

КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

Хімічний факультет

Кафедра фізичної хімії

«ЗАТВЕРДЖУЮ»

Заступник декана/директора
з навчальної роботи
Павленко В.О.



“08” травня 2019 року



РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ
ДИФРАКЦІЙНІ МЕТОДИ АНАЛІЗУ
для студентів

| | |
|--|------------------------------|
| <i>галузь знань</i> | 10 – Природничі науки |
| <i>спеціальність</i> | 102 - Хімія |
| <i>освітній рівень</i> | бакалавр |
| <i>освітня програма</i> | Хімія |
| <i>вид дисципліни</i> | Вибіркова |
| Форма навчання | Денна |
| Навчальний рік | 2019/2020 |
| Семестр | VI |
| Мова викладання, навчання та оцінювання | Українська |
| Кількість кредитів ECTS | 4 |
| Форма заключного контролю | Іспит |

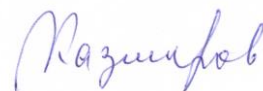
Викладач: Казіміров В.П.

Пролонговано: на **2020/2021** н.р. _____ (_____) «___» _____ 20__ р.

на **2021/2022** н.р. _____ (_____) «___» _____ 20__ р.


КИЇВ – 2019

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



ЗАТВЕРДЖЕНО


Зав. кафедри фізичної хімії

 (Фрицький І.О.)

Протокол № 7 від "09" квітня 2019 року

Схвалено науково - методичною комісією хімічного факультету

Протокол № 4 від 08.05 2019 року

Голова науково-методичної комісії  _____ Роїк О.С.
« 08 » травня 2019 року

Протокол № _____ від _____ року

Голова науково-методичної комісії _____
« _____ » _____ року

1. Мета дисципліни – ознайомлення студентів з основами дифракційних методів дослідження з використанням рентгенівських променів та електронів для чого детально розглядаються методи генерації рентгенівських променів (електронів) та типи рентгенівських спектрів, характер взаємодії їх з речовиною, основні положення теорії розсіювання, принципи формування дифракційної картини (умови погасання), та практичного застосування рентгенівських променів для прецизійного визначення параметрів кристалічної ґратки, фазового аналізу, високочутливих методів аналізу елементного складу речовини..

2. Попередні вимоги до опанування або вибору навчальної дисципліни.

Даний спецкурс базується на використанні знань отриманих в попередніх курсах з кристалохімії (структура та симетрія кристалів, точкові та просторові елементи симетрії), квантової хімії (будова атомів, система квантових чисел для електронів, умови переходу електронів між енергетичними рівнями атому при наявності вакансії), фізики (принципи генерації електромагнітного випромінювання, хвильові властивості частинок, гіпотеза де Бройля, дифракція хвиль), математики (елементи аналітичної геометрії та векторної алгебри).

1. Анотація навчальної дисципліни.

Предмет навчальної дисципліни «Дифракційні методи аналізу» побудований таким чином, щоб дати студентам уявлення про природу та методи генерації рентгенівського випромінювання, фізичні основи неперервного та характеристичного спектрів, особливості взаємодії рентгенівського випромінювання з матеріалами та явищами, що виникають при цьому, основи рентгеноспектрального аналізу, фізичні принципи дифракційних методів, основні положення теорії розсіювання рентгенівських променів, електронів атомами та її застосування в структурних дослідженнях, можливості рентгенографічного та електроннографічного методів в практиці наукових досліджень. Для засвоєння зазначеного матеріалу передбачається проведення лабораторних робіт та написання рефератів, що дають можливість освоїти методику обробки та інтерпретації дифрактограм та електроннограм, проводити фазовий аналіз полікристалічних матеріалів, ідентифікувати невідому речовину кубічної, тетрагональної та гексагональної сингоній аналітичним методом, ефективно використовувати методи прецизійного визначення параметрів елементарної комірки, розуміти умови виникнення інтерференційних піків при розсіюванні рентгенівських променів на кристалах.

4. Завдання (навчальні цілі):

- ознайомити студентів з природою, методами генерації та детектування рентгенівських променів, конструкцією рентгенівських трубок, правилами безпеки при роботі з рентгенівським випромінюванням, фізичними принципами дифракційного методу;

- ознайомити студентів з природою неперервного та характеристичного спектрів рентгенівського випромінювання, їх використанням в дифракційних дослідженнях, основами рентгеноспектрального аналізу, умовами виникнення дифракційних максимумів при розсіюванні на кристалах, явищами, що виникають при взаємодії рентгенівських променів з речовиною та їх практичним використанням;

- ознайомити студентів з основами теорії розсіювання рентгенівських променів та електронів, принципами формування дифракційної картини (умови погасання), оберненою ґраткою, квадратичними формами для різних сингоній та їх практичним використанням;

- навчити студентів коректно обробляти та інтерпретувати дифрактограми полікристалічних речовин, проводити ідентифікацію невідомої речовини кубічної, гексагональної та тетрагональної сингоній аналітичним методом, проводити рентгенофазовий аналіз, використовувати методи графічної та аналітичної екстраполяції і визначення центру ваги дифракційного піку для прецизійного визначення параметрів елементарної комірки з подальшим розрахунком густини досліджуваної речовини..

5. Результати навчання за дисципліною:

| Результати навчання (1 - знати; 2 - вміти; 3- комунікація; 4 - автономність та відповідальність) | | Форма (та/або методи і технології) викладання і навчання) | Методи оцінювання* та порогів критерій оцінювання | Відсоток у підсумковій оцінці з дисципліни |
|---|---|---|---|--|
| Код | Результати навчання | | | |
| 1.1 | Знати та розуміти явище дифракції та інтерференції хвиль, природу та методи генерації рентгенівського випромінювання, корпускулярно-хвильовий дуалізм мікрочастинок, типи детекторів рентгенівського випромінювання. | Лекції, лабораторні заняття, самостійні роботи | <i>ПТК, ОДР, ПЕ</i> | 8 |
| 1.2 | Знати та розуміти фізичну природу рентгенівських спектрів, умови відбору для спектральних ліній характеристичного спектру, закон Мозлі, Оже- ефект, основи рентгеноспектрального та мікрорентгеноспектрального аналізів. | Лекції, лабораторні заняття, самостійні роботи | <i>ПТК, ОДР, ПЕ</i> | 8 |
| 1.3 | Знати рівняння Вульфа-Брегга та його застосування, розуміти поняття структури кристалів, типи комірок Браве та їх опис, сингонії та їх кількісні характеристики, точкові та просторові елементи симетрії, індекси Міллера атомних площин. | Лекції, лабораторні заняття, самостійні роботи | <i>ПТК, ОДР, ПЕ</i> | 10 |
| 1.4 | Знати та розуміти формалізм поняття оберненої ґратки, умови виникнення інтерференційних максимумів, квадратичні форми для кристалів різних сингоній та їх практичне використання. | Лекції, самостійні роботи | <i>ПТК, ОДР, ПЕ</i> | 10 |
| 1.5 | Знати основи теорії розсіювання рентгенівських променів системою частинок в кінематичному наближенні, когерентне та некогерентне розсіювання, а також розсіювання електроном та атомом | Лекції, лабораторні заняття, самостійні роботи | <i>ПТК, ОДР, ПЕ</i> | 8 |
| 1.6 | Знати та розуміти природу ефектів, що виникають при взаємодії рентгенівських променів з речовиною та їх використання, методи прецизійного визначення параметрів елементарної комірки кристалу, основи якісного та кількісного рентгенофазового аналізу., умови безпечної роботи з рентгенівським випромінюванням. | Лекції, лабораторні заняття, самостійні роботи | <i>ПТК, ОДР, ПЕ</i> | 10 |

| | | | | |
|------------|--|--|-------------------------|-----------|
| 1.7 | Знати та розуміти умови виникнення інтерференційних піків при розсіювання рентгенівських променів непримітивною елементарною коміркою, принципи ідентифікації речовини невідомої сингонії, основи електроннографічного методу та області його застосування. | Лекції, лабораторні заняття, самостійні роботи | <i>ПТК, ОДР, ПЕ</i> | 10 |
| 2.1 | Здійснювати обробку та інтерпретацію дифрактограм та електроннограм, проводити ідентифікацію речовини невідомої сингонії вищої та середньої категорій за експериментальними даними, розраховувати густину полікристалічної речовини знаючи тип комірки Браве, проводити фазовий аналіз речовини з дифрактограми, розраховувати коефіцієнти ослаблення. | Лабораторні заняття, самостійні роботи | <i>ПТК, ОДР, ПЕ</i> | 8 |
| 2.2 | Використовувати набуті знання та вміння для розрахунків, відображення та моделювання фізико-хімічних систем та процесів, обробки експериментальних даних. | Лабораторні заняття, самостійні роботи | <i>ПТК, ОДР, ПЕ</i> | 5 |
| 2.3 | Вміти обчислювати умови погасання для кристалів різних сингоній, коректно застосовувати існуючі методи прецизійного визначення параметрів елементарної комірки, користуватися електронними рентгенівськими картотеками. | Лекції, лабораторні заняття, самостійні роботи | <i>ПТК, ОДР, ПЕ</i> | 5 |
| 2.4 | Вміти розраховувати положення інтерференційних піків на дифрактограмі речовини відомої структури, коректно підбирати тип рентгенівського випромінювання для отримання дифрактограми речовини відомого складу. | Лекції, лабораторні заняття, самостійні роботи | <i>ПТК, ОДР, ПЕ</i> | 5 |
| 3.1 | Здатність до фахового спілкування в діалоговому режимі з колегами та цільовою аудиторією. | Лекції, лабораторні заняття | <i>ОДР</i> | 5 |
| 4.1 | Здатність вчитись самостійно та самовдосконалюватися, нести відповідальність за власні судження та результати. | Лабораторні заняття, самостійні роботи | <i>ОДР</i> | 8 |

** групі письмові тематичні контрольні роботи (ПТК)
обов'язкові домашні (самостійні) роботи (ОДР)
письмовий екзамен (ПЕ)*

6. Співвідношення результатів навчання дисципліни із програмними результатами навчання

| Програмні результати навчання (назва) | Результати навчання дисципліни(код) | | | | | | | | | | | | | |
|---|-------------------------------------|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|--|
| | 1.1 | 1.2 | 1.3 | 1.4 | 1.5 | 1.6 | 1.7 | 2.1 | 2.2 | 2.3 | 2.4 | 3.1 | 4.1 | |
| Знання | | | | | | | | | | | | | | |
| Базові методологічні знання та розуміння основ хімії та суміжних галузей знань. | + | + | + | + | + | + | | | | | | | | |
| Здатність розуміти та інтерпретувати основи фізики та математики на рівні, достатньому для використання їх у різних сферах хімії. | | | | | | | | + | + | | | | | |
| Знання хімічної термінології та номенклатури, спроможність описувати хімічні дані у символічному вигляді. | | | | | | | | | | | | | | |
| Знання основних типів хімічних реакцій та їх характеристики. | | | | | | | | | | | | | | |
| Здатність пояснити зв'язок між будовою та властивостями речовин. | | | | | | | | | | | | + | | |
| Знання та розуміння періодичного закону та періодичної системи елементів, здатність описувати, пояснювати та передбачати властивості хімічних елементів та сполук на їх основі. | | | | | | | | | | | | | | |
| Знання основних принципів квантової механіки, здатність застосовувати їх для опису будови атома, молекул та хімічного зв'язку | + | | | | + | | | | | | | | | |
| Базові знання принципів і процедур фізичних, хімічних, фізико-хімічних методів дослідження, типового обладнання та приладів. | | | | | | | | + | + | + | | | | |
| Знання основ планування та проведення експериментів, методики та техніки приготування розчинів та реагентів. | | | | | | | | | | | | | | |
| Знання основних принципів термодинаміки, здатність до їх застосування для вирішення конкретних завдань. | | | | | | | | | | | | | | |
| Здатність описувати властивості аліфатичних, ароматичних, гетероциклічних та органометалічних сполук, пояснювати природу та поведінку функціональних груп в органічних молекулах. | | | | | | | | | | | | | | |
| Знання основних шляхів синтезу в органічній хімії, включаючи функціональні групові взаємоперетворення та формування зв'язку карбон-карбон, карбон-гетероатом. | | | | | | | | | | | | | | |
| Уміння | | | | | | | | | | | | | | |
| Здійснювати критичний аналіз, оцінювати дані та синтезувати нові ідеї. | | | | | | | | + | + | | | | | |

**СТРУКТУРА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ
ТЕМАТИЧНИЙ ПЛАН ЛЕКЦІЙ І ПРАКТИЧНИХ ЗАНЯТЬ**

| № лекції | Назва лекцій | Кількість годин | | |
|-----------------------------|--|-----------------|---------------------|-------------------|
| | | лекції | Лабораторні заняття | Самостійна робота |
| ЗМІСТОВНИЙ МОДУЛЬ I | | | | |
| 1 | Дифракція та інтерференція хвиль. Дифракційні методи – рентгенографія, електроннографія, нейтронографія. Природа та генерація рентгенівських променів, рентгенівські спектри.. | 2 | 2 | 6 |
| 2 | Взаємодія рентгенівських променів з матеріалами. Поглинання рентгенівських променів, лінійний та масовий коефіцієнти ослаблення. Рівняння Вульфа-Брегга. | 2 | | 8 |
| 3 | Структура кристалів, елементарні комірки, типи комірок Браве та їх характеристики. Елементи симетрії кристалів, точкові групи, сингонії, просторові групи та їх символіка. Індeksi Міллера. | 2 | 2 | 6 |
| 4 | Обернена ґратка та її властивості. Квадратичні форми кристалів різних сингоній. | 2 | 2 | 8 |
| 5 | Розсіювання рентгенівських променів. Когерентне та некогерентне розсіювання. Основні рівняння дифракції. Розсіювання вільним електроном та атомом. Контрольна робота №1. | 2 | 2 | 7 |
| ЗМІСТОВНИЙ МОДУЛЬ II | | | | |
| 6 | Розсіювання рентгенівських променів не примітивною елементарною коміркою. Структурний фактор. Умови погасання. | 2 | 12 | 8 |
| 7 | Метод Ліпсона для ідентифікації невідомої речовини вищої та середньої категорій. | 2 | | 8 |
| 8 | Прецизійні методи визначення параметрів елементарної комірки кристалічних речовин. Аналіз похибок.. Методи графічної та аналітичної екстраполяції. Метод визначення центру ваги дифракційного максимуму. | 2 | 10 | 8 |
| 9 | Принципи якісного та кількісного рентгенофазового аналізу. Визначення границі твердих розчинів рентгенографічним методом. Рентгенографічне визначення розмірів кристалітів. | 2 | | 7 |
| 10 | Основи електроннографічного методу. Контрольна робота №2. | 2 | | 4 |

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

Лекції – **20 год.**

Лабораторні заняття - **30 год**

Самостійна робота - **70 год.**

РЕКОМЕНДОВАНА ЛІТЕРАТУРА.

Основна.

2. Русаков А.А. Рентгенография металлов - М: Атомиздат.- 1977.
3. Ковба Л.М. Рентгенография в неорганической химии: Учебн. пособие - М: Изд-во МГУ.- 1971.
3. Качанов Н.Н., Миркин Л.И. Рентгеноструктурный анализ. -. М: Машгиз.- 1960.
4. Уманский Я.С., Скаков Ю.А., Иванов А.И., Расторгуев Л.Н. Кристаллография, рентгенография и электронная микроскопия. - М: Metallurgia.- 1982.
5. Липсон Г., Стипл Г. Интерпретация порошковых рентгенограмм. – М: Мир. - 1972.
6. Горелик С.С., Расторгуев Л.Н., Скаков Ю.А. Рентгенографический и электроннооптический анализ. – М: - Metallurgia. - 1970.
7. Казіміров В.П., Качур О.В. Рентгенографія полікристалів: Навч. посібник. К.: ВПЦ “Київський університет”.- 1994.
8. Казіміров В.П., Русанов Е.Б. Рентгенографія кристалічних матеріалів: навч. осібник. - К.: ВПЦ “Київський університет”.- 2016. - 287 с..

Додаткова.

9. Гинье А. Рентгенография кристаллов. – М: Физ-матгиз. - 1961.
10. Хейкер Д.М., Зевин Л.С. Рентгеновская дифрактометрия. – М: Физ матгиз. - 1963.
11. Пенкаля Т. Очерки кристаллохимии.- Л.: Химия.- 1974.
12. Warren В.Е. X-ray Diffraction. – 1969.
13. Баррет Ч.С., Массальский Т.Б. Структура металлов. / Пер. с англ. в двух частях.- М: Metallurgia. – 1984.
14. Авдюхина В.М., Батсурь Д., Губенко В.В. и др. Рентгенография. Спец- практикум. – М: Изд-во МГУ. – 1986.

В тому числі й Інтернет ресурси.