

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
Волинський національний університет імені Лесі Українки
Факультет хімії, екології та фармації
Кафедра хімії та технологій

СИЛАБУС

нормативної навчальної дисципліни

КРИСТАЛОГРАФІЯ І РЕНТГЕНОГРАФІЯ

підготовки магістра
галузей знань 10 Природничі науки,
спеціальності 102 Хімія
освітньо-професійної програми Хімія
форма навчання денна

Луцьк – 2021

Силабус навчальної дисципліни «Кристалографія і рентгенографія» підготовки магістра галузі знань 10 Природничі науки, спеціальності 102 Хімія, освітньо-професійної програми Хімія, форма навчання денна за навчальним планом, затвердженим 2020 року

Розробник: Іващенко І. А., кандидат хімічних наук, доцент кафедри хімії та технологій

Силабус навчальної дисципліни затверджений на засіданні кафедри хімії та технологій

протокол № 1 від 01.09. 2021 р.

Завідувач кафедри,
доктор хімічних наук, професор



Олексеюк І.Д.

© Іващенко І.А., 2021 р.

1. ОПИС НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Найменування показників	Галузі знань, спеціальності, освітня програма, освітній ступінь	Характеристика навчальної дисципліни
Денна форма навчання	10 Природничі науки, 102 «Хімія», магістр	Нормативна
Кількість годин/кредитів 180/6		Рік навчання 1
		Семестри 1-ий
ІНДЗ: немає		Лекції 24 год.
		Лабораторні 30 год.
		Практичні ---
		Самостійна робота 114 год.
Консультації 12 год.		
Форма контролю: іспит		

2. ІНФОРМАЦІЯ ПРО ВИКЛАДАЧА

Прізвище, ім'я та по батькові Іващенко Інна Алімічна

Науковий ступінь к.х.н.

Вчене звання доцент

Посада доцент кафедри хімії та технологій

Контактна інформація

+38(095)3101966, ivashchenko.inna@vnu.edu.ua

Дні занять <http://194.44.187.20/cgi-bin/timetable.cgi?n=700>

3. ОПИС ДИСЦИПЛІНИ

Курс кристалографії та рентгенографії необхідний фахівцю–хіміку, інженеру та науковцю. Метою викладання навчальної дисципліни є ознайомлення з одним із найскладніших і найважливіших методів встановлення структури речовини. Взаємне розташування структурних одиниць у речовині зумовлює її властивості. Основними завданнями є ознайомлення студентів з теоретичними основами кристалічної будови речовини, базуючись на знаннях з курсу «Кристалохімії», методами і прийомами рентгеноструктурного аналізу; ознайомлення з методикою роботи у рентгенівській лабораторії та розшифровкою рентгенограм одержаних різними методами з використанням спеціальних комп'ютерних програм. Знання з предмету необхідні для глибшого вивчення хімії напівпровідників, технології одержання неорганічних матеріалів, фізико-

хімічного аналізу багатокomпонентних систем, тощо. Під час засвоєння даної дисципліни у студентів розвивається діалектичне мислення, здатність аналізувати явища та процеси, формується світогляд, розширюються й поглиблюються наукові уявлення про матерію, хімічний зв'язок, вплив будови речовини та її властивості. Курс передбачає вивчення симетрії зовнішніх форм та внутрішньої будови речовин, основних відомостей про кристалічну будову простих і складних речовин. Сприяє поглибленню теоретичних знань з хімії шляхом більш детального вивчення закономірностей будови кристалічних тіл, постійно підкреслюється конкретний зв'язок з питаннями, які можуть виникнути у практичній діяльності хіміка.

Пререквізити: програма навчальної дисципліни «Кристалографія і рентгенографія» базується на знаннях з кристалохімії, неорганічної хімії, фізичної хімії, математики і викладається у першому семестрі I-го року навчання.

Метою викладання навчальної дисципліни «Кристалографія і рентгенографія» є спеціальна базова підготовка студентів в області дослідження будови неорганічних речовин, аналізу зв'язку між складом, будовою та властивостями. Дана програма складена відповідно сучасному рівню розвитку хімічної науки і вимог до підготовки магістра, галузей знань – 10 «Природничі науки», спеціальності – 102 «Хімія», за освітніми програмами «Хімія».

Основними **завданнями** вивчення навчальної дисципліни «Кристалографія і рентгенографія» є засвоєння студентами закономірностей ближнього і дальнього порядків елементів у твердому стані залежно від їх властивостей, чітке уявлення про елементи симетрії, розподіл кристалів по сингоніям, кристалічний стан речовини; симетрію кристалічних многогранників і кристалів, вузлові (атомні) площини, їх індексування, типи комірок Браве, базис елементарної комірки, знання основних законів кристалографії, категорій цієї дисципліни та вміння застосовувати на практиці ці знання при встановленні формул симетрії кристалічних многогранників, розгляді моделей кристалічних структур речовин, розуміти природу рентгенівського випромінювання, правила техніки безпеки при роботі у рентгенівській лабораторії, взаємодію рентгенівських променів з речовиною, дифракцію рентгенівських променів на кристалах, основні методи рентгеноструктурного аналізу, особливості цих методів і їх застосування, вплив різних факторів на інтенсивність інтерференційних відбиттів на рентгенограмах.

Програмними результатами навчання є:

ПРН1. Знати та розуміти наукові концепції та сучасні теорії хімії, а також фундаментальні основи суміжних наук. ПРН 2. 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. ПРН 3.

Застосовувати отримані знання і розуміння для вирішення нових якісних та кількісних задач хімії. ПРН 5. Володіти методами комп'ютерного моделювання структури, параметрів і динаміки хімічних систем. ПРН 9. Збирати, оцінювати та аналізувати дані, необхідні для розв'язання складних задач хімії, використовуючи відповідні методи та інструменти роботи з даними. ПРН 10. Планувати, організувати та здійснювати експериментальні дослідження з хімії з використанням сучасного обладнання, грамотно обробляти їх результати та робити обґрунтовані висновки. ПРН 11. Складати технічне завдання до проекту, розподіляти час, організувати свою роботу у роботі колективу, складати звіт. ПРН 13. Аналізувати наукові проблеми та пропонувати їх вирішення на абстрактному рівні шляхом декомпозиції їх на складові, які можна дослідити окремо. ПРН 14. Інтерпретувати експериментально отримані дані та співвідносити їх з відповідними теоріями в хімії.

4. КОМПЕТЕНЦІЇ

ЗК 1. Знання та розуміння предметної області та розуміння професійної діяльності ЗК 3.Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу. ЗК 4.Здатність застосовувати знання у практичних ситуаціях. ЗК 6.Здатність генерувати нові ідеї (креативність). ЗК 7.Здатність використовувати інформаційні та комунікаційні технології ЗК 12.Здатність працювати автономно. ЗК 14.Здатність до пошуку, критичного аналізу та обробки інформації з різних джерел. ФК 1.Здатність використовувати закони, теорії та концепції хімії у поєднанні із відповідними математичними інструментами для опису природних явищ. ФК 2.Здатність будувати адекватні моделі хімічних явищ, досліджувати їх для отримання нових висновків та поглиблення розуміння природи, в тому числі звикористанням методів молекулярного, математичного і комп'ютерного моделювання. ФК 5.Здатність застосовувати методи комп'ютерного моделювання для вирішення наукових, хіміко-технологічних проблем та проблем хімічного матеріалознавства. ФК 6.Здатність здобувати нові знання в галузі хімії та інтегрувати їх із уже наявними.

5. ІНФОРМАЦІЙНИЙ ОБСЯГ НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

Назва змістових модулів і тем	Усього	Лекції	Лаб. заняття	Практичні	Сам. роб.	Конс	Форма контролю/ Бали
Змістовий модуль 1. Кристалічні многогранники							
Тема 1. Теорія симетрії кристалічних многогранників	17	2	2		1	12	<i>УО*/РЗ*/4</i>
Тема 2. Види симетрії кристалічних многогранників	17	2	2		1	12	<i>УО/РЗ/4</i>
Тема 3. Поняття про кристалічну ґратку. Квазікристали	19	2	4		1	12	<i>УО/РЗ/4</i>

Тема 4. Основні закони кристалохімії. Фактори, що визначають структуру кристалів	18	2	3		1	12	<i>УО/РЗ/4</i>
Тема 5. Основні структурні типи	19	2	3		2	12	<i>УО/РЗ/4</i>
Разом за змістовим модулем 1	90	10	14		6	60	20
Змістовий модуль 2. Кристалічні структури							
Тема 6. Дифракція рентгенівських променів.	19	4	4		1	10	<i>УО/РЗ/5</i>
Тема 7. Інтенсивність інтерференційних максимумів на рентгенограмах.	19	4	4		1	10	<i>УО/РЗ/5</i>
Тема 8. Методи рентгеноструктурного аналізу.	26	4	3		2	17	<i>УО/РЗ/5</i>
Тема 9. Рентгенофазовий аналіз	26	2	5		2	17	<i>УО/РЗ/5</i>
Разом за змістовим модулем 2	90	14	16		6	54	20
Разом за семестр	180	24	30		12	114	40
<i>Модульна контрольна робота 1</i>							30
<i>Модульна контрольна робота 2</i>							30

УО/РЗ** - усне опитування, розв'язування задач

6. ТЕМИ ЛАБОРАТОРНИХ ЗАНЯТЬ

№ з/п	Тема	К-ть год.
1	Закони додавання елементів симетрії кристалічних многогранників	2
2	Побудова кристалографічних проєкцій	2
3	Ґратки Браве. Вивчення моделей кристалічних ґраток	2
4	Основні структурні типи. Розв'язування типових задач	4
5	Найщільніші упаковки. Розв'язування типових задач	4
6	Індексування дифрактограм полікристалічних зразків кубічної сингонії. Визначення типу комірки Браве, періодів елементарної комірки сполук та індексування їх дифрактограм.	4
7	Обробка експериментальної дифрактограми сполуки	4
8	Обробка експериментальних дифрактограм зразків перерізу $\text{CuInSe}_2\text{-CuGaSe}_2$ з допомогою програми PowderCell	4
9	Побудова моделі кристалічної структури сполуки з допомогою програми <i>Diamond</i>	4
Разом за семестр		30

7. Теми практичних занять---

8. Самостійна робота

Питання на самостійне опрацювання	К-ть год.
Обробка експериментальної дифрактограми сполуки	10
Обробка експериментальних дифрактограм зразків в програмі PowderCell	20
Побудова моделі кристалічної структури сполуки з допомогою програми <i>Diamond</i>	20
Сучасні методи дослідження структури сполук.	10
Кристалохімія бінарних халькогенідів	10
Нормальновалентні сполуки.	10
Ідеальна структура у тривимірному просторі. Дефекти ідеальної структури	8
Основні структурні типи	10
Квазікристали	8
Модульовані структури. Співмірно- і неспівмірномодульовані структури. Надструктура	8
Разом	114

9. Політика оцінювання

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

У разі поганого написання модульної контрольної роботи студент може прездати її в усній формі викладачу, що проводить лабораторні заняття, або лектору.

Кінцевим терміном здачі усіх видів робіт, а також відпрацювання та захисту лабораторних робіт, так званим *deadline*, є тиждень, на якому відбувається останнє заняття з дисципліни. На початку вивчення курсу студенти ознайомлюються з основними засадами академічної доброчесності. У випадку виявлення порушень, студент не отримує балів за виконану роботу, модульну контрольну.

Максимальна оцінка за семестр складає 100 балів: 40 балів на поточний контроль, 60 балів на модульний. Оцінка за лабораторну роботу складається з оцінки за відповіді на теоретичні питання і розв'язування задач з поточної теми. До остаточної оцінки також входить оформлення лабораторної роботи. В модульному контролі (60 балів) оцінюється виконання задач та відповіді на питання по перевірці теоретичних знань.

10. РОЗПОДІЛ БАЛІВ ТА КРИТЕРІЇ ОЦІНЮВАННЯ

Поточний контроль	Модульний	Загал
-------------------	-----------	-------

(макс=40 балів)		контроль (макс=60 балів)		ьна кільк ість балів
Модуль 1		Модуль 2		
ЗМ 1	ЗМ 2	МКР 1	МКР 2	
20	20	30	30	100

За результатами контролю знань студентів, виставляється підсумкова оцінка «відмінно», «добре» та «задовільно» (зараховано). Студент має право підвищити оцінку, складаючи залік. Оцінка «незадовільно» (незараховано) виставляються студентам, яким не зараховано хоча б один модуль з дисципліни після завершення її вивчення. У випадку одержання студентом незадовільної оцінки, він має право на повторне складання підсумкового модульного контролю (заліку) не більше 3-х разів, згідно затвердженого графіка.

Шкала оцінювання

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

11. РЕКОМЕНДОВАНА ЛІТЕРАТУРА

Основна література:

1. Бірюкович, К. О. Кристалографія, кристалохімія та мінералогія: підручник для студ. спеціальності 132 «Матеріалознавство» / Л. О. Бірюкович; КПІ ім. Ігоря Сікорського. –Київ: КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2018. – 234 с.
2. Основи кристалографії: навчальний посібник/ Укл.: І.М. Фодчук, О.О. Ткач. – Чернівці: ЧНУ, 2007 - 108 с.
3. Шевченко Л.Л. Кристалохімія / Л.Л. Шевченко. – К.: Вища шк., 1993. – 174с.
4. Зиман З.З. Основи структурної кристалографії: Навчальний посібник для студентів вищих навчальних закладів / З.З. Зиман. – Х.: ХНУ імені В. Н. Каразіна, 2008. – 212с.
5. Сколодра О.Є. Кристалографія, кристалохімія і мінералогія. –Луцьк: ЛДТУ, 1999. – 76с.

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>
8. <https://www.edx.org/course/introduction-to-solid-state-chemistry>

12. ПЕРЕЛІК ПИТАНЬ НА ІСПИТ

Поняття симетрії, симетричного перетворення.
Скінченні та нескінченні симетричні перетворення.
Елементи симетрії: вісь симетрії, площина симетрії, центр симетрії.
Теореми додавання елементів симетрії.
Що називають видом симетрії чи точковою групою симетрії.
Класифікація видів симетрії: а) за наявними елементами; б) за типом головної осі.
Що називають сингонією, категорією?
За якими ознаками поділяють види симетрії на сингонії та категорії? Вказати параметри елементарних паралелепіпедів кристалів усіх сингоній.
Установка кристалів. Вибір координатних осей та одиничної грані для кристалів нижчої категорії.
Установка кристалів. Вибір координатних осей та одиничної грані для кристалів середньої категорії.
Установка кристалів. Вибір координатних осей та одиничної грані для кристалів вищої категорії.
Кристаліграфічні проєкції. Принцип побудови стереографічної проєкції та гномостереографічної проєкції.
Побудувати стереографічну проєкцію елементів симетрії та граней ромбоедра, куба.
Форми кристалічних многогранників. Поняття простої форми та їх комбінацій.
Підрозділ простих форм на загальні та окремі, відкриті та закриті. Розподіл простих форм кристалічних многогранників по сингоніях.
Просторова ґратка та кристалічна структура.
Вузловий ряд, вузлова площина, елементарна комірка. Трансляція.
Правила вибору елементарної комірки Браве.
14 типів комірок Браве. Число формульних одиниць в елементарній комірці.
Поняття про базис елементарної комірки. Запис базису для P-, I-, C- та F-комірок Браве.
Просторові групи симетрії.
Правила запису міжнародних символів пр. гр. для різних сингоній.
Елементи симетричності.
Площини ковзного відбиття.
Гвинтові осі симетрії.
Фактори, що визначають стійкість структури. Правила Гольдшмідта, Полінга, Юм-Розері.
Межі стійкості структур з різними координаційними числами.
Теорія найщільніших упаковок куль однакового розміру.
Дво- і тришарові структури. Типи пустот. Коефіцієнт зайнятості простору.
Ізоморфізм. Досконалий та недосконалий ізоморфізм. Емпіричні правила ізоморфізму.
Поліморфізм. Поліморфні перетворення. Види поліморфізму.
Морфотрорія та структурна гомологія.
Будова рентгенівських трубок.
Біле випромінювання.
Характеристичне випромінювання.
Методи монохроматизації рентгенівського випромінювання.
Фотографічні та дифрактометричні методи реєстрації дифракційної картини.
Основні схеми роботи дифрактометрів (на відбиття, на проходження).
Закон Мозлі, вибір випромінювання рентгенівської трубки.
Рентгеноструктурний аналіз; його завдання, методи.
Рентгенофазовий аналіз; його завдання, методи.
Електронографічний та нейтронографічний методи, їх відмінність від рентгенівського методу дослідження речовини.

Умови Лауе.
Класифікація рентгенівських методів аналізу.
Метод Лауе; завдання методу.
Рівняння Вульфа-Брегга, порядок відбиття.
Міжплощинні віддалі у кубічних комірках.
Квадратичні формули, міжплощинні віддалі для різних сингоній.
Метод порошку (полікристалу). Завдання, що вирішує цей метод.
Індексування сполуки рентгенівськими методами.
Індекси Міллера, інтерференційні індекси, їх взаємозв'язок.
Індексування дифрактограм кристалів кубічної сингонії (примітивна комірка).
Індексування дифрактограм кристалів кубічної сингонії (об'ємноцентрована комірка).
Індексування дифрактограм кристалів кубічної сингонії (гранецентрована комірка).
Індексування дифрактограм кристалів кубічної сингонії (алмазоподібна комірка).
Визначення числа формульних одиниць та числа атомів у елементарній комірці кристалу.
Залежність кількості рефлексів на дифрактограмі та їх положення від різних факторів (λ , кристалічної структури, параметру комірки, типу атомів).
Елементи симетрії: осі симетрії.
Елементи симетрії: площини симетрії, центр симетрії (інверсії).
32 види симетрії (точкові групи симетрії) кристалічних многогранників.
Елементи симетрії нескінчених фігур: гвинтові осі.
Елементи симетрії нескінчених фігур: площини ковзного відбиття.
Вузлові площини, символи площин.
Індекси Міллера, їх зміст.
Способи визначення індексів Міллера. Їх зв'язок із рентгенографічними дослідженнями кристалів.
Вибір елементарної комірки кристалічної речовини, правила вибору.
14 типів ґраток Браве, їх характеристики.
Симетрія комірок Браве. Базис елементарних комірок Браве.
32 точкові групи симетрії, 230 просторових груп симетрії.
Типи правильних систем точок, їх вибір, симетрія.
Символи просторових груп симетрії, їх зміст.
Правила запису символів просторових груп симетрії.
Категорії, сингонії.
Найщільніші упаковки: гексагональна, кубічна.
Визначення об'єму елементарної комірки в кристалах різних сингоній.
Вплив просторового розміщення електронів у атомі на інтенсивність інтерференційних відбиттів.
Інтегральна інтенсивність відбиттів. Фактор Лоренца.
Множник повторюваності та його вплив на інтенсивність інтерференційних відбиттів.
Вплив теплових коливань атомів на розсіяння рентгенівських променів кристалом.
Поняття структурної амплітуди та структурного множника інтенсивності.
Залежність кількості рефлексів на дифрактограмі та їх положення від різних факторів (λ , кристалічної структури, параметру комірки, типу атомів).
Види твердих розчинів.
Практичне значення твердих розчинів.
Необмежені ряди твердих розчинів (НРТР). Які основні умови існування НРТР?
Умови утворення граничних твердих розчинів. Способи зображення областей існування твердих розчинів на Т-х діаграмі стану.
Закономірності у зміні властивостей у твердих розчинах.
Правило Вегарда. Правило Ретгерса.
Способи визначення меж твердих розчинів.