

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ

Волинський національний університет імені Лесі Українки

Факультет хімії, екології та фармації

Кафедра хімії та технологій

СИЛАБУС

вибіркової навчальної дисципліни

КРИСТАЛОХІМІЯ ХАЛЬКОГЕНІДІВ

підготовки

доктора філософії (PhD)

(назва освітнього рівня)

спеціальності

102 – Хімія

(шифр і назва спеціальності)

освітньо-наукової програми

Синтез та дослідження

властивостей неорганічних

і органічних речовин

Луцьк – 2020

Силабус навчальної дисципліни «Кристалохімія халькогенідів» підготовки докторів філософії (PhD), галузі знань 10 «Природничі науки», спеціальності 102 «Хімія» за освітньо-науковою програмою «Синтез та дослідження властивостей неорганічних і органічних речовин»

Розробник: Гулай Л.Д., доктор хімічних наук, професор, завідувач кафедри екології та охорони наколишнього середовища

Силабус навчальної дисципліни затверджений на засіданні кафедри хімії та технологій

Протокол № 2 від 29 вересня 2020 р.

Завідувач кафедри,
доктор хімічних наук, професор



Олексеюк І.Д.



Найменування показників	Галузь знань, спеціальність, освітня програма, освітній рівень	Характеристика навчальної дисципліни
Денна/заочна форма навчання	Галузь знань: 10 Природничі науки ОНП «Синтез та дослідження властивостей неорганічних і органічних речовин» Доктор філософії (PhD)	Нормативна
Кількість годин / кредитів: 90/3		Рік навчання: 2-й
		Семестр: 4-й
		Лекції: 20/10 год.
		Семінарські: 16/8 год
		Лабораторні: -
ІНДЗ: немає		Індивідуальні: -
		Самостійна робота: 54/72 год.
	Консультації: -	
		Форма контролю: залік (3 сем)
Мова навчання українська		

II. Інформація про викладача

Прізвище, ім'я та по батькові	Гулай Любомир Дмитрович
Науковий ступінь	д.х.н.
Вчене звання	професор
Посада	завідувач кафедри екології та охорони навколишнього середовища
Контактна інформація (+38(067)3326625, Gulay.Lyubomyr@vnu.edu.ua)	
Дні занять http://194.44.187.20/cgi-bin/timetable.cgi?n=700	

III. Опис дисципліни

1. Анотація курсу.

Кристалохімія халькогенідів – це сукупність знань про сучасні аспекти розвитку хімії. Протягом останніх десятиліть завдяки якісним змінам у зборі і обробці інформації відбулося значне кількісне зростання структурних досліджень речовини методами рентгенівської дифрактометрії. Накопичення значної кількості експериментальних даних призводить до необхідності їх систематизації з точки зору їх кристалічної структури. Халькогеніди відносять до класу сполук, дослідження яких протягом останніх років набуло значного розвитку.

Пререквізити: фізика загальна, вища математика, неорганічна хімія, кристалохімія, хімія твердого тіла, фізико-хімічний аналіз.

3. Мета навчальної дисципліни: 1) загально-виховна і розвиваюча функції, що полягають у формуванні наукового-екологічного світогляду і моральних якостей здобувачів наукового ступеня доктора філософії, у розвитку сучасних форм теоретичного мислення, у здатності аналізувати явища; 2) практична функція, що пов'язана із засвоєнням провідних ідей, понять і законів хімії, з формуванням умінь і навичок для застосування хімічних законів і процесів, використання хімічних речовин і матеріалів у сучасній техніці.

Основними завданнями вивчення дисципліни є: ознайомлення із сучасними методами визначення складу та встановлення будови неорганічних сполук на основі рентгенівських методів полікристалу і монокристалу, вивчення зв'язку між складом та властивостями, можливостями отримання сполук із наперед заданими властивостями, формування власного наукового світогляду та морально-культурних цінностей; вивчення зв'язку інновацій у хімічній галузі з практичними сферами діяльності (пошуком альтернативних джерел енергії, нових матеріалів).

4. Результати навчання (компетентності). ІНТ. Здатність продукувати інноваційні наукові ідеї, оволодіти методологією наукової та педагогічної діяльності, вирішувати комплексні проблеми в процесі інноваційно-дослідницької та професійної діяльності,

проводити оригінальні наукові дослідження на міжнародному та національному рівні. **ЗК2.** Здатність до критичного аналізу, оцінки наявних знань, синтезу нових та складних ідей на основі логічних аргументів та перевірених фактів. **ЗК3.** Здатність застосовувати знання у практичних ситуаціях. Набуття гнучкості мислення, відкритого для застосування набутих хімічних знань для вирішення стратегічних та поточних завдань промислового розвитку, а також для застосування набутих знань у практичних ситуаціях. **ЗК4.** Здатність до проведення самостійних наукових досліджень. Набуття компетентностей ініціювання та виконання наукових досліджень, які дають можливість переосмислити наявні та отримати нові знання. **ЗК5.** Творчість. Здатність до генерування нових ідей, абстрактне мислення, досягнення наукових цілей, знаходити найкращі рішення в нових умовах та ситуаціях. **ЗК8.** Етичні установки. Дотримання етичних принципів в наукових дослідженнях, чесності та порядності в професійній діяльності та повсякденному житті. **ЗК9.** Здатність до пошуку, оброблення на аналізі інформації з різних джерел. **СК1.** Глибинні знання зі спеціальності. Знання і розуміння поглибленого рівня в галузі хімії і споріднених областях, включаючи методи проведення експериментів, рівень цих знань повинен бути достатнім для проведення наукових досліджень на рівні останніх світових досягнень і направленим на їх розширення і поглиблення. **СК2.** Дослідницькі здатності. Здатність формулювати на сучасному рівні наукову проблему, робочі гіпотези досліджуваної проблеми, виконувати оригінальні дослідження в галузі хімії, досягати наукових результатів, які створюють нові цілісні знання, розв'язувати проблеми та задачі шляхом розуміння їх фундаментальних основ та використання як теоретичних, так і експериментальних методів, засвоєних з освітньо-наукової програми. **СК3.** Технологічні здатності. Вміння вибирати та використовувати наукове обладнання, новітні інформаційні і комунікаційні технології та процедури, які відносяться до хімічних та фізико-хімічних методів досліджень. **СК4.** Здатність до критичного аналізу та оцінювання даних. Вміння аналізувати дані проведених експериментів, в тому числі із застосуванням обчислювальної техніки, інтерпретувати результати експериментів та брати участь у дискусіях стосовно наукового та практичного значення отриманих результатів. **СК7.** Здатність до саморозвитку та самовдосконалення. Здатність шляхом самостійного навчання освоїти нові галузі науки, використовуючи здобуті фахові знання, уміння та навички.

Програмні результати навчання: Започатковувати, планувати, реалізовувати та коригувати послідовний процес ґрунтовного наукового дослідження з дотриманням належної академічної доброчесності. **ПРУН 3.** Застосовувати знання про закономірності взаємозв'язку структури сполук і речовин з фізичними і хімічними властивостями під час розв'язання теоретичних та прикладних завдань. **ПРУН 4.** Застосовувати знання хімічної термодинаміки до реальних процесів, прогнозувати термодинамічні властивості та реакційну здатність речовин. **ПРУН 5.** Здатність до використання академічної української та іноземної мови у професійній діяльності та дослідженнях, презентувати результати наукових досліджень в усній та письмовій формі, організовувати та проводити навчальні заняття. **ПРЗН 3.** Отримати знання теоретичних та прикладних проблем прикладної хімії та методів неорганічного і органічного синтезу. **ПРЗН 4.** Отримати глибинні знання сучасних методів визначення складу та встановлення будови хімічних сполук, контролю проходження хімічних процесів. **ПРКОМ 1.** Уміння застосовувати сучасні інформаційно-комунікаційні інструменти і технології для забезпечення ефективних наукових та професійних комунікацій. **ПРАіВ 1.** Здатність самостійно проводити наукові дослідження та приймати рішення. **ПРАіВ 2.** Здатність формулювати власні авторські висновки, пропозиції та рекомендації. **ПРАіВ 3.** Здатність усвідомлювати та нести особисту відповідальність за одержані результати дослідження. **ПРАіВ 4.** Здатність до безперервного саморозвитку та самовдосконалення.

5. Структура навчальної дисципліни.

Назви змістових модулів і тем	Усього	Лек.	Сем.	Сам. роб.	*Форма контролю/ Бали
Змістовий модуль 1. Теоретичні основи кристалохімії халькогенідів.					
Тема 1. Теоретичні основи кристалохімії. .	11/11	2/1	2/1	7/9	ДС*/РМГ* /5
Тема 2. Сучасні методи дослідження структури сполук.	11/11	2/1	2/1	7/9	ДС*/РМГ* /5
Разом за змістовим модулем 1	22/22	4/2	4/2	14/18	10
Змістовий модуль 2. Оновні класи халькогенідів.					
Тема 3. Класифікація халькогенідів.	9/11	2/1	2/1	5/9	ДС*/РМГ* /5
Тема 4. Кристалохімія бінарних халькогенідів.	13/12	4/2	2/1	7/9	ДС*/РМГ* /5
Тема 5. Нормальновалентні сполуки.	11/11	2/1	2/1	7/9	ДС*/РМГ* /5
Тема 6. Халькогеніди РЗМ.	13/12	4/2	2/1	7/9	ДС*/РМГ* /5
Разом за змістовим модулем 2	46/46	12/6	8/4	26/36	20
Змістовий модуль 3. Новітні аспекти кристалохімії.					
Тема 7. Структура ідеальна і реальна.	11/11	2/1	2/1	7/9	ДС*/РМГ* /5
Тема 8. Модульовані структури.	11/11	2/1	2/1	7/9	ДБ*/РМГ*/ 5
Разом за змістовим модулем 3	22/22	4/2	4/2	14/18	10
Разом за семестр	90/90	20/10	16/8	54/72	40
Модульна контрольна робота 1					20
Модульна контрольна робота 2					20
Модульна контрольна робота 3					20
Разом					100

Форма контролю*: ДС – дискусія, ДБ – дебати, Т – тести, ТР – тренінг, РЗ/К – розв’язування задач/кейсів, ІНДЗ/ІРС – індивідуальне завдання/індивідуальна робота студента, РМГ – робота в малих групах, МКР/КР – модульна контрольна робота/ контрольна робота, Р – реферат, а також аналітична записка, аналітичне есе, аналіз твору тощо.

Теми для самостійної роботи

№ з/п	Тема	Кількість годин
1	Елементи симетрії. Сингонії, Просторові групи. Правила Полінга	7/9
2	Метод полікристалу. Метод монокристалу. Методи обробки експериментальних даних та визначення кристалічної структури.	7/9
3	Основні принципи класифікації халькогенідів.	7/9
4	Класифікація бінарних халькогенідів.	7/9
5	Нормальновалентні халькогеніди.	7/9
6	Класифікація халькогенідів РЗМ. Принцип найщільнішої упаковки атомів. Координація атомів РЗМ.	7/9
7	Ідеальна структура у тривимірному просторі. Дефекти ідеальної структури.	7/9
8	Модульовані структури. Співмірно- і неспівмірно модульовані структури. Надструктура.	7/9
	Разом	54/72

IV. Політика оцінювання

Пропущені практичні заняття (з будь яких причин) відпрацьовуються у позаурочний час.

У разі поганого написання модульної контрольної роботи здобувач може перездати її в усній формі викладачу.

Кінцевим терміном здачі усіх видів робіт, так званим deadline, є тиждень, на якому відбувається останнє заняття з дисципліни.

На рочатку вивчення курсу здобувачі ознайомлюються з основними засадами академічної доброчесності, а саме, із обов'язковими посиланнями на першоджерела при їх цитуванні при підготовці до дискусій, дебатів, РМГ, при написанні рефератів. Також ознайомлюються із різновидами академічного плагіату, а саме, привласнення авторства, представлення поєднання власних та запозичених аргументів без належного цитування; приховане некоректне запозичення, парафраза та компіляція. У випадку виявлення порушень, пошукувач не отримує балів за виконану роботу, модульну контрольну.

V. Підсумковий контроль

На залік виносяться основні питання, що розглядалися під час вивчення курсу. Форма проведення заліку – усна. При одержанні 75 і вище рейтингових балів пошукувач може претендувати на автоматичне зарахування оцінки, як підсумкової. У випадку незадовільної підсумкової оцінки або за бажанням підвищити рейтинг студент може добрати бали, виконавши певний вид робіт (реферат, презентація).

Перелік питань, що виносяться на залік:

1. Елементи симетрії.
2. Сингонії.
3. Просторові групи.
4. Координатний многогранник.
5. Правила Полінга.
6. Метод полікристалу.
7. Метод монокристалу.
8. Методи отримання і обробки експериментальних даних.
9. Методи визначення кристалічної структури.
10. Прямі методи у структурних дослідженнях.
11. Алгоритм визначення кристалічної структури.
12. Основні принципи класифікації халькогенідів.
13. Класифікація бінарних халькогенідів.
14. Нормальновалентні халькогеніди.
15. Класифікація халькогенідів РЗМ.
16. Принцип найщільнішої упаковки атомів у структурі халькогенідів РЗМ.
17. Координація атомів РЗМ.
18. Ідеальна структура у тривимірному просторі.
19. Дефекти ідеальної структури.
20. Модульовані структури.
21. Співмірно- і неспівмірно модульовані структури.
22. Надструктура.

VI. Шкала оцінювання

Оцінка в балах за всі види навчальної діяльності	Оцінка
90 – 100	Відмінно
82 – 89	Дуже добре
75 - 81	Добре
67 -74	Задовільно
60 - 66	Достатньо
1 – 59	Незадовільно

VI. Рекомендована література та інтернет-ресурси

1. Шевченко Л.Л. Кристалохімія / Л.Л. Шевченко. – К.: Вища шк., 1993. – 174 с.
2. Бокий Г.Б. Кристаллохимия / Г.Б. Бокий. – М.: Наука, 1971. – 400 с.
3. Шаскольская М.П. Кристаллография / М.П. Шаскольская. – М.: Высш. шк., 1976. – 391 с.
4. Парте Е. Елементи неорганічної структурної хімії / Е. Парте. – Львів: Світ, 1993. – 104 с.
5. Пирсон У. Кристаллохимия и физика металлов и сплавов. Ч. I, Ч. II. / У. Пирсон. – М.: Мир, 1971. – 471 с.
6. <https://icsd.ill.fr/>.

Додаткова література

1. <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/zaac.200800253/>.
2. <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0022459608003319/>.
3. <https://scripts.iucr.org/cgi-bin/paper?BP5017/>.
4. <https://scripts.iucr.org/cgi-bin/paper?bs5058/>.
5. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/B9780444535900000030/>.
6. <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0022459611006748/>.
7. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/B9780444634832000028/>.