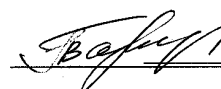


**КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА**
Хімічний факультет
Кафедра фізичної хімії

«ЗАТВЕРДЖУЮ»

Заступник декана/директора
з навчальної роботи

Павленко В.О.
факультет



« 08 » травня 2019 року

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ
Методи дослідження структури речовини в різних агрегатних
станах

для студентів

<i>галузь знань</i>	10 – Природничі науки
<i>спеціальність</i>	102 - Хімія
<i>освітній рівень</i>	Магістр
<i>освітня програма</i>	Хімія
<i>вид дисципліни</i>	Вибіркова

Форма навчання	Денна
Навчальний рік	2019/2020
Семестр	III
Мова викладання, навчання та оцінювання	Українська
Кількість кредитів ECTS	3
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 рок

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 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 (протяжна тонка структура рентгенівських спектрів поглинання), методами аналізу отриманих експериментальних даних. Передбачається ознайомлення студентів з методом малокутового розсіювання рентгенівських променів та використанням синхротронного випромінювання та теплових нейтронів в структурних дослідженнях в рамках написання рефератів.

4. Завдання (навчальні цілі).

- Сформувати 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;
- ознайомити студентів з принципами формування дифракційної картини при розсіювання рентгенівських променів від полікристала, монокристала, рідини, молекули, методами аналізу та інтерпретації експериментальних даних;
- ознайомити студентів з можливостями рентгенівської спектроскопії поглинання (метод EXAFS) при дослідженні локальної структури атомів;
- ознайомити студентів з основними методами дослідження та аналізу структури речовини в твердому стані - рентгеноструктурний аналіз монокристалів;
- ознайомити студентів з фізичними основами газової електронографії та її використання для дослідження геометричної будови молекул;
- ознайомити студентів з методом мало кутового розсіювання та його використання при дослідженні дисперсної структури твердих тіл;
- ознайомити студентів 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;
- ознайомити студентів з базами структурних даних і їх використанням для аналізу даних рентгенодифракційного експерименту.

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 способи генерації рентгенівського випромінювання, монохроматизації, колімації та фокусування, типи дифрактометрів та детекторів що використовуються.	Лекції, лабораторний практикум, самостійні роботи	<i>ПТК, ОДР, ПЕ</i>	10
1.2	Знати основи теорії розсіювання та поглинання рентгенівських променів речовиною, можливості методу мало кутового розсіювання, фізичні основи методу газової електронографії та нейтронографії.	Лекції, лабораторний практикум, самостійні роботи	<i>ПТК, ОДР, ПЕ</i>	20
1.3	Знати загальну стратегію проведення рентгеноструктурного експерименту, методи визначення кристалічних структур, фізичні принципи методу EXAFS.	Лекції, лабораторний практикум, самостійні роботи	<i>ПТК, ОДР, ПЕ</i>	20
1.4	Знати основи дифракційного методу дослідження та аналізу структури неупорядкованих систем.	Лекції, лабораторний практикум, самостійні роботи	<i>ПТК, ОДР, ПЕ</i>	18
2.1	Використання набутих знань та вмінь для проведення кристалографічних розрахунків та подальшому аналізі структури, обробці експериментальних даних	Лабораторний практикум, самостійні роботи	<i>ПТК, ОДР, ПЕ</i>	14
3.1	Здатність до фахового	Самостійні роботи	<i>ОДР</i>	6

	спілкування в діалоговому режимі з колегами та цільовою аудиторією.			
4.1	Здатність вчитись самостійно та самовдосконалюватися, нести відповідальність за власні судження та результати.	Самостійні роботи	<i>ОДР</i>	12

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

6. Співвідношення результатів навчання дисципліни із програмними результатами навчання

ПРН	РНД (код)							
	1.1	1.2	1.3	1.4	2.1	3.1	4.1	
1. Знати сталі наукові концепції та сучасні теорії хімії, а також фундаментальні основи суміжних наук.	+	+	+	+	+			
2. Знати та розуміти основні факти, концепції, принципи і теорії, що стосуються предметної області, опанованої у ході магістерської програми.	+	+	+	+	+			
3. Застосовувати отримані знання і розуміння для вирішення якісних та кількісних задач незнайомої природи.	+	+	+	+	+			
4. Знати методи синтезу та аналізу хімічних сполук.								
5. Знати методи комп'ютерного моделювання структури, параметрів і динаміки хімічних систем.			+		+			
6. Знати методологію та організації наукового дослідження.			+	+				
7. Знати іноземну мову на рівні B2								
8. Вміти ясно і однозначно донести результати власного дослідження до фахової аудиторії та/або нефахівців.						+	+	
9. Знати методологію процесів навчання й виховання, а також передові методи формування навичок організації самостійної роботи		+	+	+				
10. Здійснювати систематизацію та критичний аналіз даних.			+	+				
11. Планувати, організовувати та здійснювати експериментальну роботу самостійно та автономно.			+		+			
12. Проводити лабораторні процедури з використанням сучасних контрольно-вимірювальних приладів.		+	+	+				

13. Виконувати обробку результатів досліджень з використанням спеціального програмного забезпечення.			+	+	+		
14. Обирати адекватні поставленій задачі методи комп'ютерного моделювання структури, параметрів і динаміки хімічних систем.							
15. Використовувати інформаційно-комунікаційні технології для вирішення загальних професійних задач.			+	+	+		
16. Представляти науковий та практичний матеріал в письмовій та усній формах.					+		+
17. Представляти результати досліджень англійською мовою							
18. Перекладати фахову літературу та розуміти наукові тексти хоча б однією іноземною мовою							+
19. Працювати самостійно або в групі, отримати результат у межах обмеженого часу з наголосом на професійну сумлінність та наукову доброчесність							+
20. Складати технічне завдання до проекту, розподіляти час, організувати свою роботу, складати звіт							+
21. Здійснювати моніторинг та аналіз наукових джерел інформації та фахової літератури.			+				
22. Використовувати набуті знання та компетенції з хімії для вирішення прикладних задач.			+				+
Комунікації							
1. Володіти навичками публічної мови та ведення дискусії з колегами та цільовою аудиторією.						+	
2. Працювати в міждисциплінарній команді, мати навички міжособистісної взаємодії з урахуванням етичних норм.						+	+
3. Використовувати сучасні інформаційно-комунікаційні технології для спілкування, обміну та інтерпретації даних.				+			+

7. Схема формування оцінки

7.1. Форми оцінювання студентів:

- семестрове оцінювання

- 1.1. активність під час лекції;
- 1.2. активність під час практичних занять;
- 1.3. активність під час лабораторних занять;
- 1.4. виконання домашньої самостійної роботи;
- 1.5. написання модульної контрольної роботи.

- підсумкове оцінювання

іспит.

7.2 Організація оцінювання (за формами контролю згідно з графіком навчального процесу):

	ЗМ1		ЗМ2	
	<i>Min. – 10 балів</i>	<i>Max. – 30 балів</i>	<i>Min. – 10 балів</i>	<i>Max. – 30 балів</i>
Усна відповідь	1	3	1	3
Виконання лабораторних робіт	5	15	5	15
Виконання домашньої самостійної роботи	3	8	3	8
Модульна контрольна робота 1	1	4		
Модульна контрольна робота 2			1	4

Для студентів, які набрали впродовж семестру сумарно меншу кількість балів ніж *критично-розрахунковий мінімум 36 балів* допускається написання реферату за темами домашньої самостійної роботи, за які отримана незадовільна оцінка, або перескладання МКР, за яку отримана незадовільна оцінка, з дозволу деканату (за наявності поважної причини, що не дозволила вчасно та якісно виконати домашню роботу або підготуватися до МКР).

У випадку відсутності студента з поважних причин відпрацювання та перездачі МКР здійснюються у відповідності до „Положення про порядок оцінювання знань студентів при кредитно-модульній системі організації навчального процесу” від 1 жовтня 2010 року

7.3 Шкала відповідності оцінок

Відмінно/Excellent	90-100
Добре/Good	75-89
Задовільно/Satisfactory	60-74
Незадовільно / Fail	0-59
Зараховано/ Passed	60-100
Не зараховано/ Fail	0-59

8. СТРУКТУРА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

ТЕМАТИЧНИЙ ПЛАН ЛЕКЦІЙ І ЛАБОРАТОРНИХ ЗАНЯТЬ

№ лекції	Назва лекцій	Кількість годин		
		лекції	Лабораторні роботи	Самостійна робота
ЗМІСТОВНИЙ МОДУЛЬ I				
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
ЗМІСТОВНИЙ МОДУЛЬ II				
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. Рекомендована література.

1. Русаков А.А. Рентгенография металлов - М: Атомиздат.- 1977.
2. Казіміров В.П., Русанов Е.Б. Рентгенографія 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: Металлургия, 1982.
5. Мильбурн Гю Рентгеновская кристаллография. – М.: Мир,1975.
6. Казіміров В.П., Сокольський В.Е., Роїк О.С., Самсоніков О.В. Структура неупорядкованих систем. – К.: ВПЦ “Київський університет”, 2009.
7. Казіміров В.П., Качур О.В. Рентгенографія полікристалів: Навч. посібник. К.: ВПЦ “Київський університет”, 1994.
8. Гинье А. Рентгенография кристаллов. – М: Физ-матгиз, 1961.
9. Теоретические основы газовой электронографии. – М.: Изд-во Московского университета, 1974.
10. Warren В.Е. X-ray Diffraction, 1969.
11. Авдюхина В.М., Батсурь Д., Губенко В.В. и др. Рентгенография. Спецпрактикум. – М: Изд-во МГУ, 1986.