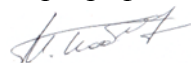


МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
Львівський національний університет імені Івана Франка
Факультет геологічний
Кафедра мінералогії, петрографії і геохімії

Затверджено
на засіданні кафедри мінералогії,
петрографії і геохімії
геологічного факультету
Львівського національного
університету імені Івана Франка
(протокол № 1 від 31.08.2023 р.)

Завідувач кафедри мінералогії,
петрографії і геохімії



Ірина ПОБЕРЕЖСЬКА

Силабус з навчальної дисципліни

"Рентгено-структурний аналіз мінералів"

що викладається в межах ОПП "Геохімія та мінералогія"
другого (магістерського) рівня вищої освіти для здобувачів
зі спеціальності 103 Науки про Землю

Назва дисципліни	"Рентгено-структурний аналіз мінералів"
Адреса викладання дисципліни	м. Львів, вул. Грушевського, 4
Факультет та кафедра, за якою закріплена дисципліна	Геологічний факультет, кафедра мінералогії, петрографії і геохімії
Галузь знань, шифр та назва спеціальності	Галузь знань 10 "Природничі науки" Спеціальність 103 Науки про Землю
Викладачі курсу	Борняк Уляна Іванівна – доцент кафедри мінералогії, петрографії і геохімії, кандидат геологічних наук, доцент,
Контактна інформація викладачів	ulyana.bornyak@lnu.edu.ua https://geology.lnu.edu.ua/employee/bornyak-ulyana-ivanivna
Консультації по курсу відбуваються	Консультації по курсу відбуваються в день проведення лабораторних занять (на кафедрі, ауд. 228). Також можливі он-лайн консультації через Telegram, Zoom, Teams або подібні ресурси. Для погодження часу он-лайн консультацій слід писати на електронну пошту викладача
Сторінка курсу	
Інформація про курс	Дисципліна «"Рентгено-структурний аналіз мінералів"» є вибірковою дисципліною з циклу професійної та практичної підготовки з спеціальності 103 Науки про Землю для ОПП "Геохімія та мінералогія", яка викладається в III семестрі в обсязі 4,0 кредитів (за Європейською Кредитно-Трансферною Системою ECTS).
Коротка анотація дисципліни	« Рентгено-структурний аналіз мінералів » є дисципліною, що формує у студентів навички застосування сучасних методів рентгено-структурного аналізу при дослідженні мінералів, а також гірських порід та руд. Курс розроблено таким чином, щоб надати студентам необхідні теоретичні знання щодо методів дослідження структури мінералів, які базуються на явищі дифракції рентгенівських променів
Мета та цілі дисципліни	<i>Метою навчальної дисципліни " Рентгено-структурний аналіз мінералів "</i> – формування теоретичних знань і системного підходу до дослідження структури мінералів, який базується на явищі дифракції рентгенівських променів; вивчення та засвоєння на практиці методики визначення мінерального складу гірської породи та коректної інтерпретації отриманих аналітичних даних. <i>Завдання курсу:</i> ознайомити студентів з основними можливостями методу рентгеноструктурного аналізу при вивченні мінералів.
Література для вивчення дисципліни	1. Дифракційна оптика Х-хвиль [Текст] : підручник / М. Д. Раранський, Я. М. Струк ; Чернівець. нац. ун-т ім. Ю. Федьковича. - Чернівці : Рута, 2007. - 155 с. 2. Дифракційні методи структурного аналізу. Кінематичне наближення [Текст] : навч. посіб. для студ. фіз. та інж.-техн. спец. вищ. навч. закл. / П. В. Петренко ; Київ. нац. ун-т ім. Тараса Шевченка. - К. : Київ. ун-т, 2005. - 248 с. : ілюстр.

	<ol style="list-style-type: none"> 3. Казіміров В. П. Рентгенографія кристалічних матеріалів : навч. посіб. / В. П. Казіміров, Е. Б. Русанов. – К. : ВПЦ "Київський університет", 2016. – 287 с. 4. Махровський В. М. Рентгеноструктурний аналіз / В. М. Махровський, Р. В. Дінжос, Е. А. Лисенков. – Миколаїв: Іліон, 2019. – 150 с. 5. Методи рентгенівської дифракційної діагностики напівпровідникових кристалів та гетероструктур [Текст] : навч. посіб. / Кладько В. П., Фодчук І. М. ; м-во освіти і науки України, Чернів. нац. ун-т ім. Юрія Федьковича. - Чернівці : ЧНУ, 2017. - 100 с. 6. Хмелівський В.О., Дяків В.О. Рентгенометричний визначник мінералів. Навчальний посібник. Комп'ютерний набір. Львів. 2003. 7. Asif Ali. X-ray diffraction techniques for mineral characterization: a review for engineers of the fundamentals, applications, and research directions //Asif Ali, Yi Wai Chiang, and Rafael M. Santos / Режим доступу: https://www.preprints.org/manuscript/202112.0438/v1 8. C J Gilmore, J A Kaduk, H Schenk. International Tables for Crystallography, Volume H, Powder Diffraction 2019. 9. Lavina B. Modern X-ray Diffraction Methods in Mineralogy and Geosciences // Reviews in Mineralogy & Geochemistry, Vol. 78 pp. 1-31, 2014 10. Massa W. Crystal Structure Determination / W. Massa // Springer-Verlag: N. Y., 2004. 11. Methods of crystallography: powder X-ray diffraction / Angela Altomare; Corrado Cuocci; G. Diego Gatta; Anna Moliterni; Rosanna Rizzi // 2017 12. Powder diffraction file. Search Manual (Alphabetical Listing). JCPDS. USA, 1973. - 663p. 13. Powder diffraction file. Search Manual (Fink method). JCPDS. USA, 1973. -1402 p. 14. Powder diffraction file. Search Manual Minerals. JCPDS. USA. 1974. - 262 p. 15. Powder diffraction file. Search Manual (Hanawalt method). Joint Comitee on Powder Difrraction Standarts (JCPDS). USA, 1973. -875 p. 16. Selected powder data for minerals. JCPDS. USA, 1974. - 833 p.
Обсяг курсу	Загальна кількість годин – 120. З них: аудиторних годин - 32: лабораторних занять - 32 самостійна робота - 88
Очікувані результати навчання	В результаті вивчення даної дисципліни студент повинен: знати: <ul style="list-style-type: none"> • природу рентгенівського проміння (РП) та методику його отримання; • будову дифрактометра, знімання дифрактограми і її вимірювання; • рентгенівську діагностику мінералів; • рентгенівські визначники мінералів і методику

	<p>користування ними;</p> <ul style="list-style-type: none"> • комп'ютерні програми та розрахунок і індексування рентгенограм з їхньою допомогою; <p>вміти:</p> <ul style="list-style-type: none"> • приготувати зразки для знімання дифрактограми; • вибрати режим зйомки на дифрактометрі; • зняти дифрактограму і її виміряти; • визначити мінеральний склад гірської породи за дифрактограмою.
Ключові слова	Рентгено-структурний аналіз, рентгенограма, мінерал, мінеральний склад породи, дифракція, кристалічна решітка
Формат курсу	Очний
Теми	Подано нижче у табличній формі СХЕМА КУРСУ
Підсумковий контроль, форма	Залік в кінці семестру
Пререквізити	Для вивчення курсу студенти потребують базових знань фахових дисциплін, достатніх для сприйняття категоріального апарату.
Навчальні методи та техніки, які будуть використовуватися під час викладання курсу	<p>Головні навчальні методи:</p> <ul style="list-style-type: none"> • словесні – лекції, бесіди, бесіди з елементами формування проблемних завдань • наочні – демонстрація, ілюстрація, мультимедійна презентація, спостереження • практичні – лабораторний метод <p>Техніки, які використовуються:</p> <ul style="list-style-type: none"> • метод генерацій ідей • навчальна дискусія • метод моделювання
Необхідне обладнання	Прилади та обладнання Львівського національного університету імені Івана Франка, які використовуються для рентгено-структурного дослідження, взірці гірських порід, таблиці, малюнки, карти, графіки, діаграми, мультимедійний проектор, ноутбук
Критерії оцінювання (окремо для кожного виду навчальної діяльності)	<p>Оцінювання проводиться за 100-бальною шкалою. Бали нараховуються за наступним співвідношенням:</p> <ul style="list-style-type: none"> • контрольне опитування: максимальна кількість балів - 40 <p>Проводиться 2 опитування. Максимальна кількість балів за одне опитування - 20</p> <ul style="list-style-type: none"> • виконання самостійної роботи: максимальна кількість балів - 60. <p>Самостійна робота складається з двох індивідуальних завдань для кожного студента:</p> <ul style="list-style-type: none"> - теоретичного модуля (2 реферати). Теми рефератів вказані в схемі курсу. Максимальна кількість балів - 20 (за один реферат 10 балів) ; - практичного модуля (визначення мінерального складу породи). Теми вказані в схемі курсу. Максимальна кількість балів – 40: <p>Підсумкова максимальна кількість балів 100.</p> <p><i>Академічна доброчесність.</i> Списування, втручання в роботу студентів, відсутність посилань на використані джерела при</p>

	<p>написанні рефератів - приклади можливої академічної не доброчесності. Жодні форми порушення академічної доброчесності не толеруються.</p> <p><i>Відвідання занять</i> є важливою складовою навчання. Очікується, що всі студенти відвідають усі лекції. Студенти мають інформувати викладача про неможливість відвідати заняття.</p> <p><i>Література.</i> Уся література, яку студенти не зможуть знайти самостійно, буде надана викладачем виключно в освітніх цілях без права її передачі третім особам. Студенти заохочуються до використання й іншої літератури та джерел, яких немає серед рекомендованих.</p> <p><i>Політика виставлення балів.</i> Враховуються бали набрані на контрольному опитуванні, самостійній роботі.</p>
Опитування	Анкету-оцінку з метою оцінювання якості курсу буде надано по завершенню курсу.

Схема курсу «Рентгено-структурний аналіз мінералів»

Тиж-день	Тема, короткі тези	Форма занять	К-ть годин	Література
1	<p>Тема 1. Природа та властивості рентгенівських променів. Історія відкриття та вивчення рентгенівського випромінювання. Досліди П. Лауе та відкриття явища дифракції рентгенівських променів кристалічною ґраткою мінералів. Рентгеноструктурний аналіз – найсучасніший і найефективніший метод вивчення кристалічних речовин. Природа рентгенівського проміння (РП) та методика його отримання. Властивості РП. Дифракція РП кристалічною ґраткою. Рівняння Вульфа – Бреґґа та його значення для РСА. Рентгенівські спектри і характеристичне рентгенівське випромінювання хімічних елементів. Розсіювання РП когерентне і некогерентне. Поглинання РП. Вибір рентгенівського випромінювання для рентгенографічних досліджень. Рентгенівські фільтри і їх вибір. Реєстрація РП. Фотографічна дія РП. Іонізаційна дія РП.</p>	лабораторні заняття	2	1-5
2	<p>Тема 2. Помилки, що виникають при розрахунку і їх природа. Два типи помилок при замірі дебаєграм. Помилки, зумовлені фізичними факторами: поглинанням РП, заломленням РП, нерівномірністю фону на дебаєграмі, зміщенням ліній на плівці з</p>	лабораторні заняття	2	1-5

	двосторонньою емульсією та ін. Помилки, зумовлені геометричними факторами: ексцентриситетом зразка, неточністю визначення радіуса РКД, розходженням рентгенівського пучка, тощо.			
3	Тема 3. Дифрактометричний метод дослідження мінералів. Теоретичні основи дифрактометричного методу. Будова дифрактометра. Знімання дифрактограми і її вимірювання. Переваги та недоліки дифрактометричного методу перед фотометодом.	лабораторні заняття	2	1-5
4	Тема 4. Рентгенівська діагностика мінералів. Рентгенівські визначники мінералів (PVM). PVM В.І. Міхеєва і методика користування ним. Порошкова дифракційна картотека об'єднаного комітету порошкових дифракційних стандартів (PDF JCPDS) Американського товариства дослідження матеріалів (ASTM) і користування нею. Рентгенометричний визначник мінералів для студентів (В.О. Хмелівський, В.О. Дяків) і користування ним. Рентгенівська діагностика мінералів за допомогою комп'ютера.	лабораторні заняття	2	1-5
5	Тема 5. Індекссування рентгенограм. Поняття про індекси відбитків на рентгенограмах. Два методи індекссування рентгенограм: графічний та аналітичний. Індекссування дебаєграми кубічних мінералів графічним та аналітичними методами. Індекссування дебаєграм тетрагональних мінералів графічними методами: методом Хелла – Деві, Б'юрстрема та ін. Індекссування дебаєграм гексагональних та тригональних тими ж методами. Аналітичні методи індекссування дебаєграми мінералів тетрагональної, гексагональної та ромбічної сингоній. Індекссування дебаєграми мінералів моноклінної сингонії.	лабораторні заняття	2	1-5
6	Тема 6. Ознайомлення з комп'ютерними програмами для розрахунку та індекссування рентгенограм. Бази даних PDF-2, PDF-4. Системи програмного забезпечення всіх основних виробників рентгенівського дифракційного обладнання. Рентгено-структурний табличний процесор RTP 3.1” та розрахунок індекссування рентгенограм з її допомогою.	лабораторні заняття	2	1-5
7	Тема 7. Елементарна ґратка, її геометрія та параметри. Головні кристалографічні дані, що отримуються з порошкових рентгенограм. Поняття про елементарну ґратку та її параметри. 14 типів ґраток Браве і умови їх	лабораторні заняття	2	1-5, 11

	вибору. Залежність міжплощинних віддалей від параметрів елементарної ґратки для різних сингоній. Визначення типу ґратки Браве за рентгенограмою. Методика розрахунку параметрів елементарної ґратки для різних сингоній.			
8	Тема 8. Рентгенофазовий аналіз. Визначення мінерального складу гірської породи за порошкограмою. Методика визначення мінерального складу гірської породи або мінеральної суміші за порошковою рентгенограмою. Якісний рентгенофазовий аналіз. Метод Дебая-Шеррера-Халла (або метод порошку) і методика отримання дебаєграм. Кількісний рентгенофазовий аналіз (КФА). Сутність методу. Методи КФА. Метод внутрішнього стандарту. Метод зовнішнього стандарту. Прямі методи КФА. Експресний КФА полікомпонентної системи.	лабораторні заняття, контрольне опитування	2	1-5
9	Тема 9. Рентгенографія шаруватих силікатів. Структурні особливості шаруватих силікатів. Особливості рентгенографії шаруватих силікатів.	лабораторні заняття	2	6-9, 12-16
10	Тема 10 Визначення складу і структурного стану польових шпатів рентгенографічним методом. Загальні відомості про групу польових шпатів і їх номенклатура. Діагностика основних груп польових шпатів. Метод Стюарта-Райта.	лабораторні заняття	2	6-9, 12-16
11	Тема 11. Визначення складу карбонатних мінералів рентгенографічним методом. Кристалохімія тригональних карбонатів. Рентгенографічні методи дослідження складу кальциту. Методи виявлення особливостей складу доломіту.	лабораторні заняття	2	6-9, 12-16
12	Тема 12. Визначення складу мінералів групи сульфідів (піротину, арсенопіриту і піриту) рентгенографічним методом. Визначення вмісту різних модифікацій піротину. Визначення складу арсенопіриту для виявлення типу мінералізації. Залежність розміру елементарної комірки піриту від вмісту ізоморфних входжень.	лабораторні заняття	2	6-9, 12-16
13	Тема 13. Монокристална дифрактометрія. Статистика інтенсивностей та визначення просторової групи. Прямі методи структурної роз- шифровки.	лабораторні заняття	2	3,10,11
14	Тема 14. Аналіз дефектів кристалічної структури за розширенням ліній. Обмеженість розміру кристалітів (дисперсність). Розширення від хаотично	лабораторні заняття	2	3,10,11

	розподілених дислокацій.			
15	Тема 15. Аналіз текстури полікристалічної мінеральної речовини. Орієнтаційний простір. Опис текстури.	лабораторні заняття	2	6-9, 12-16
16	Тема 16. Нові методики рентгенографічних досліджень. Рентгенівська зйомка у камері Гіньє. Визначення розмірів кристалітів (областей когерентного розсіювання) і мікронапруг. Використання синхротронного випромінювання. Дифракція при високих тисках та мінерали глибинних геосфер.	лабораторні заняття, контрольне опитування	2	1-5, 10
	Всього		32	
	Перелік тем рефератів самостійної роботи:			
	<ol style="list-style-type: none"> 1. Методи виправлення помилок: 1) знімання дебаєграми мінералу зі внутрішнім стандартом; 2) знімання дебаєграми у еталонованій камері. 2. Графіки поправок та їх використання. 3. Виділення β-рефлексів на дебаєграмах, знятих на невідфільтрованому випромінюванні. 4. Рентгенівські визначники карбонатів і їх застосування. 5. Рентгенівські визначники фосфатів і їх застосування. 6. Рентгенівські визначники цеолітів і їх застосування. 7. Рентгенівські визначники мінералів олова і їх застосування. 8. Індексування дебаєграм тетрагональних мінералів графічними методами: методом Бонда. 9. Індексування дебаєграм тетрагональних мінералів графічними методами: методом Банна. 10. Індексування дебаєграм тетрагональних мінералів графічними методами: методом Харрінгтона. 11. Методика розрахунку параметрів елементарної ґратки для моноклінної сингонії. 12. Методика розрахунку параметрів елементарної ґратки для триклинної сингонії. 13. Методика розрахунку параметрів елементарної ґратки для тетрагональної сингонії. 14. Методика розрахунку параметрів елементарної ґратки для гексагональної сингонії. 15. Методика розрахунку параметрів елементарної ґратки для кубічної 	самостійна робота		1-16

	<p>сингонії.</p> <p>16. Методика отримання дебаєграм.</p> <p>17. Діагностика шаруватих силікатів.</p> <p>18. Діагностика карбонатних мінералів.</p> <p>19. Діагностика мінералів групи сульфідів.</p> <p>20. Монокристална дифрактометрія.</p> <p>21. Функція Патерсона і її властивості.</p> <p>22. Прямі методи структурної розшифровки.</p>			
	Визначення мінерального складу породи:			
	<p>1. Визначення мінерального складу магматичних порід</p> <p>2. Визначення мінерального складу вулканічних порід</p> <p>3. Визначення мінерального складу метаморфічних порід</p> <p>4. Визначення мінерального складу осадових порід</p> <p>5. Визначення мінерального складу метеоритів</p>	самостійна робота		1-16
	Всього годин самостійної роботи		88	