

КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА
ХІМІЧНИЙ ФАКУЛЬТЕТ
Кафедра неорганічної хімії

«ЗАТВЕРДЖУЮ»

Заступник декана

з навчальної роботи

Наталія УСЕНКО

30 » 06 2022 року



РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ
РЕНТГЕНІВСЬКІ МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ
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	5
Кількість кредитів ECTS	3
Мова викладання, навчання та оцінювання	українська
Форма заключного контролю	іспит

Викладач: доц. 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 ПОЇК

« 30 » червня 2022 року.

1. Мета дисципліни – засвоєння студентами теоретичних основ рентгенівських методів встановлення фазового і хімічного складу речовин і сумішей та кристалічної будови речовин, оволодіння основами методів якісного та кількісного рентгенофазового аналізу та рентгеноспектрального флуоресцентного аналізу, формування практичних навичок при виконанні лабораторних робіт по встановленню фазового і хімічного складу речовин і сумішей.

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 взаємодії рентгенівського випромінювання з речовиною і використання рентгенівського випромінювання для встановлення фазового і хімічного складу речовин і сумішей та кристалічної будови речовин. Розглядаються способи отримання рентгенівського випромінювання, умови дифракції рентгенівського випромінювання на полікристалічних зразках і на монокристалах, зв'язок між інтенсивністю рентгенівської флуоресценції та вмістом елемента. Обговорюються рентгенівські методи кількісного та якісного фазового аналізу речовин.

4. Завдання (навчальні цілі): Надати необхідний 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 та проблемами в галузі рентгенівських методів дослідження.

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: ЗК4, ЗК5, ЗК6 та СК1, СК3, СК4, СК6, СК8.

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.	25
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.	25
1.3. Знати та розуміти теоретичні основи використання рентгенівського випромінювання для встановлення кристалічної структури й елементного складу 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; іспит.	10
2.2. Вміти здійснювати РФА сполук (відомого та невідомого хімічного складу) та сумішей.	Лабораторні роботи.	Захист лабораторних робіт.	5
2.3. Вміти обирати метод пробопідготовки для РСФА, інтерпретувати результати РСФА.	Лабораторні роботи.	Захист лабораторних робіт.	5
3.1. Здатність обговорювати з викладачем та колегами питання, що виникають в ході виконання лабораторних робіт.	Лабораторні роботи.	Захист лабораторних робіт.	5

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							
P.01. Розуміти ключові 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.	+	+	+				
P.08. Знати принципи і процедури фізичних, хімічних, фізико-хімічних методів дослідження, типове обладнання та прилади.				+	+	+	+
P16. Виконувати комп'ютерні обчислення, що мають відношення до хімічних проблем, використовуючи стандартне та спеціальне програмне забезпечення, навички аналізу та відображення результатів.				+	+	+	
P17. Працювати самостійно або в групі, отримати результат у межах обмеженого часу з наголосом на професійну сумлінність та наукову добросесність.				+	+	+	+
P19. Використовувати свої знання, розуміння, компетенції та базові інженерно-технологічні навички на практиці для вирішення задач та проблем відомої природи.				+	+	+	+
P21. Здійснювати моніторинг та аналіз наукових джерел інформації та фахової літератури.	+	+	+				

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, РН 2.1

Форма проведення: письмова робота.

Види завдань: 4 письмових завдання по 10 балів (3 теоретичні питання та 1 практичне завдання).

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

17	Рентгеноспектральний флуоресцентний аналіз (РСФА), рентгеноспектральна апаратура. Методи пробопідготовки для проведення РСФА.	2		3
18	Лабораторна робота № 6			2
19	Методи визначення окремих елементів та методи багатоелементного РСФА.	4	4	3
20	Контрольна робота № 2			

Загальний обсяг 90 год., в тому числі:

Лекцій – **28 год.**

Лабораторні заняття - **14 год.**

Самостійна робота - **48 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.
3. Pecharesky V., Zavalij P. Fundamentals of Powder Diffraction and Structural Characterization of Materials. – Springer, 2005.
4. В.І.Карманов, М.С.Слободяник, Капшук А.О., Неділько С.А. Рентгенівські методи в неорганічній хімії. – К.: Фітосоціоцентр, 2001.

Додаткові:

1. Рентгеноструктурний аналіз у матеріалознавстві: навч.-метод. посіб.: [для вищ. навч. закл.] / С. І. Мудрий, Ю. О. Кулик, А.С. Якимович. – Львів: ЛНУ імені Івана Франка, 2017.
2. W. Massa. Crystal Structure Determination. – Springer, 2000.
3. Jenkins, R., X-ray fluorescence spectrometry / Ron Jenkins. — 2nd ed. p. cm. — (Chemical analysis; v. 152) " J. Wiley, New York, 1999.