

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
Федеральное государственное автономное учреждение  
высшего профессионального образования  
"Казанский (Приволжский) федеральный университет"  
Институт геологии и нефтегазовых технологий



**УТВЕРЖДАЮ**

Проректор  
по образовательной деятельности КФУ  
Проф. Минзарипов Р.Г.

\_\_\_\_\_ 20\_\_ г.

**Программа дисциплины**  
Рентгенофазовый анализ БЗ.В.13

Направление подготовки: 020700.62 - Геология

Профиль подготовки: Экологическая геология

Квалификация выпускника: бакалавр

Форма обучения: очное

Язык обучения: русский

**Автор(ы):**

Низамутдинов Н.М. , Ескина Г.М.

**Рецензент(ы):**

Кринари Г.А.

**СОГЛАСОВАНО:**

Заведующий(ая) кафедрой:

Протокол заседания кафедры No \_\_\_\_ от " \_\_\_\_ " \_\_\_\_\_ 201\_\_ г

Учебно-методическая комиссия Института геологии и нефтегазовых технологий:

Протокол заседания УМК No \_\_\_\_ от " \_\_\_\_ " \_\_\_\_\_ 201\_\_ г

Регистрационный No

Казань  
2014

## Содержание

1. Цели освоения дисциплины
2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы
3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля
4. Структура и содержание дисциплины/ модуля
5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения
6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов
7. Литература
8. Интернет-ресурсы
9. Материально-техническое обеспечение дисциплины/модуля согласно утвержденному учебному плану

Программу дисциплины разработал(а)(и) инженер 1 категории Ескина Г.М. Кафедра минералогии и литологии Институт геологии и нефтегазовых технологий , Galina.Eskina@kpfu.ru ; профессор, д.н. (доцент) Низамутдинов Н.М. Кафедра минералогии и литологии Институт геологии и нефтегазовых технологий , Nazim.Nizamutdinov@kpfu.ru

## **1. Цели освоения дисциплины**

целью освоения является ознакомление с теоретическими и экспериментальными основами рентгенографического анализа. Рассматриваются физические основы дифракции рентгеновских лучей, выводятся основные закономерности, излагаются методические основы дифракционного эксперимента. Проводится лабораторный практикум по определению фазового состава , по развитию практических навыков по расшифровке дифрактограмм, определению по экспериментальной дифрактограмме параметров элементарной ячейки

## **2. Место дисциплины в структуре основной образовательной программы высшего профессионального образования**

Данная учебная дисциплина включена в раздел " Б3.В.13 Профессиональный" основной образовательной программы 020700.62 Геология и относится к вариативной части. Осваивается на 3 курсе, 5 семестр.

является профессиональной частью профессионального цикла дисциплин. Предназначен для студентов 3-го курса (5 семестр). Курс предполагает применение рентгеновской дифракции для решения современных проблем минералогии. Обучающийся должен иметь представления о минералогии, химии, физики, симметрии кристаллов, строении кристаллической решетки.

## **3. Компетенции обучающегося, формируемые в результате освоения дисциплины /модуля**

В результате освоения дисциплины формируются следующие компетенции:

В результате освоения дисциплины студент:

1. должен знать:

область применения метода, физические основы метода рентгенографического анализа, экспериментальные основы

2. должен уметь:

практически применять метод рентгенографического анализа, включать приобретенные знания в уже имеющуюся систему знаний в самостоятельных методических разработках

3. должен владеть:

методом для определения фазового состава вещества, определения структурных особенностей, определением свойств кристаллической решетки

## **4. Структура и содержание дисциплины/ модуля**

Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 зачетных(ые) единиц(ы) 72 часа(ов).

Форма промежуточного контроля дисциплины зачет в 5 семестре.

Суммарно по дисциплине можно получить 100 баллов, из них текущая работа оценивается в 50 баллов, итоговая форма контроля - в 50 баллов. Минимальное количество для допуска к зачету 28 баллов.

86 баллов и более - "отлично" (отл.);

71-85 баллов - "хорошо" (хор.);

55-70 баллов - "удовлетворительно" (удов.);

54 балла и менее - "неудовлетворительно" (неуд.).

#### 4.1 Структура и содержание аудиторной работы по дисциплине/ модулю Тематический план дисциплины/модуля

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
1.	Тема 1. Рентгенография - метод исследования кристаллических структур и идентификации минеральных фаз горных пород. Рентгенографическая диагностика и ее задачи. Задачи генетической минералогии и исследования типоморфизма минералов мето-дами современной рентгенографии. Дифракция рентгеновских лучей в кристаллах. Разность хода и фазы рентгеновских лучей, проходящих через атом, их интенсивность. Атомная амплитуда.		1	0	0	0	

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
2.	Тема 2. Зависимость атомной амплитуды от направления наблюдения. Интерференционная функция и структурная амплитуда. Обратная система координат. Интенсивность волны, рассеянной кристаллом. Интерференционные и структурные факторы. Анализ интерференционного фактора. Условия дифракции, дифракционные направления, дифракционные индексы		2	0	0	0	
3.	Тема 3. Интенсивность рассеянной волны и структурная амплитуда при условиях дифракции и их зависимость от химического состава и структуры кристалла. Уравнение Вульфа-Брэгга. Дифракция как отражение. Построение Эвальда. Число дифракционных линий: анализ уравнений Лауэ и формулы Брэгга-Вульфа		3	0	0	0	

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
4.	Тема 4. Вычисление межплоскостных расстояний в кристаллах. Основные соотношения структурной кристаллографии: связь базисов пространственной и обратной решеток, объемы ячейки Браве и ячейки обратной решетки. Соотношения для вычисления межплоскостных расстояний в кристаллах различных сингоний.		4	0	0	0	
5.	Тема 5. Структурная амплитуда кристаллов. Преобразование системы координат и базисов. Преобразование индексов плоскостей узловых сеток и дифракционных индексов. Правила погасания.		5	0	0	0	
6.	Тема 6. Количественный рентгенографический фазовый анализ. Теоретические основы количественного анализа. Уравнение Александра-Клага. Линейный и массовый коэффициенты поглощения рентгеновских лучей. Основное уравнение количественного фазового анализа.		6	0	0	0	

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
7.	Тема 7. Рентгеновские дифрактометры. Природа рентгеновских лучей. Рентгеновские трубки. Закон Мозли. Общие свойства рентгеновских лучей. Сцинтилляционный счетчик.		7	0	0	0	
8.	Тема 8. Устройство рентгеновского дифрактометра (Блок-схема). Принцип фокусировки отраженных рентгеновских лучей от порошка кристаллического вещества.		8	0	0	0	
9.	Тема 9. Техника безопасности при работе в лаборатории рентгенографического анализа на рентгеновском дифрактометре. Правила эксплуатации рентгеновского дифрактометра.		9	0	0	0	
10.	Тема 10. Особенности подготовки образцов для исследования, съемки и расшифровки дифрактограмм Сборники дифракционных данных		10	0	0	0	
11.	Тема 11. Определение углов Брегга и межплоскостных расстояний минералов по дифрактограмме многофазной системы. Определение минерального состава горных пород по расчетам дифрактограммы.		11	0	0	0	

N	Раздел Дисциплины/ Модуля	Семестр	Неделя семестра	Виды и часы аудиторной работы, их трудоемкость (в часах)			Текущие формы контроля
				Лекции	Практические занятия	Лабораторные работы	
12.	Тема 12. Определение шага периодичности структуры кристалла. Метод вращения (метод Лауэ). Слоевые линии. Расстояния между слоевыми линиями. Определение размеров ячейки (ячейки Браве) и числа формульной единицы в ячейке.		12	0	0	0	
13.	Тема 13. Расчет дифрактограммы порошка кристаллов кубической и тетрагональной сингоний. Индексирование дифрактограмм и определение параметров ячейки кристалла. Стандартные программы индексирования и определения метрики решетки (методы МНК).		13	0	0	0	
	Тема . Итоговая форма контроля	5		0	0	0	зачет
	Итого			0	0	0	

#### 4.2 Содержание дисциплины

**Тема 1. Рентгенография - метод исследования кристаллических структур и идентификации минеральных фаз горных пород. Рентге-нографическая диагностика и ее задачи. Задачи генетической минералогии и исследования типоморфизма минералов методами современной рентгенографии. Дифракция рентгеновских лучей в кристаллах. Разность хода и фазы рентгеновских лучей, проходящих через атом, их интенсивность. Атомная амплитуда.**

**Тема 2. Зависимость атомной амплитуды от направления наблюдения. Интерференционная функция и структурная амплитуда. Обратная система координат. Интенсивность волны, рассеянной кристаллом. Интерференционные и структурные факторы. Анализ интерференционного фактора. Условия дифракции, дифракционные направления, дифракционные индексы**

**Тема 3. Интенсивность рассеянной волны и структурная амплитуда при условиях дифракции и их зависимость от химического состава и структуры кристалла. Уравнение Вульфа-Брэгга. Дифракция как отражение. Построение Эвальда. Число дифракционных линий: анализ уравнений Лауэ и формулы Брэгга-Вульфа**



**Тема 4. Вычисление межплоскостных расстояний в кристаллах. Основные соотношения структурной кристаллографии: связь базисов пространственной и обратной решеток, объемы ячейки Браве и ячейки обратной решетки. Соотношения для вычисления межплоскостных расстояний в кристаллах различных сингоний.**

**Тема 5. Структурная амплитуда кристаллов. Преобразование системы координат и базисов. Преобразование индексов плоскостей узловых сеток и дифракционных индексов. Правила погасания.**

**Тема 6. Количественный рентгенографический фазовый анализ. Теоретические основы количественного анализа. Уравнение Александера-Клага. Линейный и массовый коэффициенты поглощения рентгеновских лучей. Основное уравнение количественного фазового анализа.**

**Тема 7. Рентгеновские дифрактометры. Природа рентгеновских лучей. Рентгеновские трубки. Закон Мозли. Общие свойства рентгеновских лучей. Сцинтилляционный счетчик.**

**Тема 8. Устройство рентгеновского дифрактометра (Блок-схема). Принцип фокусировки отраженных рентгеновских лучей от порошка кристаллического вещества.**

**Тема 9. Техника безопасности при работе в лаборатории рентгенографического анализа на рентгеновском дифрактометре. Правила эксплуатации рентгеновского дифрактометра.**

**Тема 10. Особенности подготовки образцов для исследования, съемки и расшифровки дифрактограмм. Сборники дифракционных данных**

**Тема 11. Определение углов Брегга и межплоскостных расстояний минералов по дифрактограмме многофазной системы. Определение минерального состава горных пород по расчетам дифрактограммы.**

**Тема 12. Определение шага периодичности структуры кристалла. Метод вращения (метод Лауэ). Слоевые линии. Расстояния между слоевыми линиями. Определение размеров ячейки (ячейки Браве) и числа формульной единицы в ячейке.**

**Тема 13. Расчет дифрактограммы порошка кристаллов кубической и тетрагональной сингоний. Индексирование дифрактограмм и определение параметров ячейки кристалла. Стандартные программы индексирования и определения метрики решетки (методы МНК).**

## **5. Образовательные технологии, включая интерактивные формы обучения**

1. Лекции
2. Практические занятия с использованием современных дифрактометров
3. Самостоятельная работа с конкретным вещественным материалом

**6. Оценочные средства для текущего контроля успеваемости, промежуточной аттестации по итогам освоения дисциплины и учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы студентов**

**Тема 1. Рентгенография - метод исследования кристаллических структур и идентификации минеральных фаз горных пород. Рентгенографическая диагностика и ее задачи. Задачи генетической минералогии и исследования типоморфизма минералов методами современной рентгенографии. Дифракция рентгеновских лучей в кристаллах. Разность хода и фазы рентгеновских лучей, проходящих через атом, их интенсивность. Атомная амплитуда.**

**Тема 2. Зависимость атомной амплитуды от направления наблюдения.**

**Интерференционная функция и структурная амплитуда. Обратная система координат. Интенсивность волны, рассеянной кристаллом. Интерференционные и структурные факторы. Анализ интерференционного фактора. Условия дифракции, дифракционные направления, дифракционные индексы**

**Тема 3. Интенсивность рассеянной волны и структурная амплитуда при условиях дифракции и их зависимость от химического состава и структуры кристалла. Уравнение Вульфа-Брэгга. Дифракция как отражение. Построение Эвальда. Число дифракционных линий: анализ уравнений Лауэ и формулы Брэгга-Вульфа**

**Тема 4. Вычисление межплоскостных расстояний в кристаллах. Основные соотношения структурной кристаллографии: связь базисов пространственной и обратной решеток, объемы ячейки Браве и ячейки обратной решетки. Соотношения для вычисления межплоскостных расстояний в кристаллах различных сингоний.**

**Тема 5. Структурная амплитуда кристаллов. Преобразование системы координат и базисов. Преобразование индексов плоскостей узловых сеток и дифракционных индексов. Правила погасания.**

**Тема 6. Количественный рентгенографический фазовый анализ. Теоретические основы количественного анализа. Уравнение Александера-Клага. Линейный и массовый коэффициенты поглощения рентгеновских лучей. Основное уравнение количественного фазового анализа.**

**Тема 7. Рентгеновские дифрактометры. Природа рентгеновских лучей. Рентгеновские трубки. Закон Мозли. Общие свойства рентгеновских лучей. Сцинтилляционный счетчик.**

**Тема 8. Устройство рентгеновского дифрактометра (Блок-схема). Принцип фокусировки отраженных рентгеновских лучей от порошка кристаллического вещества.**

**Тема 9. Техника безопасности при работе в лаборатории рентгенографического анализа на рентгеновском дифрактометре. Правила эксплуатации рентгеновского дифрактометра.**

**Тема 10. Особенности подготовки образцов для исследования, съемки и расшифровки дифрактограмм Сборники дифракционных данных**

**Тема 11. Определение углов Брегга и межплоскостных расстояний минералов по дифрактограмме многофазной системы. Определение минерального состава горных пород по расчетам дифрактограммы.**

**Тема 12. Определение шага периодичности структуры кристалла. Метод вращения (метод Лауэ). Слоевые линии. Расстояния между слоевыми линиями. Определение размеров ячейки (ячейки Браве) и числа формульной единицы в ячейке.**

**Тема 13. Расчет дифрактограммы порошка кристаллов кубической и тетрагональной сингоний. Индексирование дифрактограмм и определение параметров ячейки кристалла. Стандартные программы индексирования и определения метрики решетки (методы МНК).**

**Тема . Итоговая форма контроля**

Примерные вопросы к зачету:

Контрольные вопросы:

1. Природа рентгеновских лучей. Свойства рентгеновских лучей.
2. Уравнение Вульфа-Брэгга
3. Параметры элементарной ячейки. Символы рентгеновского отражения (символы интерференции  $hkl$ ). Обратная решетка.
4. Устройство дифрактометра. Рентгеновская трубка, спектр излучения рентгеновской трубки
5. Подготовка образца к съемке. Режимы съемки дифрактограмм.. Расчет межплоскостных расстояний
6. Картотеки данных. Работа с ключами.
7. Индексирование дифрактограммы порошка кристаллов кубической сингонии
8. Расчет параметров элементарной ячейки

## 9. Вычисление межплоскостных расстояний по параметрам ячейки кристалла.

### 7.1. Основная литература:

1. Пушаровский Д.Ю. Рентгенография минералов: Учеб. для геол. спец. вузов / Д.Ю.Пушаровский; Моск. гос. ун-т. - М.: ЗАО "Геоинформмарк", 2000. -296с
2. Руководство по рентгеновскому исследованию минералов (ред. В.А.Фрак-Каменецкий. Л.,Недра, 1975. 400 с.
3. Рентгенографический фазовый анализ. Учебно-методическое пособие. Казань. Изд-во Казанск. ун-та. 2010. - 31с. 45 экзем. фонд кафедры.
4. Бокий Г.Б., Порай-Кошиц М.А. Рентгеноструктурный анализ. М. Изд-во МГУ. 1964.т.1.490 с.

### 7.2. Дополнительная литература:

1. Шехтман В.Ш., Диланян Р. А. Введение в рентгеновскую кристаллографию./ ИФТТ РАН, Черноголовка - Ред.-изд. Отдел ИПХВ РАН, 2002 . - 144 с.
2. Галимов Э.Р., Кормушин К.В., Халитов З.Я. Рентгеноструктурный анализ поликри-сталлов. Учебное пособие. - Казань, изд-во КГТУ. 2004 г.
3. Современная кристаллография, т.4, Физические свойства кристаллов, М., Наука, 1981.
4. Зубова Н.В. Рентгеноструктурный анализ (Уточнение и изображение кристаллических структур минералов. - М.: МГУ, 2005. - 105 с.

### 7.3. Интернет-ресурсы:

## 8. Материально-техническое обеспечение дисциплины/модуля согласно утвержденному учебному плану

Освоение дисциплины "Рентгенофазовый анализ" предполагает использование следующего материально-технического обеспечения:

Программа составлена в соответствии с требованиями ФГОС ВПО и учебным планом по направлению 020700.62 "Геология" и профилю подготовки Экологическая геология .

Автор(ы):

Низамутдинов Н.М. \_\_\_\_\_

Ескина Г.М. \_\_\_\_\_

"\_\_" \_\_\_\_\_ 201\_\_ г.

Рецензент(ы):

Кринари Г.А. \_\_\_\_\_

"\_\_" \_\_\_\_\_ 201\_\_ г.