

**КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ  
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА  
Хімічний факультет**

**Кафедра фізичної хімії**

**«ЗАТВЕРДЖУЮ»**

**Заступник декана/директора**

**з навчальної роботи**

**Наталія УСЕНКО**



**« 3 » квітня 2020 року**

**РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ  
МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ СТРУКТУРИ РЕЧОВИНИ В  
РІЗНИХ АГРЕГАТНИХ СТАНАХ**

**для студентів**

*галузь знань* **10 – Природничі науки**  
*спеціальність* **102 - Хімія**  
*освітній рівень* **Магістр**  
*освітня програма* **Хімія**  
*вид дисципліни* **Вибіркова**

Форма навчання	<b>Денна</b>
Навчальний рік	<b>2019/2020</b>
Семестр	<b>III</b>
Мова викладання, навчання та оцінювання	<b>Українська</b>
Кількість кредитів ECTS	<b>3</b>
Форма заключного контролю	<b>Іспит</b>

**Викладач: Казіміров Володимир Петрович**

**Пролонговано: на 2021/2022 н.р.**  **) « \_\_\_ » \_\_\_ 20\_\_ р.**

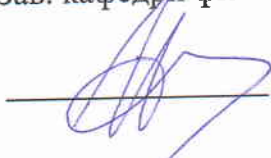
**на 2022/2023 н.р.**  **) « \_\_\_ » \_\_\_ 20\_\_ р.**

**КИЇВ – 2020**

Розробник: Казіміров Володимир Петрович, професор, доктор хімічних наук,  
професор кафедри фізичної хімії

ЗАТВЕРДЖЕНО

Зав. кафедри фізичної хімії

 Ігор ФРИЦЬКИЙ

Протокол № від " " 2020 р.

Схвалено науково - методичною комісією хімічного факультету

Протокол № 5 від 21 квітня 2020 року

Голова науково-методичної комісії  Олександр РОЇК

«21» квітня 2020 року

**1. Мета дисципліни** – ознайомлення студентів з основами дифракційного методу дослідження структури речовини в різних агрегатних станах (твердому, рідкому, газоподібному) з використанням рентгенівських променів, електронів та нейтронів для чого розглядаються питання розсіювання електромагнітних хвиль від зазначених джерел атомом, молекулою, кристалічною ґраткою, одноатомним розплавом, особливостей формування дифракційної картини та інтенсивність інтерференційних максимумів, області їх оптимального застосування.

## **2. Попередні вимоги до опанування навчальної дисципліни.**

Для вивчення спецкурсу використовуються знання отримані в попередніх курсах з кристалохімії (структура та симетрія кристалів), фізики (будова атомів, дифракція та інтерференція електромагнітних хвиль), математики (основи диференціального та інтегрального обчислення, диференціальні рівняння).

## **3. Анотація навчальної дисципліни.**

Предмет навчальної дисципліни “Методи дослідження структури речовини в різних агрегатних станах” побудований таким чином, щоб дати можливість студентам познайомитися та засвоїти фізичні принципи дифракційного методу дослідження структури кристалів (рентгеноструктурний метод), геометричної будови молекул (газова електронографія), структури простих одноатомних рідин (метод інтегрального аналізу Фур'є), локальної структури атомів з використанням методу EXAFS (тонка структура рентгенівських спектрів поглинання), методами аналізу отриманих експериментальних даних. Передбачається ознайомлення студентів з методом малокутового розсіювання рентгенівських променів та використання синхротронного випромінювання та теплових нейтронів в структурних дослідженнях в рамках написання рефератів.

## **4. Завдання (навчальні цілі).**

Сформулювати загальні принципи дифракційного методу та його використання при дослідженні структури речовини в різних агрегатних станах;

Ознайомити студентів з особливостями взаємодії та основними положеннями теорії розсіювання рентгенівських променів, електронів та нейтронів речовиною, областями їх найбільш оптимального використання в наукових дослідженнях, з принципами формування дифракційної картини при розсіювання рентгенівських променів від полікристала, монокристала, рідини, молекули, методами аналізу та інтерпретації експериментальних даних, з можливостями рентгенівської спектроскопії поглинання (метод EXAFS) при дослідженні локальної структури атомів, з основними методами дослідження та аналізу структури речовини в твердому стані - рентгеноструктурний аналіз монокристалів, з фізичними основами газової електронографії та її використання для дослідження геометричної будови молекул, з методом мало кутового розсіювання та його використання при дослідженні дисперсної структури твердих тіл, з методикою рентгенодифракційного дослідження та аналізу структури рідких металів з використанням Методу Оберненого Монте Карло;

Навчити студентів самостійно розраховувати дифрактограму полікристалічної речовини та інтенсивність інтерференційних піків, використовувати бази структурних даних для аналізу даних рентгенодифракційного експерименту.

Згідно з вимогами Стандарту вищої освіти України (другий (магістерський) рівень вищої освіти, галузь знань 10 «Природничі науки», спеціальність 102 – «Хімія») навчальна дисципліна спрямована на формування таких загальних та фахових компетентностей: ЗК1, ЗК2, ЗК3, ЗК4, ЗК6, ЗК14 та ФК2, ФК4, ФК5, ФК6, ФК9.

## 5. Результати навчання за дисципліною:

Результати навчання (1. знати; 2. вміння; 3. комунікація; 4. автономність та відповідальність)		Форми викладання і навчання	Методи оцінювання	Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни
Код	Результати навчання			
1.1	Знати способи генерації рентгенівського випромінювання, монохроматизації, колімації та фокусування, типи дифрактометрів та детекторів що використовуються.	Лекції, лабораторний практикум, самостійні роботи	тестова контрольна робота, обов'язкові домашні (самостійні) роботи, захист лабораторної роботи, письмовий іспит	10
1.2	Знати основи теорії розсіювання та поглинання рентгенівських променів речовиною, можливості методу мало кутového розсіювання, фізичні основи методу газової електроннографії та нейтронографії.	Лекції, лабораторний практикум, самостійні роботи	тестова контрольна робота, обов'язкові домашні роботи, захист лабораторної роботи, письмовий іспит	20
1.3	Знати загальну стратегію проведення рентгеноструктурного експерименту, методи визначення кристалічних структур, фізичні принципи методу EXAFS.	Лекції, лабораторний практикум, самостійні роботи	тестова контрольна робота, обов'язкові домашні роботи, захист лабораторної роботи, письмовий іспит	20
1.4	Знати основи дифракційного методу дослідження та аналізу структури неупорядкованих систем.	Лекції, лабораторний практикум, самостійні роботи	тестова контрольна робота, обов'язкові домашні роботи, захист лабораторної роботи, письмовий іспит	18
2.1	Використання набутих знань та вміння для проведення кристалографічних розрахунків та подальшому аналізі структури, обробці експериментальних даних	Лабораторний практикум, самостійні роботи	тестова контрольна робота, захист лабораторної роботи, обов'язкові домашні (самостійні) роботи, письмовий іспит	14
3.1	Здатність до фахового спілкування в діалоговому режимі з колегами та цільовою аудиторією.	Лабораторний практикум, самостійні роботи	захист лабораторної роботи	6
4.1	Здатність вчитись самостійно та самовдосконалюватися, нести відповідальність за власні судження та результати.	Самостійні роботи	обов'язкові домашні (самостійні) роботи	12

## 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	3.1	4.1
РН01. Знати та розуміти наукові концепції та сучасні теорії хімії, а також фундаментальні основи суміжних наук.	+	+	+	+			
РН02. Глибоко розуміти основні факти, концепції, принципи 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.	+	+	+	+			
РН05. Володіти методами комп'ютерного моделювання структури, параметрів і динаміки хімічних систем.					+	+	+
РН09. Збирати, оцінювати та аналізувати дані, необхідні для розв'язання складних задач хімії, використовуючи відповідні методи та інструменти роботи з даними.					+	+	+
РН14. Інтерпретувати експериментально отримані дані та співвідносити їх з відповідними теоріями в хімії.					+	+	+

### 7.1. 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 – **10/6 балів**.
1. Модульна контрольна робота №2: РН 1.3, РН 1.4, РН 2.1 – **10/6 балів**.
2. Лабораторні роботи № 1–5: РН 1.1, РН 1.2, РН 1.3, РН 1.4, РН 2.1, РН 3.1, РН 4.1 – **30/18 балів**.
4. Оцінювання самостійної роботи: РН 3.1, РН 4.1 – **10/6 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 1.4, РН 2.1.

Форма проведення: письмова робота.

Види завдань: 2 теоретичних питання на 25 балів і одна розрахункова задача 15 балів.

**Для отримання загальної позитивної оцінки з дисципліни оцінка за іспит не може бути меншою, ніж 24 бали.**

**Студент допускається до іспиту, 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 3 тижня семестру;

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

Лабораторна робота № 3: виконується впродовж 8–9 тижнів семестру;

Лабораторна робота № 4: виконується впродовж 11–12 тижнів 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
<b>Відмінно</b> / Excellent	90-100
<b>Добре</b> / Good	75-89
<b>Задовільно</b> / Satisfactory	60-74
<b>Незадовільно</b> / Fail	0-59

## 8. СТРУКТУРА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ ТЕМАТИЧНИЙ ПЛАН ЛЕКЦІЙ І ЛАБОРАТОРНИХ ЗАНЯТЬ

№ лекції	Назва лекцій	Кількість годин		
		лекції	Лабораторні роботи	Самостійна робота
<b>ЗМІСТОВНИЙ МОДУЛЬ I</b>				
1	Вступ. Дифракція та інтерференція хвиль та частинок. Дифракційні методи – рентгенографія, електроннографія, нейтронографія – порівняння, аналіз, області застосування. Синхротронне випромінювання.	2		6
2	Взаємодія рентгенівських променів з речовиною. Тонка структура рентгенівських спектрів поглинання. Метод EXAFS в дослідженні локальної структури атомів.	2		6
3	Розсіювання рентгенівських променів та електронів атомом. Аномальне розсіювання та його використання в структурних дослідженнях.	2		6
4	Молекулярне розсіювання.. Основи газової електроннографії.	2	3	6
5	Розсіювання рентгенівських променів. кристалами малих розмірів. Рівняння Лауе та його інтерпретація.	2		6
6	Інтенсивність дифракційних максимумів. Вплив теплових коливань атомів на інтенсивність інтерференційних піків. Модульна контрольна робота №1	2	3	6
<b>ЗМІСТОВНИЙ МОДУЛЬ II</b>				
7	Структура рідини та методи її дослідження та аналізу. Метод інтегрального аналізу Фур'є.	2	4	6
8	Генерація структурних моделей металічних розплавів методом Оберненого Монте Карло. Фізичні основи дифракції нейтронів.	2		6
9	Основні принципи рентгеноструктурного аналізу.	2		6
10	Малокутове розсіювання та його застосування при аналізі дисперсної структури твердих тіл. Модульна контрольна робота №2	2		6

Загальний обсяг **90 год.**, в тому числі:

Лекційні – **20 год.**

Лабораторні роботи – **10 год.**

Самостійна робота - **60 год.**

## 9. Рекомендовані джерела

### Основні:

1. Русаков А.А. Рентгенография металлов - М: Атомиздат.- 1977.
2. Казіміров В.П., Русанов Е.Б. Рентгенография кристалічних матеріалів. – К: ВПЦ “Київський університет”, 2016.
3. Уманский Я.С., Скаков Ю.А., Иванов А.И., Расторгуев Л.Н. Кристаллография, рентгенография и электронная микроскопия. - М: Металургия, 1982.
3. Мильбурн Г. Рентгеновская кристаллография. – М.: Мир,1975.
4. Казіміров В.П., Сокольський В.Е., Роїк О.С., Самсоніков О.В. Структура неупорядкованих систем. – К.: ВПЦ “Київський університет”, 2009.
5. Казіміров В.П., Качур О.В. Рентгенография полікристалів: Навч. посібник. К.: ВПЦ “Київський університет”, 1994.
6. Гинье А. Рентгенография кристаллов. – М: Физ-матгиз, 1961.

### Додаткові:

1. Теоретические основы газовой электрографии. – М.: Изд-во Московского университета, 1974.
2. Warren В.Е. X-ray Diffraction, 1969.
3. Авдюхина В.М., Батсурь Д., Губенко В.В. и др. Рентгенография. Спецпрактикум. – М: Изд-во МГУ, 1986.