

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

**«ЗАТВЕРДЖУЮ»**

Заступник декана  
з навчальної роботи



*[Signature]*  
\_\_\_\_\_ Наталія УСЕНКО

« 30 » 06 2022 року

**РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ  
ЕЛЕКТРОНОГРАФІЯ**

для здобувачів освіти

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

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

Викладач: професор, Роїк О.С.

Пролонговано: на 20\_\_/20\_\_ н. р. \_\_\_\_\_ (\_\_\_\_\_) «\_\_» \_\_\_\_\_ 20\_\_ р.  
на 20\_\_/20\_\_ н. р. \_\_\_\_\_ (\_\_\_\_\_) «\_\_» \_\_\_\_\_ 20\_\_ р.

**КИЇВ – 2022**

Розробник: Роїк Олександр Сергійович, д.х.н., доцент, професор, кафедра 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** – вивчення явищ дифракції та інтерференції хвиль, хвильової природи електрону, принципіальної схеми електронोगрафа, формування дифракційної картини при взаємодії електронів зі зразком, формування розуміння основних положень теорії розсіювання електронів та її застосування, переваги та недоліки електронграфічного методу у порівнянні з рентгенографічним методом, формування практичних навичок при проведенні лабораторних робіт із встановлення структури кристалічних речовин за допомогою електронogram.

**2. Попередні вимоги до опанування або вибору навчальної дисципліни:**

Навчальна дисципліна “Електронграфія” базується на знаннях, отриманих в ході вивчення курсів „Кристалохімія”, „Фізика”, „Вища математика”. Студенти повинні знати основи фізики та вищої математики, вміти застосовувати знання кристалохімії для аналізу та опису структури кристалічних тіл, володіти практичними навичками диференціального та інтегрального числення.

**3. Анотація навчальної дисципліни:** навчальна дисципліна розглядає формування дифракційної картини при розсіюванні електронів від полікристалічного зразка та монокристалу, амплітуду атомного розсіювання електронів та рівняння Лауе. Студенти знайомляться із дослідженням структури молекул та кристалічних тіл методом дифракції електронів, прецизійними методами визначення параметрів елементарної комірки, якісним та кількісним фазовим аналізом.

**4. Завдання (навчальні цілі):** Сформувати необхідний теоретичний базис для розуміння основних положень теорії розсіювання електронів та її застосування для структурного та фазового аналізу кристалічних тіл. Навчити прецизійним методам визначення параметрів елементарної комірки при дослідженні монокристалічних зразків, надати розуміння можливостей та обмежень якісного та кількісного фазового аналізу за допомогою дифракції електронів.

Згідно з вимогами Стандарту вищої освіти України (перший (бакалаврський) рівень вищої освіти, галузь знань 10 «Природничі науки», спеціальність 102 – «Хімія») навчальна дисципліна “Електронграфія” спрямована на досягнення перелічених загальних та спеціальних (фахових) компетентностей з опису освітньої програми: ЗК3, ЗК10 та СК1, СК3, 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 теорію розсіювання електронів від монокристалічного та полікристалічного зразків геометричному наближенні (рівняння Бреґга).	Лекція, самостійне та опрацювання рекомендованої літератури.	Контрольна робота (питання з відкритими відповідями); усна доповідь з презентацією; перевірка завдань самостійної роботи, оцінювання реферату.	15
1.2. Знати та розуміти теорію розсіювання електронів від монокристалічного та полікристалічного зразків кінематичному наближенні (рівняння Лауе).	Лекція, самостійне та опрацювання рекомендованої літератури.	Контрольна робота (питання з відкритими відповідями); усна доповідь з презентацією; перевірка завдань самостійної роботи, оцінювання реферату.	15
1.3. Знати та розуміти методи	Лекція,	Контрольна робота (питання з	15

дослідження структури молекул методом дифракції електронів.	самостійне опрацювання рекомендованої літератури.	відкритими відповідями); усна доповідь з презентацією; перевірка завдань самостійної роботи, оцінювання реферату.	
1.4. Знати теоретичні основи різноманітних методів ідентифікації структури речовини невідомої сингонії, також фазового аналізу залітератури за допомогою дифракції електронів.	Лекція, самостійне опрацювання рекомендованої літератури.	Контрольна робота (питання з відкритими відповідями); усна доповідь з презентацією; перевірка завдань самостійної роботи, оцінювання реферату.	15
2.1. Уміти застосовувати методи ідентифікації структури речовини невідомої сингонії, а також кількісного та якісного фазового аналізу речовин на основі даних дифракції електронів (дифрактограм).	Лабораторні роботи.	Захист лабораторних робіт; перевірка завдань самостійної роботи.	15
2.2. Уміти використовувати набуті знання для розрахунків при ідентифікації речовини невідомої сингонії та прецизійному визначенні параметрів елементарної комірки.	Лабораторні роботи.	Захист лабораторних робіт; перевірка завдань самостійної роботи.	15
3.1. Здатність обговорювати з викладачем та колегами питання, що виникають в ході виконання лабораторних робіт зі структурного та фазового аналізу кристалічних тіл.	Лабораторні роботи.	Захист лабораторних робіт.	10

## 6. Співвідношення результатів навчання дисципліни з програмними результатами навчання

Програмні результати навчання	Результати навчання дисципліни						
	1.1	1.2	1.3	1.4	2.1	2.2	3.1
P.05. Розуміти зв'язок між будовою та властивостями речовин.	+	+	+	+			
P15. Спроможність використовувати набуті знання та вміння для розрахунків, відображення та моделювання хімічних систем і 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					+	+	+

P.17. Працювати самостійно або в групі, отримати результат у межах обмеженого часу з наголосом на професійну сумлінність та наукову добросовісність.	+	+	+	+			
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. Контрольна робота №1: РН 1.1, РН 1.2, РН 2.2 – **15/9 балів**.
2. Контрольна робота №2: РН 1.4, РН 1.5, РН 2.2 – **15/9 балів**.
2. Усна доповідь з презентацією: РН 1.1, РН 1.2, РН 1.3, РН 1.4 – **9/6 балів**.
3. Реферат: РН 1.1, РН 1.2, РН 1.3, РН 1.4 – **6/3 бали**
4. Лабораторні роботи № 1–3: РН 2.1, РН 2.2, 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 1.4, РН 2.2.

Форма проведення: письмова робота.

Види завдань: два теоретичних питання на 14 балів, 7 тестових питань на 14 балів і 1 задача на 12 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 36 балів та виконав і вчасно виконав та здав всі лабораторні роботи.**

### 7.2. Організація оцінювання:

Терміни проведення оцінювання:

Контрольна робота №1: не раніше **5 тижня** семестру;

Контрольна робота №2: не раніше **9 тижня** семестру;

Лабораторна робота № 1: виконується до **5 тижня** семестру;

Лабораторна робота № 2: виконується впродовж **6–7 тижнів** семестру;

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

Усна доповідь з презентацією та написання реферату виконується протягом семестру, але не пізніше, ніж за **2 тижні** перед його закінченням;

Персональні завдання для написання реферату та усної доповіді з презентацією студенти отримують не пізніше, як за **7 тижнів** до закінчення 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

№ п/п	Назва теми	Кількість годин		
		лекції	лабораторні роботи	самостійна робота
<b>Теорія розсіювання електронів в геометричному наближенні</b>				
1	Дифракція та інтерференція хвиль. Хвильова природа електрону. Досліди Девіссона та Джермера.	1		3
2	Формування дифракційної картини від полікристалічного зразка та монокристалу. Рівняння Вульфа-Брегга.	1		3
3	Обернена ґратка та її властивості.	1		3
4	Квадратичні форми для різних сингоній.	2		4
5	Лабораторні роботи №1 та №2		12	4
<b>Теорія розсіювання електронів в кінематичному наближенні</b>				
6	Основи теорії розсіювання в кінематичному наближенні.	1		3
7	Рівняння Лауе.	1		4
8	Амплітуда атомного розсіювання електронів.	1		4
9	Структурний фактор.	1		4
10	Умови погасання та принципи аналітичної ідентифікації речовини невідомої сингонії.	1		3
11	Порівняння теорії розсіювання у геометричному та кінематичному наближеннях.	1		3
12	Лабораторні роботи №3 та №4		12	4
<b>Методи дослідження структури та фазового складу за допомогою дифракції електронів</b>				
13	Принципальна схема електроннографа. Особливості електроннографічного методу.	1		3
14	Дослідження структури молекул методом дифракції електронів.	1		3
15	Прецизійні методи визначення параметрів елементарної комірки.	1		3
16	Якісний та кількісний фазовий аналіз на основі даних по дифракції електронів.	2		4
17	Розрахунок інтенсивності дифракційних максимумів.	1		4
18	Теоретичний розрахунок дифрактограми.	1		3
19	Лабораторні роботи №5 та №6	1	12	4
	<b>УСЬОГО</b>	<b>18</b>	<b>36</b>	<b>66</b>

**Загальний обсяг 120 год, в тому числі:**

Лекції – **18 год.**

Лабораторні заняття – **36 год.**

Самостійна робота – **66 год.**

## Контрольні запитання та завдання:

1. Явище дифракції хвиль.
2. Отримання електронного пучка. Основні конструкційні вузли електронографа.
3. Залежність довжини хвилі електронів від напруги.
4. Підготовка полікристалічного зразка до електронографічного дослідження.
5. Стала електронографа та її розрахунок.
6. Особливості розсіювання електронів речовиною.
7. Методика розрахунку електронограми полікристалічного зразка.
8. Принципи газової електронографії.
9. Рівняння Брега, його аналіз та застосування..
10. Типи елементарних комірок та їх характеристики. Координати атомів. Розрахунок міжатомних відстаней та кутів.
11. Індеси Міллера. Індксація дифракційних максимумів на дифрактограмі.
12. Обернена ґратка та її властивості. Рівняння Брега в векторній формі.
13. Квадратична форма.
14. Поняття про прямий та обернений простір. Інтеграл Фур'є.
15. Атомна амплітуда розсіювання електронів.
16. Когерентне та некогерентне розсіювання.
17. Структурний фактор. Умови погасання для кристалів кубічної сингонії.
18. Метод Ліпсона при ідентифікації невідомої речовини вищої та середньої категорій.
19. Якісний фазовий аналіз та його використання при дослідженні діаграм стану.
20. Основні похибки, що впливають на точність визначення періоду кристалічної ґратки.
21. Метод графічної екстраполяції.
22. Вибір апроксимаційної функції.
23. Метод аналітичної екстраполяції.
24. Типи твердих розчинів.
25. Дифракційне визначення області твердих розчинів.
26. Метод визначення центру ваги дифракційного максимуму.
27. Розрахунок густини досліджуваного зразка з використанням періоду кристалічної ґратки.
28. Якісний фазовий аналіз та його використання при дослідженні діаграм стану.
29. Принципи ідентифікації фаз за дифрактограмою двохфазного зразка.
30. Методи кількісного фазового аналізу.
31. Теоретичний розрахунок дифрактограми відомого зразка.
32. Розрахунок інтенсивності дифракційних максимумів.
33. Температурний фактор Дебая-Уоллера.

## 9. Рекомендовані джерела

### Основні

1. Бойко Б.Т., Шкалето В.І., Хрипунов Г.С., Зайцев Р.В. Фізичне матеріалознавство для мікро- та наноелектроніки: дослідження структури тонких плівок електронграфічним методом: навчальний посібник. Том.1. – Харків: НТУ “ХПІ”, 2014. – 142 с..
2. Зайцев Р.В., Кіріченко М.В., Зайцева Л.В., Хрипунов Г.С., Дроздов А.М., Дроздова Г.А. Методи дослідження структури тонких плівок: підручник. – Харків: ФОП Бровін О.В., 2021. – 320 с.
3. Казіміров В.П., Русанов Е.Б. Рентгенографія кристалічних матеріалів: навч. посібник. – Київ: ВПЦ “Київський університет”, 2016. – 287 с.
4. Казіміров В.П., Сокольський В.Е., Роїк О.С., Гречишкіна Г.Ю. Рентгенографія полікристалів. Навч. посібник. – Київ: ВПЦ “Київський університет”, 2007.

### Додаткові

5. Vainshtein B. K., Zvyagin B. B., Avilov A. S. Electron diffraction structure analysis / In: Electron Diffraction Techniques. Vol. 2. ( J. M. Cowley, ed.) – Oxford Univ. Press, 1992. – Pp. 216–312.
6. Spence J.C.H. On the accurate measurement of structure-factor amplitudes and phases by electron diffraction //Acta Cryst. – 1993. – V. A49. – P. 231–274.
7. Drits V.A. Electron Diffraction and High-Resolution Microscopy of Mineral Structures. Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag, 1987.