

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
ЛЬВІВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ імені ІВАНА ФРАНКА
Кафедра неорганічної хімії

“ЗАТВЕРДЖУЮ”

Завідувач кафедри
академік НАН України, професор



Роман ГЛАДИШЕВСЬКИЙ

29 серпня 2022 року

РОБОЧА ПРОГРАМА НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ

ПРИКЛАДНА КРИСТАЛОХІМІЯ

освітній рівень	магістр
галузь знань:	10 Природничі науки
спеціальність:	102 Хімія
освітня програма	Хімія, освітньо-наукова програма
факультет:	хімічний

Робоча програма навчальної дисципліни **“Прикладна кристалохімія”** для студентів спеціальності 102 Хімія.

Розробники програми:

академік НАН України, доктор хімічних наук, професор кафедри неорганічної хімії
Гладишевський Р.Є.,
кандидат хімічних наук, доцент кафедри неорганічної хімії Пукас С.Я.

Робочу програму схвалено на засіданні кафедри неорганічної хімії.

Протокол № 1/8 від 29 серпня 2022 року.

1. Опис навчальної дисципліни

Найменування показників	Галузь знань, освітній рівень	Характеристика навчальної дисципліни	
Кількість кредитів – 4	Галузь знань: <i>10 Природничі науки</i>	денна форма здобуття освіти	заочна форма здобуття освіти
		<i>Нормативна</i>	
Модулів – 1	Освітній рівень: <i>магістр</i>	Рік підготовки	
Змістових модулів – 3		<i>перший</i>	<i>перший</i>
Індивідуальне науково-дослідне завдання		Семестр	
		<i>перший</i>	<i>перший</i>
Загальна кількість годин – 120	Спеціальність: <i>102 Хімія</i>	Лекції	
Тижневих годин для денної форми здобуття освіти: аудиторних – 3 самостійної роботи студента – 4,5		16 год	8 год
		Лабораторні роботи	
		32 год	12 год
		Самостійна робота	
		72 год	100 год
		Вид контролю	
		<i>екзамен</i>	<i>екзамен та контрольна робота</i>

Співвідношення кількості годин аудиторних занять до самостійної та індивідуальної роботи становить:

для денної форми здобуття освіти – 67 %,
для заочної форми здобуття освіти – 20 %.

2. Мета та завдання навчальної дисципліни

Метою і завданням навчальної дисципліни “Прикладна кристалохімія” в системі підготовки магістрів хімічного факультету є набуття майбутніми спеціалістами практичних навиків у галузі сучасної кристалохімії – науки, яка відіграє особливу роль у процесі розробки функціональних матеріалів. Курс “Прикладна кристалохімія” продовжує загальний курс “Кристалохімія” та в його змісті акцент зроблено на напрями використання твердих неорганічних сполук як матеріалів нової техніки та технології.

Курс “Прикладна кристалохімія” складається з трьох основних частин. В результаті вивчення курсу студент буде **знати**:

- головні факти, концепції, принципи і теорії, що стосуються предметної області, опанованої у ході магістерської програми;
- уявлення про реальну структуру твердих тіл, причини утворення дефектів, співвідношення група-підгрупа між просторовими групами;
- сучасні тенденції в розвитку структурного аналізу, рентгенівських методів дифракції на моно- і полікристалах, методів скануючої електронної спектроскопії та енергодисперсійної рентгенівської спектроскопії, нейтроно- та електронографії;
- взаємозв'язок між хімічним складом, кристалічною структурою та фізичними властивостями сполук, як основа розробки функціональних матеріалів.

В результаті проведення лабораторних занять студент буде **вміти** визначати структурні та мікроструктурні характеристики сполук із застосуванням сучасних кристалографічних комп'ютерних програм, встановлювати співвідношення між просторовими групами, виводити магнітні групи симетрії, будувати гіпотетичні структури. При виконанні робіт буде розглядатися вплив кристалічної структури на властивості сполук.

В результаті успішного проходження курсу студент набуде **загальні компетентності**:

- 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 14.** Здатність до пошуку, критичного аналізу та обробки інформації з різних джерел.

та спеціальні **фахові компетентності**:

- СК 2.** Здатність будувати адекватні моделі хімічних явищ, досліджувати їх для отримання нових висновків та поглиблення розуміння природи, в тому числі з використанням методів молекулярного, математичного і комп'ютерного моделювання.
- СК 3.** Здатність організовувати, планувати та реалізовувати хімічний експеримент.
- СК 4.** Здатність інтерпретувати, об'єктивно оцінювати і презентувати результати свого дослідження.
- СК 5.** Здатність застосовувати методи комп'ютерного моделювання для вирішення наукових, хіміко-технологічних проблем та проблем хімічного матеріалознавства.
- СК 6.** Здатність здобувати нові знання в галузі хімії та інтегрувати їх із уже наявними.
- СК 7.** Здатність дотримуватися етичних стандартів досліджень і професійної діяльності в галузі хімії (академічна доброчесність, ризику для людей і довкілля тощо).

Програмні результати навчання (ПРН):

- ПРН 1.** Знати і розуміти наукові концепції та сучасні теорії хімії, а також фундаментальні основи суміжних наук.

ПРН 2. Глибоко розуміти основні факти, концепції, принципи і 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 8. Вміти ясно і однозначно донести результати власного дослідження до фахової аудиторії та/або нефакхівців.

ПРН 9. Збирати, оцінювати та аналізувати дані, необхідні для розв'язання складних задач хімії, використовуючи необхідні методи та інструменти роботи з даними.

ПРН 10. Планувати, організовувати та здійснювати експериментальні дослідження з хімії з використанням сучасного обладнання, грамотно обробляти їх результати та робити обґрунтовані висновки.

3. Програма навчальної дисципліни

МОДУЛЬ 1

Змістовий модуль 1. Теми: основні поняття кристалохімії, уявлення про реальну структуру твердих тіл, проблеми утворення дефектів, співвідношення група-підгрупа між просторовими групами (6 лекційних та 12 лабораторних годин). Види контролю: контрольна робота – 1, лабораторні роботи – 3, домашнє завдання – 1. Максимальна сума балів – 17.

Тема 1. Кристалічний стан. Операції симетрії. Сингонії. Тратки Браве. Просторові групи. Міжатомні віддалі та кути. Радіуси атомів. Поняття про ідеальну та реальну структури.

Тема 2. Дефекти в кристалах. Точкові дефекти. Кластери дефектів. Антиструктурні дефекти. Лінійні та планарні дефекти. Тверді розчини. Надструктури. Фазові переходи.

Тема 3. Співвідношення група-підгрупа між просторовими групами. Генеалогічне дерево Бернігхаузена. Неспіввимірні модульовані та композитні структури.

Змістовий модуль 2. Теми: сучасні тенденції в розвитку структурного аналізу, рентгенівських методів дифракції на моно- і полікристалах, методів скануючої електронної спектроскопії та енергодисперсійної рентгенівської спектроскопії, нейтроно- та електроннографії (4 лекційних та 8 лабораторних годин). Види контролю: тест – 1, лабораторні роботи – 2, домашнє завдання – 1. Максимальна сума балів – 14.

Тема 4. Сучасні методи рентгенівської дифракції на моно- і полікристалах. Синхротронна дифракція. Можливості нейтронографії та електроннографії.

Тема 5. Дослідження методами скануючої електронної спектроскопії та енергодисперсійної рентгенівської спектроскопії.

Змістовий модуль 3. Теми: взаємозв'язок між хімічним складом, кристалічною структурою та фізичними властивостями сполук, як основа розробки функціональних матеріалів (6 лекційних та 12 лабораторних годин). Види контролю: контрольна робота – 2, лабораторні роботи – 3. Максимальна сума балів – 19.

Тема 6. Взаємозв'язок хімічний склад – кристалічна структура – фізичні властивості. Принцип Неймана. Групи Шубнікова.

Тема 7. Напівпровідники. Концентрація валентних електронів.

Тема 8. Класичні надпровідники. Високотемпературні надпровідники. Гомологічні структури.

4. Структура навчальної дисципліни

Назви змістових модулів і тем	Кількість годин					
	Денна/заочна форма здобуття освіти					
	Усього	у тому числі				
лк		пр	лаб	інд	ср	
1	2	3	4	5	6	7
МОДУЛЬ 1						
Змістовий модуль 1. Основні поняття кристалохімії, реальна структура твердих тіл, причини утворення дефектів, співвідношення група-підгрупа між просторовими групами.						
Поняття про ідеальну, реальну та усереднені структури.	15/15	2/1	–	4/2	–	9/12
Дефекти в кристалах.	15/15	2/1	–	4/1	–	9/13
Співвідношення група-підгрупа між просторовими групами.	15/15	2/1	–	4/2	–	9/12
Разом за змістовим модулем 1	45/45	6/3	–	12/5	–	27/37
Змістовий модуль 2. Сучасні тенденції в розвитку структурного аналізу, рентгенівських методів дифракції на моно- і полікристалах, методів скануючої електронної спектроскопії та енергодисперсійної рентгенівської спектроскопії, нейтроно- та електронографії.						
Сучасні методи рентгенівської дифракції на моно- і полікристалах. Синхротронна дифракція. Нейтронографії. Електронографія.	15/15	2/1	–	4/1	–	9/13
Дослідження методами скануючої електронної спектроскопії та енергодисперсійної рентгенівської спектроскопії.	15/15	2/1	–	4/1	–	9/13
Разом за змістовим модулем 2	30/30	4/2	–	8/2	–	18/26
Змістовий модуль 3. Взаємозв'язок між хімічним складом, кристалічною структурою та фізичними властивостями сполук, як основа розробки функціональних матеріалів.						
Взаємозв'язок склад – структура – властивості.	15/15	2/1	–	4/1	–	9/13
Напівпровідники. Концентрація валентних електронів.	15/15	2/1	–	4/2	–	9/12
Надпровідники. Гомологічні структури.	15/15	2/1	–	4/2	–	9/12
Разом за змістовим модулем 3	45/45	6/3	–	12/5	–	27/37
Усього годин	120	16/8	–	32/12	–	72/100

5. Теми лабораторних занять

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
МОДУЛЬ 1		
1	Пошук пустот у структурах інтерметалічних сполук.	4
2	Визначення дефектів у кристалах.	4

3	Побудова генеалогічного дерева структур на основі співвідношення група-підгрупа між просторовими групами.	4
4	Аналіз міжатомних віддалей у сполуці з модульованою структурою.	4
5	Уточнення координат і параметрів зміщення атомів, коефіцієнтів заповнення позицій.	4
6	Встановлення магнітних груп симетрії.	4
7	Визначення концентрація валентних електронів.	4
8	Вивід гіпотетичних структур родини високотемпературних надпровідників.	4
	Разом	32

6. Самостійна робота

№ з/п	Назва теми	Кількість годин
МОДУЛЬ 1		
1	Рідини та аморфні речовини. Умови ізоструктурності сполук. Систематика структурних типів інтерметалічних сполук за координацією атомів.	9
2	Вплив дефектів на механічні властивості твердих тіл. Умови утворення неперервного ряду твердих розчинів. Динаміка фазових переходів.	9
3	Надпросторові групи симетрії. Уточнення параметрів модуляції з використанням функцій хвилі та функції кренеля. Квазікристали.	9
4	Аналіз профілю дифракційних піків. Дослідження при екстремальних температурах та тиску. Методи дослідження тонких плівок.	9
5	Типи електронних мікроскопів. Види детекторів, що використовуються в методі енергодисперсійної рентгенівської спектроскопії, їхні переваги та обмеження.	9
6	Термічне розширення. Еластичність. Пружність. Спайність. Піроелектричний ефект. П'єзоелектричний ефект. Сегнетоелектрики. Індокси рефракції. Оптична активність.	9
7	Енергія фермі у металах і напівпровідниках. Ефективна густина станів. Оптичні властивості напівпровідників.	9
8	Теорія Гінзбурга-Ландау. Теорія БКШ. Використання надпровідників.	9
	Разом	72

7. Методи навчання

Методи навчання у закладах вищої освіти спрямовані не лише на передавання і сприймання знань, а й на проникнення у процес розвитку науки, розкриття її методологічних основ. Під час викладання курсу “Прикладна кристалохімія” застосовуються методи організації і здійснення навчально-пізнавальної діяльності (пояснення, розповідь, лекція, бесіда, робота з підручником; ілюстрування, демонстрування, самостійне спостереження, вправи, лабораторні та практичні роботи) та методи стимулювання навчальної діяльності

(навчальна дискусія, створення проблемної ситуації у процесі викладання, створення ситуації новизни).

8. Методи контролю

Рейтингова система передбачає оцінювання чотирьох видів роботи в балах. Максимальна кількість балів за курс “Прикладна кристалохімія” без іспиту – 50. Студент, який отримав позитивні оцінки по всіх видах контролю, допускається до складання іспиту. Максимальна кількість балів при оцінюванні знань студента на іспиті становить 50 балів.

9. Розподіл балів, які отримують студенти

№	Вид контролю	Кількість форм контролю	Межі позитивного оцінювання	Максимальна сума балів
1	Контрольна робота	3	3-5	15
2	Тест	1	4-7	7
3	Лабораторна робота	8	2-3	24
4	Домашнє завдання	2	1-2	4
5	Іспит			50
Загальна сума балів				100

Шкала оцінювання: національна та ЄКТС

Оцінка ЄКТС	Сума балів за всі види навчальної діяльності	Оцінка за національною шкалою	
		для екзамену, курсового проекту(роботи), практики	для заліку
A	90-100	<i>відмінно</i>	<i>зараховано</i>
B	81-89	<i>добре</i>	
C	71-80		
D	61-70	<i>задовільно</i>	
E	51-60		
FX	21-50	<i>незадовільно із можливістю повторного складання</i>	<i>не зараховано із можливістю повторного складання</i>
F	0-20	<i>незадовільно з обов'язковим повторним вивченням дисципліни</i>	<i>не зараховано з обов'язковим повторним вивченням дисципліни</i>

10. Методичне забезпечення

1. С.Я. Пукас, *Прикладна кристалохімія (конспект лекцій)*. Кафедра неорганічної хімії Львівського національного університету імені Івана Франка (2022).

11. Рекомендована література

Базова

1. Р.Є. Гладішевський, С.Я. Пукас, *Прикладна кристалохімія (електронний навчальний курс)*. Система електронного навчання Moodle Львівського національного університету імені Івана Франка (2022).
2. Р.Є. Гладішевський, С.Я. Пукас, *Прикладна кристалохімія. Практикум*. Видання четверте, доповнене. Видавництво Львівського національного університету імені Івана Франка, Львів (2022) 126 с.
3. R.E. Gladyshevskii, *Methods to Determine Crystal Structures*. Textbook. Publishing Center of Ivan Franko National University of Lviv, Lviv (2015) 135 p.
4. A.R. West, *Solid State Chemistry and its Applications*. John Wiley & Sons, Chichester, United Kingdom (1984) 734 p.
5. P. Villars, K. Cenzual, R. Gladyshevskii, *Handbook of Inorganic Substances 2017*. Walter de Gruyter, Berlin (2017) 1955 p.

Допоміжна

6. Е. Парте, *Елементи неорганічної структурної хімії*. Світ, Львів (1993) 103 с.
7. V.K. Pecharsky, P.Y. Zavalij, *Fundamentals of Powder Diffraction and Structural Characterization of Materials*. Springer Science + Business Media, New York (2009) 741 p.
8. B.K. Vainshtein, V.M. Fridkin, V.L. Indenbom, *Modern Crystallography, Vol. 2: Structure of Crystals*, Springer, Berlin (2000) 520 p.
9. R.L. Snyder, J. Fiala, H.J. Bunge, Eds., *Defect and Microstructure Analysis by Diffraction*. Oxford University Press, Oxford (1999) 785 p.
10. D.L. Bish, J.E. Post, Eds., *Modern Powder Diffraction*. Mineralogical Society of America, Washington D.C. (1989) 369 p.
11. J.H. Westbrook, R.L. Fleischer, Eds., *Intermetallic Compounds, Vol. 1,2*. John Wiley & Sons, Chichester (1993) 754 p.
12. *International Tables for Crystallography, Vol. A*. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht (2002) 911 p.
13. Окремі статті в наукових журналах *Chemistry of Metals and Alloys*, *Вісник Львівського університету (Серія хімічна)*, *Acta Crystallographica*, *Journal of Alloys and Compounds*, *Physical Review B*.

12. Інформаційні ресурси

1. P. Villars, K. Cenzual, J.L.C. Daams, F. Hulliger, H. Okamoto, K. Osaki, A. Prince, S. Iwata, *Pauling File. Inorganic Materials Database and Design System. Binaries Edition*. Crystal Impact (Distributor), Bonn (2001).
2. P. Villars, K. Cenzual, *Pearson's Crystal Data – Crystal Structure Database for Inorganic Compounds*. ASM International, Materials Park (OH) (2022).