

**КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА
ХІМІЧНИЙ ФАКУЛЬТЕТ
Кафедра фізичної хімії**

«ЗАТВЕРДЖУЮ»

В.о. заступника декана
з навчальних робіт

Наталія Усєнко
Хімічний факультет
Наталія УСЄНКО

« 08 » 05 2025 року

**РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ
КРИСТАЛОГРАФІЯ ОРГАНІЧНИХ СПОЛУК**

для студентів

галузь знань	Е Природничі науки, математика і статистика
спеціальність	ЕЗ Хімія
освітній рівень	бакалавр
освітня програма	Хімія
вид дисципліни	вибіркова

Форма навчання	денна
Навчальний рік	2026/2027
Семестр	4
Кількість кредитів ECTS	4
Мова викладання, навчання та оцінювання	українська
Форма заключного контролю	залік

Викладач: доцент Гуральський Ілля Олександрович

Пролонговано: на 20__/20__ н. р. _____ (_____) «__» _____ 20__ р.
на 20__/20__ н. р. _____ (_____) «__» _____ 20__ р.

КИЇВ – 2025

Розробник: Гуральський Ілля Олександрович, доктор хімічних наук, старший дослідник,
доцент кафедри фізичної хімії

ЗАТВЕРДЖЕНО

В.о завідувача кафедри фізичної хімії

 Олександр РОЇК

Протокол № 10 від «29» квітня 2025 р.

Схвалено науково-методичною комісією хімічного факультету

Протокол від «7» травня 2025 року № 9

Голова науково-методичної комісії  Олександр РОЇК

« 7 » травня 2025 року

1. Мета дисципліни – метою навчальної дисципліни є ознайомлення студентів з основами рентгеноструктурного аналізу органічних речовин, принципами симетрії в кристалічних структурах, фізичними основами генерації та дифракції рентгенівських променів. Дисципліна спрямована на формування теоретичних знань щодо методів дифракційних досліджень, розв'язання та уточнення кристалічних структур, аналізу слабких взаємодій та упаковки молекул. Також важливим є набуття практичних навичок підготовки зразків, роботи з дифрактометрами, використання баз даних кристалографічної інформації та застосування сучасних програмних інструментів для візуалізації і публікації результатів.

2. Попередні вимоги до опанування або вибору навчальної дисципліни Даний курс базується на використанні знань, отриманих при вивченні курсів загальної хімії (будова молекул, основні типи хімічних зв'язків), фізики (явище інтерференції світла, умови мінімумів та максимумів інтерференції для оптичної різниці ходу, дифракція світла, дифракційна ґратка, серіальні закономірності атомних спектрів), кристалохімії.

3. Анотація навчальної дисципліни:

Курс «Рентгеноструктурний аналіз органічних речовин» охоплює основні відомості про симетрію в кристалах та кристалографічну інформацію, генерацію та дифракцію рентгенівських променів, обернену ґратку і принципи роботи дифрактометра. Розглядаються задачі дифракційного експерименту для монокристалів, методи пробопідготовки та вирошування кристалів органічних речовин.

Особливу увагу приділено методикам розв'язання та уточнення кристалічної структури, аналізу слабких міжмолекулярних взаємодій та особливостей кристалічної упаковки органічних сполук. Вивчаються сучасні підходи рентгенофазового аналізу, включаючи метод Рітвельда, явища поліморфізму та розупорядкування.

Студенти ознайомлюються з методами встановлення абсолютної структури хіральних речовин, використанням баз даних кристалографічної інформації, а також сучасними інструментами для візуалізації структур. Окремий розділ присвячено принципам FAIR-даних та правилам публікації кристалографічних результатів у наукових журналах.

Практична частина курсу включає навички підготовки зразків, проведення рентгенодифракційних досліджень, обробки та аналізу дифракційних даних, що дозволяє застосовувати рентгеноструктурний аналіз для вирішення фундаментальних і прикладних задач сучасної науки.

4. Завдання (навчальні цілі). Дисципліна спрямована на формування наступних здатностей: до абстрактного мислення, аналізу та синтезу (ЗК2); застосовувати знання і розуміння математики та природничих наук для вирішення якісних та кількісних проблем в хімії (ФК1); здатність розпізнавати і аналізувати проблеми, застосовувати обґрунтовані методи вирішення проблем, приймати обґрунтовані рішення в області хімії (ФК2); здатність здійснювати кількісні вимірювання фізико-хімічних величин, описувати, аналізувати і критично оцінювати експериментальні дані (ФК8); здатність до опанування нових областей хімії шляхом самостійного навчання (ФК10).

5. Результати навчання за дисципліною:

Результати навчання (1 – знати; 2 – вміти; 3 – комунікація; 4 – автономність та відповідальність)	Форми викладання і навчання	Методи оцінювання	Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни
1.1. Знати та розуміти принципи генерації та дифракції рентгенівських променів, будову оберненої ґратки.	Лекція, самостійна робота, розгляд кейсів	Модульна контрольна робота, оцінка самостійної роботи	10

1.2. Знати принципи рентгенодифракційного експерименту, будову та роботу дифрактометра.	Лекція, самостійна робота, розгляд кейсів	Модульна контрольна робота, оцінка самостійної роботи	5
1.3. Знати основні задачі дифракційного експерименту, методи пробопідготовки та вирощування монокристалів органічних речовин.	Лекція, самостійна робота, розгляд кейсів	Модульна контрольна робота, оцінка самостійної роботи	10
1.4. Знати методи встановлення абсолютної структури хіральных речовин на основі рентгенодифракційних даних. Знати основні типи розупорядкування органічних молекул та їх фрагментів в кристалічних структурах.	Лекція, самостійна робота, практична робота, розгляд кейсів	Модульна контрольна робота, оцінка самостійної роботи	5
2.1. Вміти аналізувати кристалографічну інформацію на основі сі-файлів. Вміти аналізувати дифракційні дані.	Лекція, самостійна робота, практична робота, розгляд кейсів	Модульна контрольна робота, оцінка самостійної роботи	10
2.2. Вміти застосовувати методи вирішення та уточнення кристалічних структур органічних речовин. Вміти визначати параметри кристалічної комірки на основі порошкограм.	Лекція, самостійна робота, практична робота, розгляд кейсів	Модульна контрольна робота, оцінка самостійної роботи	10
2.3. Вміти аналізувати упаковку органічних речовин в кристалічній структурі. Вміти візуалізувати будову молекул та їх упаковку в кристалічній структурі, слабкі взаємодії між молекулами.	Лекція, самостійна робота, практична робота, розгляд кейсів, презентація	Модульна контрольна робота, оцінка самостійної роботи, оцінка презентації	20
2.4. Вміти користуватись базами даних кристалографічної інформації для органічних речовин. Вміти готувати кристалографічну інформацію для публікації.	Лекція, самостійна робота, практична робота, розгляд кейсів, презентація	Модульна контрольна робота, оцінка самостійної роботи, оцінка презентації	20
3.1. Володіти навичками	Практична	Оцінка презентацій,	5

обговорювати з викладачем питання, що виникають в ході розгляду кейсів, вирішення задач, розв'язку та уточнення структур, самостійної роботи	робота, самостійна робота.	оцінка самостійної роботи.	
4.1. Здатність вчитись самостійно та самовдосконалюватися, нести відповідальність за власні судження та результати.	Практична робота, самостійна робота.	Оцінка презентацій, оцінка самостійної роботи.	5

6. Співвідношення результатів навчання дисципліни із програмними результатами навчання

Результати навчання дисципліни	1.1	1.2	1.3	1.4	2.1	2.2	2.3	2.4	3.1	4.1
	Програмні результати навчання									
ПРН2. Розуміти ключова хімічні поняття, основні факти, концепції, принципи і теорії, що стосуються природничих наук та наук про життя і землю, а також хімічних технологій на рівні, достатньому для їх застосування у професійній діяльності та для забезпечення можливості в подальшому глибоко розуміти спеціалізовані області хімії.	+	+	+	+	+	+	+	+		
ПРН9. Знати принципи і процедури фізичних, хімічних, фізико-хімічних методів дослідження, типові обладнання та прилади.	+	+	+							
ПРН14. Аналізувати та оцінювати дані. синтезувати нові ідеї, що стосуються хімії та її прикладних застосувань.					+	+	+	+	+	+
ПРН17. Виконувати комп'ютерні обчислення, що мають відношення до хімічних проблем, використовуючи стандартне та спеціальне програмне забезпечення, навички аналізу та відображення результатів.					+	+	+	+	+	+

7. Схема формування оцінки

7.1. Форми оцінювання студентів

Семестрове оцінювання:

Максимальна/мінімальна кількість балів, які можуть бути отримані студентом: **100 балів /60 балів**, а саме:

1. Модульна контрольна робота №1: РН 1.1, РН 1.2, РН 1.3, РН 1.4, РН 2.1, РН 2.2, РН 2.3, РН 2.4 – **20/12 балів**.

2. Модульна контрольна робота №2: РН 1.1, РН 1.2, РН 1.3, РН 1.4, РН 2.1, РН 2.2, РН 2.3, РН 2.4 – **20/12 балів**.

3. Практична робота № 1: РН 2.1, РН 2.2, РН 3.1, РН 4.1 – **25/15 балів**.

4. Практична робота № 2: РН 2.3, РН 2.4, РН 3.1, РН 4.1 – **25/15 балів**.

4. Оцінювання самостійної роботи: РН 1.1, РН 1.2, РН 1.3, РН 1.4, РН 2.1, РН 2.2, РН 2.3, РН 2.4, РН 3.1, РН 4.1 – **10/6 балів**.

7.2. Організація оцінювання:

Модульна контрольна робота № 1: не раніше 7 тижня семестру;

Модульна контрольна робота № 2: останній тиждень семестру;

Практична робота № 1: виконується впродовж 7–9 тижня семестру;

Практична робота № 2: виконується впродовж 10–13 тижня семестру;

Оцінювання самостійної роботи: впродовж семестру;

7.3. Шкала відповідності оцінок

Оцінка (за національною шкалою) / National grade	Рівень досягнень / Marks
Зараховано / Pass	90-100
	75-89
	60-74
Незадовільно / Fail	0-59

8. Структура навчальної дисципліни. Тематичний план лекцій і лабораторних занять

№ п/п	Назва теми	Кількість годин		
		лекції	практичні	Самостійна робота
Змістовний модуль 1. Теоретичні основи дифракційного експерименту.				
1	Тема 1. Основні поняття про симетрію в кристалічних структурах. Кристалографічна інформація.	4		2
2	Тема 2. Генерація та дифракція рентгенівських променів. Обернена ґратка.	2		2
3	Тема 3. Рентгенодифракційний експеримент. Конструкція дифрактометра.	2		2
4	Тема 4. Основні задачі дифракційного експерименту.	2		2
5	Тема 5. Дифракція на монокристалах.	2		2
	Модульна контрольна робота 1	2		
Змістовний модуль 2. Встановлення та аналіз кристалічної будови.				
6	Тема 6. Пробопідготовка для рентгеноструктурного експерименту. Вирощування монокристалів органічних речовин.	2		2
7	Тема 7. Методи вирішення та уточнення структури органічної речовини.	4	5	12
8	Тема 8. Слабкі взаємодії в кристалічних структурах органічних речовин. Кристалічна упаковка органічних речовин.	4		6
9	Тема 9. Рентгенофазовий аналіз. Метод Рітвельда. Поліморфізм органічних речовин.	4		2
10	Тема 10. Встановлення абсолютної структури хіральних речовин. Явище розупорядкування в кристалічних структурах.	2		2
11	Тема 11. Бази даних кристалографічної інформації для органічних речовин.	2		12
12	Тема 12. Візуалізації кристалічної структури органічної речовини.	2	5	12
13	Тема 13. Публікація кристалографічної інформації. Принципи FAIR даних для кристалографічної інформації.	4		12
	Модульна контрольна робота 2	2		
	ВСЬОГО	40	10	70

Загальний обсяг 120 год, в тому числі:

Лекції – 40 год.

Практичні заняття – 10 год.

Самостійна робота – 70 год.

9. Рекомендовані джерела

Основні:

1. Казіміров В.П., Русанов Е.Б. Рентгенографія кристалічних матеріалів: навч. посібник – К.: ВПЦ “Київський університет”. – 2016. – 287 с.
2. Казіміров В.П., Качур О.В. Рентгенографія полікристалів: навч. посібник – К.: ВПЦ “Київський університет”. – 1994.

Додаткові:

1. Cullity B.D., Stock S.R. Elements of X-Ray Diffraction. – Pearson. – 2017. – 654 p.
2. Zolotoyabko E. Basic Concepts of X-Ray Diffraction. – Wiley-VCH. – 2014. – 311 p.
3. Lee M. X-ray diffraction for materials research. From Fundamentals to Applications. – Apple Academic Press. – 2016. – 297 p.