

КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА
ХІМІЧНИЙ ФАКУЛЬТЕТ
Кафедра фізичної хімії

«ЗАТВЕРДЖУЮ»

Заступник декана
з навчальної роботи



 Наталія УСЕНКО

«30» 06 2022 року

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ
ДИФРАКЦІЙНІ МЕТОДИ АНАЛІЗУ

для здобувачів освіти

галузь знань

10 Природничі науки

спеціальність

102 Хімія

освітній рівень

бакалавр

освітня програма

Хімія

вид дисципліни

вибіркова, з блоку вибору «Фізична хімія»

Форма навчання	денна
Навчальний рік	2022/2023
Семестр	6
Кількість кредитів ECTS	4
Мова викладання, навчання та оцінювання	українська
Форма заключного контролю	іспит/залік

Викладач: проф. Роїк Олександр Сергійович

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

КИЇВ – 2022

Розробники: Роїк Олександр Сергійович, доктор хімічних наук, проф. кафедри фізичної хімії
Гуральський Ілля Олександрович, доктор хімічних наук, старший дослідник,
доцент кафедри фізичної хімії

ЗАТВЕРДЖЕНО

Завідувач кафедри фізичної хімії

 Ігор ФРИЦЬКИЙ

Протокол № 6 від « 02 » травня 2022 р.

Схвалено науково-методичною комісією хімічного факультету

Протокол від « 29 » червня 2022 року № 7

Голова науково-методичної комісії  Олександр РОЇК

« _____ » _____ 2022 року

1. Мета дисципліни – ознайомлення студентів з основами дифракційних методів дослідження структури речовини, засвоєння ними теоретичних знань стосовно генерації рентгенівських променів та характеру взаємодії їх з речовиною, набуття практичних навичок обробки та інтерпретації даних дифракційних досліджень.

2. Попередні вимоги до опанування або вибору навчальної дисципліни Даний курс базується на використанні знань, отриманих при вивченні курсів кристалохімії (структура та симетрія кристалів, точкові та просторові елементи симетрії), квантової хімії (будова атомів, умови переходу електронів між енергетичними рівнями атому), фізики (принципи генерації електромагнітного випромінювання, хвильові властивості частинок, гіпотеза де Бройля, дифракція хвиль), математики (елементи аналітичної геометрії та векторної алгебри).

3. Анотація навчальної дисципліни:

Курс “Дифракційні методи аналізу» побудований таким чином, щоб дати студентам уявлення про природу та методи генерації рентгенівського випромінювання, фізичні основи виникнення неперервного та характеристичного спектрів, особливості взаємодії рентгенівського випромінювання з матеріалами, основні положення теорії розсіювання рентгенівських променів атомами та її застосування в структурних дослідженнях. Для засвоєння зазначеного матеріалу передбачається проведення лабораторних робіт, що дають можливість освоїти методику обробки та інтерпретації дифракційних зображень, визначення структурних параметрів невідомої речовини з даних рентгенівської дифракції.

4. Завдання (навчальні цілі). Згідно з вимогами Стандарту вищої освіти України (перший (бакалаврський) рівень вищої освіти, галузь знань 10 «Природничі науки», спеціальність 102 – «Хімія») навчальна дисципліна спрямована на формування наступних здатностей: до абстрактного мислення, аналізу та синтезу (ЗК1); застосовувати знання і розуміння математики та природничих наук для вирішення якісних та кількісних проблем в хімії (СК1); до використання спеціального програмного забезпечення та моделювання в хімії (СК4); здійснювати сучасні методи аналізу даних (СК5); здійснювати кількісні вимірювання фізико-хімічних величин, описувати, аналізувати і критично оцінювати експериментальні дані (СК8).

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 поняття структури кристалів та кристалографічної інформації, знати теорію дифракції та інтерференції хвиль, основні дифракційні методи.	лекція, лабораторна робота, самостійна робота, розгляд кейсів	тестова контрольна робота, захист лабораторної роботи, іспит	15
1.2. Знати принципи побудови оберненої ґратки, закономірності розсіювання та поглинання рентгенівського випромінювання, знати та розуміти поняття структурного фактору,	лекція, лабораторна робота, самостійна робота	тестова контрольна робота, захист лабораторної роботи, іспит	14

рівняння Вульфа-Брегга.			
1.3. Знати принцип роботи та види рентгенівських трубок та детекторів, теоретичні засади монокристалльної рентгенівської дифракції, знати способи встановлення будови речовини з даних монокристалльної рентгенівської дифракції, їх практичне використання.	лекція, лабораторна робота, самостійна робота	тестова контрольна робота, захист лабораторної роботи, іспит	14
1.4. Знати теоретичні засади методу порошкової дифракції, принципи фазового аналізу з використанням методу порошкової дифракції. Знати методи індексації порошкограми.	лекція, лабораторна робота, самостійна робота, розгляд кейсів	тестова контрольна робота, захист лабораторної роботи, іспит	15
2.1. Уміти аналізувати будову речовини на основі даних кристалографічної інформації, а саме аналізувати симетрію, позиції атомів, заселеність, розміри атомів.	лекція, лабораторна робота, самостійна робота, розгляд кейсів	тестова контрольна робота, захист лабораторної роботи, іспит	10
2.2. Уміти обчислювати умови погасання, міжплощинні відстані, ідентифікувати формульну одиницю та кристалографічно незалежну частину.	лекція, лабораторна робота, самостійна робота, розгляд кейсів	тестова контрольна робота, захист лабораторної роботи, іспит	10
2.3. Здійснювати обробку та інтерпретацію дифрактограм, проводити ідентифікацію речовини за експериментальними порошкограмами та аналітичними програмними методами.	лекція, лабораторна робота, самостійна робота, розгляд кейсів	захист лабораторної роботи	6
2.4. Здійснювати обробку та інтерпретацію дифракційних даних монокристалного експерименту для невідомої речовини.	лекція, лабораторна робота, самостійна робота, розгляд кейсів	захист лабораторної роботи	6
3.1. Володіти навичками обговорювати з викладачем питання, що виникають в	самостійна робота, лабораторна	захист лабораторної роботи	5

ході виконання лабораторних робіт	робота		
4.1. Здатність вчитись самостійно та самовдосконалюватися, нести відповідальність за власні судження та результати.	лабораторна робота, самостійна робота	захист лабораторної роботи	5

6. Співвідношення результатів навчання дисципліни із програмними результатами навчання

Програмні результати навчання	Результати навчання дисципліни										
	1.1	1.2	1.3	1.4	2.1	2.2	2.3	2.4	3.1	4.1	
P08. Знати принципи і процедури фізичних, хімічних, фізико-хімічних методів дослідження, типові обладнання та прилади.	+	+	+	+	+	+	+	+			
P15. Спроможність використовувати набуті знання та вміння для розрахунків, відображення та моделювання хімічних систем та процесів, обробки експериментальних даних.					+	+	+	+			
P19. Використовувати свої знання, розуміння, компетенції та базові інженерно-технологічні навички на практиці для вирішення задач та проблем відомої природи.					+	+	+	+	+	+	
P20. Інтерпретувати експериментально отримані дані та співвідносити їх з відповідними теоріями в хімії.					+	+	+	+	+	+	

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. Модульна контрольна робота №1: РН 1.1, РН 1.2, РН 2.1, РН 2.2 – **15/8 балів**.
1. Модульна контрольна робота №2: РН 1.3, РН 1.4, РН 2.3, РН 2.4 – **15/8 балів**.
2. Лабораторні роботи № 1–5: 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 – **25/17 балів**.
4. Оцінювання самостійної роботи: РН 3.1, РН 4.1 – **5/3 бали**.

Підсумкове оцінювання (у формі екзамену):

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 1.4, РН 2.1, РН 2.2.

Форма проведення: письмова робота.

Види завдань: 2 письмових завдання (2 теоретичних питання) на 20 балів і 10 тестових питань на 20 балів.

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

Студент допускається до екзамену, якщо протягом семестру він:
набрав не менше, ніж **36 балів**;
виконав і вчасно здав всі лабораторні роботи

7.2. Організація оцінювання:

Модульна контрольна робота № 1: не раніше 8 тижня семестру;

Модульна контрольна робота № 2: останній тиждень семестру;

Лабораторна робота № 1: виконується до 2 тижня семестру;

Лабораторна робота № 2: виконується впродовж 3–4 тижня семестру;

Лабораторна робота № 3: виконується впродовж 5-6 тижня семестру;

Лабораторна робота № 4: виконується впродовж 7-9 тижня семестру;

Лабораторна робота № 5: виконується в передостанній тиждень семестру;

Оцінювання самостійної роботи: впродовж 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 лекцій і лабораторних занять

№ п/п	Назва теми	Кількість годин		
		лекції	лабораторні	Самостійна робота
Змістовий модуль 1. Теорія рентгенівської дифракції				
1	Вступ. Тема 1. Елементи симетрії та операції симетрії. Гратки Браве. Сингонії, системи гратки, кристалічні системи. Просторові групи.	2	7	7
2	Тема 2. Кристалографічна інформація: кристалографічно незалежна частина, формульна одиниця, координати атомів, розміри атомів.	2		6
3	Тема 3. Дифракція та інтерференція хвиль. Дифракційні методи – рентгенографія, електронографія, нейтронографія. Природа та генерація рентгенівських променів, рентгенівські спектри.	2	6	7
4	Тема 4. Розсіювання та поглинання рентгенівського випромінення. Структурний фактор. Обернена гратка.	2		7
5	Тема 5. Рівняння Вульфа-Брегга. Міжплощинна відстань, квадратичні форми. Правила відбору.	2		6
6	Модульна контрольна робота 1	1		
Змістовий модуль 2. Застосування рентгенівської дифракції				
7	Тема 6. Рентгенодифракційний експеримент. Рентгенівські трубки, синхротронне випромінення. Монохроматори. Центрування кристалу, гоніометри. Детектори.	2		7
8	Тема 7. Монокристална рентгенівська дифракція. Пробопідготовка для монокристалної дифракції.	2	6	7
9	Тема 8 Встановлення будови речовини з даних монокристалної рентгенівської дифракції.	2		6
10	Тема 9. Метод порошкової дифракції. Геометрія порошкового експерименту. Обробка порошкограм. Фазовий аналіз.	2	6	7
11	Тема 10. Індексація порошкограм речовини невідомої структури. Визначення параметрів комірки.	2	7	6
12	Модульна контрольна робота 2	1		
	УСЬОГО	22	32	66

Загальний обсяг 120 год, в тому числі:

Лекції – 22 год.

Лабораторні заняття – 32 год.

Самостійна робота – 66 год.

9. Рекомендовані джерела

Основні:

1. Казіміров В.П., Русанов Е.Б. Рентгенографія кристалічних матеріалів: навч. посібник. – Київ: ВПЦ “Київський університет”, 2016. – 287 с.
2. Казіміров В.П., Качур О.В. Рентгенографія полікристалів: навч. посібник. – Київ: ВПЦ “Київський університет”, 1994. – 76 с.
3. П. І. Лобода, О. П. Карасевська, І. Ю. Троснікова. Рентгеноструктурний аналіз матеріалів у дисперсному стані: навч. посіб. – Київ: Центр учбової літератури, 2017. – 139 с.
4. Казіміров В.П., Сокольський В.Е., Роїк О.С., Самсоніков О.В. Структура неупорядкованих систем. Теорія та моделювання. – Київ: ВПЦ “Київський університет”, 2009. – 319 с

Додаткові:

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