Трудоёмкость	
	лекции	семинары	консультации	практические занятия	лабораторные работы	контрольные работы	коллоквиумы	текущий контроль	промежуточная аттестация	итоговая аттестация	под руководством преподавателя	в присутствии преподавателя	сам. раб. с использованием методических материалов	текущий контроль (сам.раб.)	промежуточная аттестация (сам.раб.)			итоговая аттестация (сам.раб.)
ОСНОВНАЯ ТРАЕКТОРИЯ																		
с отрывом от работы форма обучения																		
Период обучения по модулю 01	6	6		24									36				30	1
	0-0	0-0		0-0									0-0					
ИТОГО	6	6		24									36					1

Виды, формы и сроки текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации						
Код модуля в составе дисциплины, практики и т.п.	Формы текущего контроля успеваемости		Виды промежуточной аттестации		Виды итоговой аттестации (только для программ итоговой аттестации и дополнительных образовательных программ)	
	Формы	Сроки	Виды	Сроки	Виды	Сроки
ОСНОВНАЯ ТРАЕКТОРИЯ						
с отрывом от работы форма обучения						
Период обучения по модулю 01					защита выпускной работы, устно, традиционная форма	по графику итоговой аттестации

2.2. Структура и содержание учебных занятий

№ п/п	Наименование темы (раздела, части)	Вид учебных занятий	Количество часов
1	<p>Основные положения кристаллографии и кристаллохимии</p> <p>Точечные группы симметрии. Индексы (миллеровские) граней. Решетки Браве. Пространственные (федоровские) группы симметрии. Правильные системы точек. Погасания рефлексов. Закон Фределя. Дифракционные (лауэвские) классы симметрии. Дифракционные группы симметрии. Параметры элементарной ячейки. Символы рентгеновского отражения (символы интерференции hkl). Обратная решетка. Сфера отражения (сфера Эвальда). Кристаллические структуры простых веществ. Плотнейшие упаковки. Изоморфизм. Пределы твердых растворов. Полиморфизм. Полиморфные модификации. Термические деформации. Фазовые переходы. Типы конденсированных фазовых состояний. Особенности кристаллохимии неорганических и органических веществ.</p>	лекции	2
2	<p>Основы рентгенофазового анализа</p> <p>Природа рентгеновских лучей. Условия, необходимые для получения рентгеновских лучей. Белый и характеристический спектры рентгеновского излучения. Зависимость от режима 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. Схема дифракции рентгеновских лучей в порошковом методе. Рентгеновские порошковые дифрактометры. Фокусировка по Брэггу-Брентано. Использование монохроматоров и β-фильтров. Счетчики рентгеновского излучения.</p>	лекции	2
3	<p>Получение экспериментальных данных на дифрактометрах фирмы Rigaku «Miniflex II» и «Ultima IV»</p>	семинары	1
	<p>Основные узлы рентгеновского дифрактометра, техника безопасности при работе на рентгеновских дифрактометрах. Щели, ограничивающие горизонтальную и вертикальную расходимость рентгеновского</p>	практические занятия	2

	пучка, бета-фильтры. Управляющее программное обеспечение, ручной и автоматический режимы съемки. Выбор условий съемки. Приготовление образцов для съемки на дифрактометрах.		
4	<p>Обработка стандартной рентгенограммы Обработка экспериментальных данных с использованием программ Peak Search и Integral Intensity Calculation: сглаживание, вычитание фона, вычитание линии $K_{\alpha 2}$, поиск пика, определение интегральной интенсивности.</p> <p>Обработка экспериментальных данных с использованием программного комплекса PDXL (Rigaku). Определение интенсивности, положения и полуширины дифракционного максимума, описание формы фона и рентгеновского максимума с помощью различных функций.</p>	семинары	2
		практические занятия	8
5	<p>Качественный фазовый анализ База рентгеновских данных PDF2 (международного центра дифракционных данных ICDD) и качественный рентгенофазовый анализ поликристаллов с использованием программного комплекса PDXL. Идентификация вещества, в том числе для сложной смеси фаз, с использованием данных химического анализа и без. Форматы вывода результатов.</p>	лекции	1
		семинары	2
		практические занятия	8
6	<p>Расширенные возможности программного комплекса PDXL Определение параметров элементарной ячейки однофазного образца с использованием программы PDXL и/или UNITCELL. Внутреннее и внешнее эталонирование, основные стандартные материалы. Калибровка по эталону. Корундовые числа. Использование корундовых чисел в количественном РФА.</p>	лекции	1
		семинары	1
		практические занятия	6

Раздел 3. Обеспечение учебных занятий

3.1. Методическое обеспечение

3.1.1 Методические указания по освоению дисциплины

Слушателям будут предоставлены методические разработки по основам работы на автоматических порошковых дифрактометрах фирмы «Rigaku» и список рекомендуемой литературы для освоения теоретических вопросов программы.

3.1.2 Методическое обеспечение самостоятельной работы

Слушателям будут предоставлены методические разработки по основам работы на автоматических порошковых дифрактометрах фирмы «Rigaku» и список рекомендуемой литературы для освоения теоретических вопросов программы.

3.1.3 Методика проведения текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации и критерии оценивания

Зачет по теоретической части, отчеты по практическим работам, отчет по итоговой квалификационной работе.

3.1.4 Методические материалы для проведения текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации (контрольно-измерительные материалы, оценочные средства)

Для обеспечения текущего контроля успеваемости используются следующие материалы:

- результаты качественного фазового анализа однофазового образца;
- результаты качественного фазового анализа многофазового образца;
- результаты полуколичественного фазового анализа поликомпонентной смеси;
- результаты расчета параметров элементарной ячейки.

3.1.5 Методические материалы для оценки обучающимися содержания и качества учебного процесса

Примерная анкета-отзыв по преподаванию дисциплины

Просим Вас заполнить анонимную анкету-отзыв по пройденному Вами курсу. Обобщенные данные анкет будут использованы для совершенствования преподавания. По каждому вопросу проставьте соответствующие оценки по шкале от 1 до 10 баллов (**обведите** выбранный Вами балл). В случае необходимости впишите свои комментарии.

1. *Насколько Вы удовлетворены содержанием дисциплины в целом?*

1 2 3 4 5 6 7 8 9 10

Комментарий _____

2. *Насколько Вы удовлетворены формами преподавания?*

1 2 3 4 5 6 7 8 9 10

Комментарий _____

3. Как Вы оцениваете качество подготовки предложенных учебно–методических материалов?

1 2 3 4 5 6 7 8 9 10

Комментарий_____

4. Насколько Вы удовлетворены использованием преподавателями интерактивных и активных методов обучения ?

1 2 3 4 5 6 7 8 9 10

Комментарий_____

5. Какие из тем дисциплины Вы считаете наиболее полезными, ценными с точки зрения дальнейшего обучения и/или применения в последующей практической деятельности?

6. Что бы Вы предложили изменить в методическом и содержательном плане для совершенствования преподавания данной дисциплины?

СПАСИБО!

3.2. Кадровое обеспечение

3.2.1 Образование и (или) квалификация штатных преподавателей и иных лиц, допущенных к проведению учебных занятий

Для чтения лекций - кандидат геолого-минералогических наук – доцент, или ведущий специалист РЦ РДМИ, с опытом практической работы в области порошковой рентгенографии.

3.2.2 Обеспечение учебно-вспомогательным и (или) иным персоналом

Для проведения практических занятий – специалисты РЦ РДМИ с опытом практической работы в области порошковой дифрактометрии.

3.3. Материально-техническое обеспечение

3.3.1 Характеристики аудиторий (помещений, мест) для проведения занятий

Аудитория с мультимедийным проектором.Компьютеры с ОС Windows 7 и программами MS Office.

3.3.2 Характеристики аудиторного оборудования, в том числе неспециализированного компьютерного оборудования и программного обеспечения общего пользования

3.3.3 Характеристики специализированного оборудования

Автоматические порошковые дифрактометры «MiniFlexII» и «Ultima IV» фирмы «Rigaku».

3.3.4 Характеристики специализированного программного обеспечения

Программный комплекс PDXL (Rigaku), База рентгеновских данных PDF2 (международного центра дифракционных данных ICDD)

3.3.5 Перечень и объёмы требуемых расходных материалов

Эталон кремний монокристаллический (0.1 гр)

3.4. Информационное обеспечение

3.4.1 Список обязательной литературы

Не предусмотрено

3.4.2 Список дополнительной 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. Д.М. Хейкер, Л.М. Зевин. Рентгеновская дифрактометрия. М.: Изд-во физ.-мат. лит-ры. 1963. 380 с.
4. Рентгенография основных типов породобразующих минералов. Коллектив авторов, под ред. В.А. Франк-Каменецкого. Л.: Недра. 1983. 359 с.
5. Бокий Г.Б. Кристаллохимия. М.: Наука, 1971

3.4.3 Перечень иных информационных источников

- справочные материалы на сайте международного союза кристаллографов www.iucr.org;
- минералогическая база данных www.mindat.org;
- описание возможных исследований на сайте РЦ «Рентгенодифракционные методы исследования» <http://xrd.spbu.ru/research/> .

Раздел 4. Разработчики программы

Платонова Наталия Владимировна, к.г.-м.н., доцент кафедры кристаллографии, ведущий специалист РЦ РДМИ.