

КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА
ХІМІЧНИЙ ФАКУЛЬТЕТ
Кафедра неорганічної хімії

«ЗАТВЕРДЖУЮ»

Заступник декана
навчальної роботи
Наталія УСЕНКО
« 30 » 06 2022 року



РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ
РЕНТГЕНІВСЬКІ МЕТОДИ В ЕКОХІМІЇ
для здобувачів освіти

галузь знань	10 Природничі науки
спеціальність	102 Хімія
освітній рівень	бакалавр
освітня програма	Хімія
вид дисципліни	вибіркова

Форма навчання	Денна
Навчальний рік	2022/2023
Семестр	7
Кількість кредитів ECTS	4
Мова викладання, навчання та оцінювання	українська
Форма заключного контролю	іспит

Викладач: доцент, Стусь Н.В.

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

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

Розробник: Стусь Наталія Вікторівна, кандидат хімічних наук, старший науковий співробітник, доцент кафедри неорганічної хімії

ЗАТВЕРДЖЕНО

В. о. зав. кафедри неорганічної хімії


Ростислав ЛАМПЕКА

Протокол № 11 від «_11_» травня 2022 р.

Схвалено науково-методичною комісією хімічного факультету.

Протокол від «29» червня 2022 року № 7

Голова науково-методичної комісії  Олександр РОЇК

« 30 » червня 2022 року

1. Мета дисципліни – засвоєння студентами теоретичних основ рентгенівських методів встановлення фазового й хімічного складу речовин і сумішей та будови речовин, оволодіння основами методів якісного та кількісного рентгенофазового аналізу й рентгеноспектрального флуоресцентного аналізу речовин і матеріалів, зокрема, таких, які можуть спричиняти антропогенне забруднення довкілля.

2. Попередні вимоги до опанування або вибору навчальної дисципліни: успішне опанування курсу „Кристалохімія”, знання теоретичних основ окремих розділів з курсів „Фізика”, „Вища математика”, „Інструментальні методи аналізу”.

3. Анотація навчальної дисципліни: В курсі розглядаються теоретичні основи, необхідні для розуміння фізичного змісту процесів отримання рентгенівського випромінювання, його взаємодії з речовиною і використання для встановлення фазового і хімічного складу речовин і матеріалів, та будови речовин. Особливу увагу приділено вивченню основ методів якісного та кількісного рентгенофазового аналізу та рентгеноспектрального флуоресцентного аналізу речовин, зокрема, таких, які можуть спричиняти антропогенне забруднення довкілля.

4. Завдання (навчальні цілі): Надати необхідну теоретичну основу для розуміння фізичного змісту процесів взаємодії рентгенівського випромінювання з речовиною, а також можливостей та обмежень рентгенівських методів встановлення фазового й хімічного складу речовин та їх кристалічної будови. Ознайомити із сучасними прикладними застосуваннями методів якісного та кількісного рентгенофазового аналізу та рентгеноспектрального флуоресцентного аналізу.

Згідно з вимогами Стандарту вищої освіти України (перший (бакалаврський) рівень вищої освіти, галузь знань 10 «Природничі науки», спеціальність 102 – «Хімія») навчальна дисципліна спрямована на досягнення наступних загальних та спеціальних (фахових) компетентностей: ЗК2, ЗК5, ЗК9 та СК1, СК3, СК4, СК8, СК9.

5. Результати навчання за дисципліною:

Результати навчання (1 – знати; 2 – вміти; 3 – комунікація)	Форми викладання і навчання	Методи оцінювання	Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни
1.1. Знати та розуміти способи отримання рентгенівського випромінювання, процеси, які відбуваються при його взаємодії з речовиною. Знати закон Мозлі, розуміти систематику рентгенівських спектрів.	Лекція, самостійне опрацювання рекомендованої літератури.	Контрольна робота (питання з відкритими відповідями); усна доповідь з презентацією /оцінювання реферату; іспит.	30
1.2. Знати та розуміти теоретичні основи методів якісного й кількісного рентгенофазового аналізу, умови дифракції рентгенівських променів на полікристалічному зразку, способи отримання дифракційної картини.	Лекція, самостійне опрацювання рекомендованої літератури.	Контрольна робота (питання з відкритими відповідями); усна доповідь з презентацією /оцінювання реферату; іспит.	30
1.3. Знати основи методу рентгенофлуоресцентного аналізу та рентгенівських методів встановлення кристалічної структури речовин.	Лекція, самостійне опрацювання рекомендованої літератури.	Контрольна робота (питання з відкритими відповідями); усна доповідь з презентацією /оцінювання реферату; іспит.	25
2.1. Вміти розраховувати міжплощинні відстані, індексувати рентгенограми, розраховувати параметри кристалічної ґратки, здійснювати пошук кристалографічної інформації в базі даних.	Лабораторні роботи.	Захист лабораторних робіт.	4
2.2. Вміти здійснювати РФА сполук (відомого та невідомого хімічного складу) та сумішей.	Лабораторні роботи.	Захист лабораторних робіт.	4
2.3. Вміти вибирати метод пробопідготовки для РСФА, інтерпретувати результати РСФА.	Лабораторні роботи.	Захист лабораторних робіт.	4
3.1. Здатність обговорювати з викладачем та колегами питання, що виникають в ході виконання лабораторних робіт.	Лабораторні роботи.	Захист лабораторних робіт.	3

6. Співвідношення результатів навчання дисципліни із програмними результатами навчання.

Результати навчання дисципліни	1	1	1	2	2	2	3
	1	2	3	1	2	3	1
Програмні результати навчання							
P02. Розуміти основи математики на рівні, достатньому для досягнення інших результатів навчання, передбачених цим стандартом та освітньою програмою.		+	+				
P05. Розуміти зв'язок між будовою та властивостями речовин.	+	+	+				
P14. Здійснювати експериментальну роботу з метою перевірки гіпотез та дослідження хімічних явищ і закономірностей.					+	+	
P15. Спроможність використовувати набуті знання та вміння для розрахунків, відображення та моделювання хімічних систем та процесів, обробки експериментальних даних.				+	+	+	
P16. Виконувати комп'ютерні обчислення, що мають відношення до хімічних проблем, використовуючи стандартне та спеціальне програмне забезпечення, навички аналізу та відображення результатів.				+	+	+	
P20. Інтерпретувати експериментально отримані дані та співвідносити їх з відповідними теоріями в хімії.				+	+	+	+
P23. Грамотно представляти результати своїх досліджень у письмовому вигляді державною та іноземною мовами з урахуванням мети спілкування.				+	+	+	+

7. Схема формування оцінки.

7.1. Форми оцінювання студентів:

Семестрове оцінювання:

Максимальна/мінімальна кількість балів, які можуть бути отримані студентом: **60 балів /36 балів**, а саме:

1. Контрольна робота №1: РН 1.1, РН 1.2 – **20/12 балів**.
2. Контрольна робота №2: РН 1.3 – **15/9 балів**.
2. Усна доповідь з презентацією/реферат з усним захистом: РН 1.1, РН 1.2, РН 1.3 – **10/6 балів**.
4. Лабораторні роботи № 1–6: РН 2.1, РН 2.2, РН 2.3, РН 3.1 – **15/9 балів**.

Підсумкове оцінювання (у формі іспиту):

Максимальна/мінімальна кількість балів, які можуть бути отримані студентом: **40 балів /24 бали**.

Результати навчання які будуть оцінюватись: РН 1.1, РН 1.2, РН 1.3.

Форма проведення: письмова робота.

Види завдань: 3 теоретичних питання по 10 балів, 5 тестових питань на 10 балів.

Для отримання загальної позитивної оцінки з дисципліни оцінка за іспит не може бути меншою 24 балів.

Студент допускається до іспиту, якщо протягом семестру він:
набрав не менше, ніж **36 балів** виконав і вчасно здав 5 з 6 лабораторних робіт.

7.2. Організація оцінювання:

Терміни проведення оцінювання:

Контрольна робота №1: не раніше 6 тижня семестру;

Контрольна робота №2: не раніше 12 тижня семестру;

Лабораторна робота № 1: виконується впродовж 2-3 тижня семестру;

Лабораторні роботи № 2-4: виконуються впродовж 4–6 тижня семестру;

Лабораторні роботи № 5 і 6: виконуються впродовж 7–9 тижня семестру;

Персональні завдання для підготовки усної доповіді з презентацією /написання реферату студенти отримують не пізніше, як за 4 тижні до закінчення семестру.

7.3. Шкала відповідності оцінок

Оцінка (за національною шкалою) / National grade	Рівень досягнень / Marks
Відмінно / Excellent	90-100
Добре / Good	75-89
Задовільно / Satisfactory	60-74
Незадовільно / Fail	0-59

8. СТРУКТУРА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ. ТЕМАТИЧНИЙ ПЛАН.

№	Назва	Кількість годин		
		Лекції	Лабораторні роботи	Самостійна робота
<i>"Теоретичні основи рентгенівських методів дослідження. Методи порошкової рентгенографії, рентгенофазовий аналіз."</i>				
1	Природа та джерела рентгенівського випромінювання. Гальмівне та характеристичне випромінювання рентгенівської трубки. Систематика рентгенівських спектрів. Закон Мозлі. Взаємодія рентгенівських променів з речовиною.	2		4

2	Дифракція рентгенівського випромінювання на порошкових зразках. Дифракційний експеримент.	2		4
3	Лабораторна робота № 1		2	2
4	Якісний рентгенофазовий аналіз. Використання стандартів у якісному рентгенофазовому аналізі.	2		4
5	Лабораторна робота № 2		2	2
6	Лабораторна робота № 3		2	2
7	Розрахунок параметрів кристалічної ґратки. Індиціювання порошкових рентгенограм.	2		4
8	Лабораторна робота 4		2	2
9	Методи кількісного рентгенофазового аналізу	2		4
10	Лабораторна робота 5.		10	4
11	Чинники, які впливають на інтенсивність, ширину та форму піків рентгенограми. Дослідження мікроструктури. Профільний аналіз дифрактограм.	4		4
12	Контрольна робота № 1			
<i>"Використання рентгенівського випромінювання для встановлення кристалічної структури й елементного складу речовин."</i>				
13	Інтерференція рентгенівських променів у кристалі. Атомна та структурна амплітуда.	2		3
14	Умови одержання і реєстрації дифракційної картини від монокристалу. Основні етапи рентгеноструктурного аналізу (РСА).	2		3
15	Методи розшифровки кристалічної структури та послідовне наближення електронної густини.	2		3

16	Рентгеноспектральний флуоресцентний аналіз (РСФА), рентгеноспектральна апаратура. Методи пробопідготовки для проведення РСФА.	2		4
17	Методи визначення окремих елементів та методи багатоелементного РСФА.	2		4
18	Лабораторна робота № 6		10	4
19	Розробка методик РСФА. Вимоги до зразків порівняння. Основні метрологічні характеристики методики аналізу. Джерела похибок аналізу.	4		4
20	Контрольна робота № 2			

Загальний обсяг 120 год., в тому числі:

Лекційні – **28 год.**

Лабораторні – **30 год.**

Консультації – **1 год.**

Самостійна робота - **61 год.**

9. Рекомендовані джерела:

Основні:

1. Казіміров В.П., Русанов Е.Б. Рентгенографія кристалічних матеріалів – К.: Київський університет, 2016.
2. Данильченко, С.М. Рентгенодифракційні методи дослідження кристалічних матеріалів [Електронний ресурс]: навч. посіб. / С.М. Данильченко, В.М. Кузнецов, І.Ю. Проценко. – Електронне вид. каф. Електроніки, загальної та прикладної фізики. - Суми: СумДУ, 2019.

Додаткові:

1. Jenkins, R., X-ray fluorescence spectrometry / Ron Jenkins. — 2nd ed. p. cm. — (Chemical analysis; v. 152) " J. Wiley, New York, 1999.
2. Pecharesky V., Zavalij P. Fundamentals of Powder Diffraction and Structural Characterization of Materials. – Springer, 2005.
3. W. Massa. Crystal Structure Determination. – Springer, 2000.