

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

«ЗАТВЕРДЖУЮ»

Заступник декана
з навчальної роботи

 **Наталія УСЕНКО**

» 06 2022 року

**РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ
ДОСЛІДЖЕННЯ ТА АНАЛІЗ КРИСТАЛІЧНОЇ БУДОВИ
для здобувачів освіти**

галузь знань	10 Природничі науки
спеціальність	102 Хімія
освітній рівень	магістр
освітня програма	Хімія
вид дисципліни	вибіркова, з блоку вибору «Фізична хімія»

Форма навчання	денна
Навчальний рік	2022/2023
Семестр	3
Кількість кредитів ECTS	3
Мова викладання, навчання та оцінювання	українська
Форма заключного контролю	іспит

Викладач: доцент Гуральський Ілля Олександрович

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

КИЇВ – 2022

Розробник: 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 основними методами дослідження кристалічної будови, а саме методами вирішення та уточнення кристалічних структур на основі даних монокристалічної та порошкової дифракції, а також набуття практичних навичок із аналізу кристалічної будови.

2. Попередні вимоги до опанування або вибору навчальної дисципліни. Даний курс базується на використанні знань, отриманих при вивченні курсів дифракційних методів аналізу (теорія рентгенівської дифракції, розсіювання рентгенівського випромінення, обернена ґратка, правила відбору, основи методів монокристалічної та порошкової дифракції), кристалохімії (структура та симетрія кристалів, точкові та просторові елементи симетрії), квантової хімії (типи хімічного зв'язку), фізики (дифракція хвиль), математики (елементи аналітичної геометрії та векторної алгебри).

3. Анотація навчальної дисципліни: Курс «Дослідження та аналіз кристалічної будови» побудований таким чином, щоб дати уявлення студентам про методи вирішення невідомої кристалічної структури на основі даних монокристалічної та порошкової дифракції, особливості локалізації різних атомів, ефекти розупорядкування та двійникування. Також курс спрямований на здобуття студентами практичних навичок з аналізу кристалічної будови, встановлення основних структурних особливостей нових речовин, аналіз упаковки та слабких взаємодій у кристалічних структурах, підготовку структурних даних для представлення у наукових публікаціях.

4. Завдання (навчальні цілі): дисципліна спрямована надати знання та розуміння предметної області та професійної діяльності (ЗК1), формує здатність вчитися і оволодівати сучасними знаннями (ЗК2), здатність до пошуку, критичного аналізу та обробки інформації з різних джерел (ЗК14), здатність використовувати закони, теорії та концепції хімії у поєднанні з відповідними математичними інструментами для опису природних явищ (ФК1), уміння будувати адекватні моделі хімічних явищ, досліджувати їх для отримання нових висновків та поглиблення розуміння природи, в тому числі з використанням методів молекулярного, математичного і комп'ютерного моделювання (ФК2)

5. Результати навчання за дисципліною:

Результати навчання (1 – знати; 2 – уміти; 3 – комунікація; 4 – автономність та відповідальність)	Форми викладання і навчання	Методи оцінювання	Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни
1.1. Знати та розуміти методи вирішення та уточнення кристалічної структури, критерії якості дифракційного експерименту та уточнення структури, методи встановлення структури речовини з даних порошкової дифракції.	лекція, лабораторна робота, самостійна робота, розгляд кейсів	тестова контрольна робота, захист лабораторної роботи, іспит	15
1.2. Знати принципи локалізації водневих атомів. Розуміти явище розупорядкування в кристалічних структурах та явище двійникування кристалів.	лекція, лабораторна робота, самостійна робота	тестова контрольна робота, захист лабораторної роботи, іспит	14
1.3. Знати основні складові	лекція,	тестова контрольна	14

файлу кристалографічної інформації, особливості основних типів слабких взаємодій, що проявляються в кристалічних структурах.	лабораторна робота, самостійна робота	робота, захист лабораторної роботи, іспит	
1.4. Знати способи організації інформації в кристалографічних базах даних, знати вимоги до представлення кристалографічної інформації у наукових публікаціях.	лекція, лабораторна робота, самостійна робота, розгляд кейсів	тестова контрольна робота, захист лабораторної роботи, іспит	15
2.1. Уміти вирощувати монокристали для проведення дифракційних досліджень, уміти вирішувати та уточнювати структуру з даних дифракційних досліджень, в тому числі при наявності двійникування кристалів та розупорядкування в структурах.	лекція, лабораторна робота, самостійна робота, розгляд кейсів	тестова контрольна робота, захист лабораторної роботи, іспит	10
2.2. Уміти уточнювати кристалічну структуру методом Рітвельда.	лекція, лабораторна робота, самостійна робота, розгляд кейсів	тестова контрольна робота, захист лабораторної роботи, іспит	10
2.3. Уміти візуалізувати кристалічні структури, аналізувати кристалічні структури, геометрію молекул, слабкі взаємодії в кристалічних структурах.	лекція, лабораторна робота, самостійна робота, розгляд кейсів	захист лабораторної роботи	6
2.4. Уміти проводити пошук у кристалографічних базах даних, аналізувати та систематизувати кристалографічну інформацію, уміти готувати кристалографічну інформацію для представлення у наукових публікаціях.	лекція, лабораторна робота, самостійна робота, розгляд кейсів	захист лабораторної роботи	6
3.1. Володіти навичками обговорювати з викладачем питання, що виникають в ході виконання лабораторних	самостійна робота, лабораторна робота	захист лабораторної роботи	5

робіт			
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

Результати навчання дисципліни Програмні результати навчання	1.1	1.2	1.3	1.4	2.1	2.2	2.3	2.4	3.1	4.1
	P01. Знати та розуміти наукові концепції та сучасні теорії хімії, а також фундаментальні основи суміжних наук.	+	+	+						
P02. Глибоко розуміти основні факти, концепції, принципи і теорії, що стосуються предметної області, опанованої у ході магістерської програми, використовувати їх для розв'язання складних задач і проблем, а також проведення досліджень з відповідного напрямку хімії.	+	+		+	+	+	+	+	+	+
P05. Володіти методами комп'ютерного моделювання структури, параметрів і динаміки хімічних систем.	+	+			+	+				
P09. Збирати, оцінювати та аналізувати дані, необхідні для розв'язання складних задач хімії, використовуючи відповідні методи та інструменти роботи з даними.					+	+	+	+	+	+
P14. 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 /34 бали**, а саме:

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

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 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 іспит не може бути меншою, ніж 24 бали.

Студент допускається до іспиту, якщо впродовж семестру він:

набрав не менше, ніж **34 бали**;

виконав і вчасно здав усі 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 3 тижня семестру;

Лабораторна робота № 2: виконується впродовж 5–6 тижня семестру;

Лабораторна робота № 3: виконується впродовж 8-9 тижня семестру;

Лабораторна робота № 4: виконується впродовж 11-12 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

№	Назва теми	Кількість годин		
		лекції	лабораторні	самостійна робота
Змістовий модуль 1. Дослідження кристалічної будови				
1	Вступ. Тема 1 <i>Поняття кристалічної будови. Методи вирощування монокристалів.</i>	2	2	6
2	Тема 2 <i>Методи вирішення та уточнення кристалічної структури. Програмні пакети для вирішення та уточнення кристалічних структур. Критерії якості дифракційного експерименту та уточнення кристалічної структури.</i>	2	2	6
3	Тема 3 <i>Локалізація водневих атомів. Явище розупорядкування в кристалічних структурах. Методи уточнення структур з розупорядкуванням.</i>	2		6
4	Тема 4 <i>Двійникування кристалів. Методи обробки дифракційних даних для двійникованих кристалів.</i>	2		6
5	Тема 5 <i>Встановлення кристалічної будови речовин з даних порошкової дифракції. Метод Рітвельда.</i>	1	2	6
6	<i>Модульна контрольна робота 1</i>	1		
Змістовий модуль 2. Аналіз кристалічної будови				
7	Тема 6 <i>Файл кристалографічної інформації, його складові. Візуалізація кристалічної структури. Програмні пакети для візуалізації кристалічної структури.</i>	2	2	6
8	Тема 7 <i>Аналіз кристалічної структури: координати атомів, довжини зв'язків, кути. Аналіз геометрії молекул.</i>	2		6
9	Тема 8 <i>Аналіз слабких взаємодій в кристалічних структурах: водневі зв'язки, пі-пі та інші слабкі контакти.</i>	2		6
10	Тема 9 <i>Кристалографічні бази даних. Пошук, аналіз та систематизація кристалографічної інформації.</i>	2		6
11	Тема 10 <i>Презентація кристалографічної інформації. Підготовка кристалографічної інформації для представлення у наукових публікаціях.</i>	1	2	6
12	<i>Модульна контрольна робота 1</i>	1		
	УСЬОГО	20	10	60

Загальний обсяг 90 год, в тому числі:

Лекції – 20 год.

Лабораторні заняття – 10 год.

Самостійна робота – 60 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. Лиопо В.А., Война В.В. Рентгеновская дифрактометрия: учебн. пособие. – Гродно: ГрГУ, 2003. – 171 с.
3. Алешина Л.А., Шиврин О.Н. Рентгенография кристаллов. – Петрозаводск: ПетрГУ. – 2004. – 320 с.
4. Seeck O.H., Murphy B.M. X-ray diffraction. Modern Experimental Techniques. – Pan Stanford Publishing. – 2014. – 468 p.
5. Guinebretière R. X-ray Diffraction by Polycrystalline Materials. – ISTE. – 2007. – 384 p.
6. Waseda Y., Matsubara E., Shinoda K. X-Ray Diffraction Crystallography. X-Ray Diffraction Crystallography. – Springer. – 2011. – 322 p.

Додаткові:

7. Казіміров В.П., Качур О.В. Рентгенографія полікристалів: Навч. посібник. К.: ВПЦ "Київський університет". – 1994.
8. Миркин Л.И. Рентгеноструктурный анализ. Индексирование рентгенограмм: справочн. руководство – М.: Наука, Главная редакция физико-математической литературы. – 1981. – 496 с.
9. Липсон Г., Стипл Г. Интерпретация порошковых рентгенограмм. – М: Мир. – 1972. – 384 с.