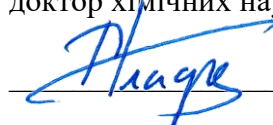


МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
Львівський національний університет імені Івана Франка
Хімічний факультет
Кафедра неорганічної хімії

Затверджено

На засіданні кафедри неорганічної хімії
хімічного факультету
Львівського національного університету
імені Івана Франка
(протокол № 1/8 від 29.08.2022 р.)

Завідувач кафедри
академік НАН України,
доктор хімічних наук, професор



Роман ГЛАДИШЕВСЬКИЙ

Силабус з навчальної дисципліни
“ПРИКЛАДНА КРИСТАЛОХІМІЯ”,
що викладається в межах освітньо-наукової програми ХІМІЯ
другого (магістерського) рівня вищої освіти
для здобувачів зі спеціальності 102 “Хімія”

Львів 2022 р.

Назва дисципліни	Прикладна кристалохімія
Адреса викладання дисципліни	Львівський національний університет імені Івана Франка, хімічний факультет (аудиторія № 2), вул. Кирила і Мефодія 6, м. Львів
Факультет та кафедра, за якою закріплена дисципліна	Хімічний факультет, кафедра неорганічної хімії
Галузь знань, шифр і назва спеціальності	10 Природничі науки, 102 Хімія
Викладачі дисципліни	Пукас С.Я., кандидат хімічних наук, доцент кафедри неорганічної хімії; https://chem.lnu.edu.ua/employee/pukas-svitlana-yaroslavivna Муць Н.М., кандидат хімічних наук, доцент кафедри неорганічної хімії https://chem.lnu.edu.ua/employee/muts-nataliya-myhajlivna
Контактна інформація викладачів	svitlana.pukas@lnu.edu.ua (доц. Пукас С.Я.), +380677476988; nataliya.muts@lnu.edu.ua (доц. Муць Н.М.), +380670067425
Консультації з питань навчання по дисципліні відбуваються	Очні консультації в день проведення лабораторних занять (за попередньою домовленістю) в ауд. №2 на кафедрі неорганічної хімії. Дистанційні консультації на платформі MS Teams або Zoom (https://us04web.zoom.us/j/74508951689?pwd=NIG5M7ck3pUsAEDi3oY30lXh7R1Qw4.1). Для погодження часу слід написати на електронну пошту викладача або зателефонувати.
Сторінка курсу	https://chem.lnu.edu.ua/course/prykladna-krystalokhimiia - ; сторінка курсу на платформі Moodle (e-learning.lnu.edu.ua)
Інформація про дисципліну	Дисципліна “Прикладна кристалохімія” є нормативною дисципліною за спеціальністю 102 Хімія для освітньо-наукової програми “Хімія” другого (магістерського) рівня вищої освіти, що викладається в першому семестрі в обсязі 4 кредитів (за Європейською Кредитно-Трансферною Системою ЄКТС). Дисципліна “Прикладна кристалохімія” продовжує загальну дисципліну “Кристалохімія” та в її змісті акцент зроблено на напрямки використання твердих неорганічних сполук як матеріалів нової техніки та технології.
Коротка анотація дисципліни	Навчальну дисципліну розроблено таким чином, щоб надати учасникам необхідні знання та виробити навички з різних форм застосування набутих знань та напрацювань, з метою розкриття власного наукового потенціалу. Лекційний курс складається з трьох основних частин: ідеальні та реальні структури, сучасні методи дослідження структури кристалів та фізичні властивості окремих класів сполук. Прецизійне визначення кристалічної структури, розрахунок електронної структури та характеристик хімічного зв'язку, вимірювання властивостей і контрольована зміна концентрації валентних електронів є передумовою синтезу нових фаз, що будуть основою матеріалів для практичного використання. Лабораторні заняття присвячені визначенню структурних та мікроструктурних характеристик сполук; побудові реальних модульованих та гіпотетичних структур; аналізу дифракційних даних полікристалічних зразків з використанням фахових програм; встановленню структурної спорідненості, впливу кристалічної структури на властивості сполук, взаємозв'язку склад-структура-властивості. Курс є важливим елементом становлення фахівців не лише у галузі хімії, але й науковців в цілому.
Мета та цілі дисципліни	Метою і завданням навчальної дисципліни “Прикладна кристалохімія” в системі підготовки магістрів хімічного факультету є набуття майбутніми спеціалістами практичних навичок у галузі сучасної кристалохімії – науки, яка відіграє особливу роль у процесі розробки функціональних матеріалів.

<p>Література для вивчення дисципліни</p>	<ol style="list-style-type: none"> 1. Р.Є. Гладішевський, С.Я. Пукас, <i>Прикладна кристалохімія. Практикум</i>, ЛНУ ім. Івана Франка, Львів (2022) – 126 с. 2. R.E. Gladyshevskii, <i>Methods to Determine Crystal Structures</i>, Textbook, Publishing Center of Ivan Franko National University of Lviv, Lviv (2015) – 135 p. 3. A.R. West, <i>Solid State Chemistry and its Applications</i>, John Wiley & Sons, Chichester, United Kingdom (1984) – 734 p. 4. P. Villars, K. Cenzual, R. Gladyshevskii, <i>Handbook of Inorganic Substances 2017</i>, Walter de Gruyter, Berlin (2017) – 1955 p. 5. V.K. Pecharsky, P.Y. Zavalij, <i>Fundamentals of Powder Diffraction and Structural Characterization of Materials</i>, Springer Science + Business Media, New York (2009) – 741 p. 6. R.L. Snyder, J. Fiala, H.J. Bunge, Eds., <i>Defect and Microstructure Analysis by Diffraction</i>, Oxford University Press, Oxford (1999) – 785 p. <p>Інформаційні ресурси:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. P. Villars, K. Cenzual, J.L.C. Daams, F. Hulliger, H. Okamoto, K. Osaki, A. Prince, S. Iwata, <i>Pauling File. Inorganic Materials Database and Design System. Binaries Edition</i>, Crystal Impact (Distributor), Bonn (2001). 2. P. Villars, K. Cenzual, <i>Pearson's Crystal Data – Crystal Structure Database for Inorganic Compounds</i>, ASM International, Materials Park (OH) (2022).
<p>Обсяг курсу</p>	<p>Навчальна дисципліна охоплює 4 кредити (120 год). Курс складається з 16 год лекційних занять, 32 год лабораторних занять та 72 год самостійної роботи.</p>
<p>Очікувані результати навчання</p>	<p>Після завершення цього курсу студент буде знати:</p> <ul style="list-style-type: none"> • 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. <p>і вміти:</p> <ul style="list-style-type: none"> • визначати структурні та мікроструктурні характеристики сполук із застосуванням сучасних кристалографічних комп'ютерних програм; • встановлювати співвідношення між просторовими групами; • виводити магнітні групи симетрії; <p>будувати гіпотетичні структури.</p> <p>В результаті успішного проходження курсу студент набуде такі загальні компетентності:</p> <p>ЗК 1. Знання та розуміння предметної області та розуміння професійної діяльності.</p> <p>ЗК 3. Здатність до абстрактного мислення, аналізу та синтезу.</p> <p>ЗК 4. Здатність застосовувати знання у практичних ситуаціях.</p> <p>ЗК 6. Здатність генерувати нові ідеї (креативність).</p> <p>ЗК 7. Здатність використовувати інформаційні та комунікаційні технології.</p> <p>ЗК 14. Здатність до пошуку, критичного аналізу та обробки інформації з різних джерел.</p>

	<p>та спеціальні фахові компетентності:</p> <p>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.</p> <p>СК 3. Здатність організовувати, планувати та реалізовувати хімічний експеримент.</p> <p>СК 4. Здатність інтерпретувати, об'єктивно оцінювати і презентувати результати свого дослідження.</p> <p>СК 5. Здатність застосовувати методи комп'ютерного моделювання для вирішення наукових, хіміко-технологічних проблем та проблем хімічного матеріалознавства.</p> <p>СК 6. Здатність здобувати нові знання в галузі хімії та інтегрувати їх із уже наявними.</p> <p>СК 7. Здатність дотримуватися етичних стандартів досліджень і професійної діяльності в галузі хімії (академічна доброчесність, ризики для людей і довкілля тощо).</p> <p>Програмні результати навчання (ПРН):</p> <p>ПРН 1. Знати і розуміти наукові концепції та сучасні теорії хімії, а також фундаментальні основи суміжних наук.</p> <p>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.</p> <p>ПРН 3. Застосовувати отримані знання і розуміння для вирішення нових якісних та кількісних задач хімії.</p> <p>ПРН 5. Володіти методами комп'ютерного моделювання структури, параметрів і динаміки хімічних систем.</p> <p>ПРН 8. Вміти ясно і однозначно донести результати власного дослідження до фахової аудиторії та/або нефакхівців.</p> <p>ПРН 9. Збирати, оцінювати та аналізувати дані, необхідні для розв'язання складних задач хімії, використовуючи необхідні методи та інструменти роботи з даними.</p> <p>ПРН 10. Планувати, організовувати та здійснювати експериментальні дослідження з хімії з використанням сучасного обладнання, грамотно обробляти їх результати та робити обґрунтовані висновки.</p>
Ключові слова	ідеальна та реальна кристалічна структура, структурна спорідненість, рентгеноструктурний аналіз, напівпровідник, надпровідник, магнітна симетрія, взаємозв'язок склад-структура-властивості.
Формат дисципліни	Очний
Теми	Наведено у Таблиці 1.
Підсумковий контроль, форма	Іспит в кінці семестру, письмовий.
Пререквізити	Для вивчення курсу студенти потребують знань з дисципліни "Кристалохімія"
Навчальні методи та техніки, які будуть використовуватися під час викладання курсу	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). Використання таких методів навчання: <i>словесні</i> – лекція, пояснення, бесіда; <i>наочні</i> – ілюстрування лекційного матеріалу моделями кристалічних многогранників і структур, схемами, таблицями, графіками; <i>практичні</i> – виконання лабораторних робіт (індивідуальні та групові завдання), спрямованих на застосування набутих знань у розв'язанні практичних завдань.																																			
Необхідне обладнання	Мультимедійне обладнання, персональні комп'ютери, бази кристалографічних даних, масиви дифракційних даних, моделі кристалічних многогранників і структур.																																			
Критерії оцінювання (окремо для кожного виду навчальної діяльності)	<p>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.</p> <p style="text-align: center;">Розподіл балів, які отримують студенти</p> <table border="1" style="margin-left: auto; margin-right: auto;"> <thead> <tr> <th>№</th> <th>Вид контролю</th> <th>Кількість форм контролю</th> <th>Межі позитивного оцінювання</th> <th>Максимальна сума балів</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>1</td> <td>Контрольна робота</td> <td>3</td> <td>3-5</td> <td>15</td> </tr> <tr> <td>2</td> <td>Тест</td> <td>1</td> <td>4-7</td> <td>7</td> </tr> <tr> <td>3</td> <td>Лабораторна робота</td> <td>8</td> <td>2-3</td> <td>24</td> </tr> <tr> <td>4</td> <td>Домашнє завдання</td> <td>2</td> <td>1-2</td> <td>4</td> </tr> <tr> <td>5</td> <td>Іспит</td> <td></td> <td></td> <td>50</td> </tr> <tr> <td></td> <td>Загальна сума балів</td> <td></td> <td></td> <td>100</td> </tr> </tbody> </table> <p>Відвідання занять є важливою складовою навчання. Очікується, що студенти відвідають усі лекції і лабораторні заняття дисципліни. Студенти зобов'язані дотримуватися усіх термінів, визначених для виконання усіх видів робіт.</p> <p>Політика виставлення балів: враховуються бали, набрані впродовж семестру на лабораторних заняттях за такі види робіт як контрольна робота, тест та лабораторна робота, за виконання домашніх завдань та бали отримані на іспиті.</p> <p>Академічна доброчесність: Очікується, що лабораторні та контрольні роботи студентів будуть їхніми оригінальними дослідженнями чи міркуваннями. Виявлення ознак академічної недоброчесності в письмовій роботі студента є підставою для її незарахування.</p>	№	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
№	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																																
Питання до заліку чи екзамену	Перелік завдань та питань до іспиту розміщений на сторінці дисципліни на платформі Moodle (e-learning.lnu.edu.ua).																																			
Опитування	Анкету-оцінку з метою оцінювання якості викладання дисципліни буде надано по завершенню курсу.																																			

Таблиця 1

Схема курсу

Тиж-день	Тема, план, короткі тези	Форма діяльності	Літера-тура	Завдання, год	Термін виконання
1	Кристалічний стан. Операції симетрії. Сингонії. Гратки Браве. Просторові групи. Міжатомні віддалі та кути. Радіуси атомів. Поняття про ідеальну та реальну структури.	лекція	1-2,4	2 год + 9 год самостійної роботи	1 та 2 тижні
1,2	Пошук пустот у структурах інтерметалічних сполук.	лабораторна робота		Нарисувати проєкції структур сполук та визначити координаційні многогранники атомів Гідрогену чи Дейтерію; 4 год	
3	Дефекти в кристалах. Точкові дефекти. Кластери дефектів. Антиструктурні дефекти. Лінійні та планарні дефекти. Тверді розчини. Надструктури. Фазові переходи.	лекція	1-2,6	2 год + 9 год самостійної роботи	3 та 4 тижні
3,4	Визначення дефектів у кристалах.	лабораторна робота		Визначити дефекти у кристалах, встановити вплив домішкових фаз на провідність кристалів; 4 год	
5	Співвідношення група-підгрупа між просторовими групами. Генеалогічне дерево Бернігхаузена. Неспіввимірні модульовані структури.	лекція	1-2,4	2 год + 9 год самостійної роботи	5 та 6 тижні
5,6	Побудова генеалогічного дерева структур на основі співвідношення група-підгрупа між просторовими групами.	лабораторна робота		Нарисувати проєкції структур сполук, встановити структурну спорідненість, побудувати генеалогічне дерево родини структур типу AlB_2 ; 4 год	
6	Контрольна робота № 1	контрольна робота			
7	Сучасні методи рентгенівської дифракції на моно- і полікристалах.	лекція	1-2,5	2 год + 9 год самостійної роботи	7 та 8 тижні
7,8	Аналіз міжатомних віддалей у сполуці з модульованою структурою.	лабораторна робота		Побудувати структуру за допомогою кристалографічних перетворень та розрахувати міжатомні віддалі у сполуці з модульованою структурою; 4 год	

9	Дослідження методами скануючої електронної спектроскопії та енергодисперсійної рентгенівської спектроскопії.	лекція	1-3,5	2 год + 9 год самостійної роботи	9 та 10 тижні
9,10	Уточнення координат і параметрів зміщення атомів, коефіцієнтів заповнення позицій.	лабораторна робота		Провести уточнення параметрів структури сполук з використанням програми DBWS; 4 год	
11	Взаємозв'язок хімічний склад – кристалічна структура – фізичні властивості. Принцип Неймана. Групи Шубнікова.	лекція	1-3	2 год + 9 год самостійної роботи	11 та 12 тижні
11,12	Встановлення магнітних груп симетрії.	лабораторна робота		Вивести магнітні групи симетрії, визначити зміну напрямку спіну атома при застосуванні елементів симетрії та оператора інверсії; 4 год	
12	Тест № 1 (дефекти в кристалах, магнітна симетрія)	тест			
13	Напівпровідники. Концентрація валентних електронів.	лекція	1-3	2 год + 9 год самостійної роботи	13 та 14 тижні
13,14	Визначення концентрації валентних електронів.	лабораторна робота		Розрахувати значення концентрації валентних електронів, нарисувати проєкції структур сполук та вказати гомоатомні структурні деталі; 4 год	
14	Контрольна робота № 2	контрольна робота			
15	Класичні надпровідники. Високотемпературні надпровідники. Гомологічні структури.	лекція	1-3	2 год + 9 год самостійної роботи	15 та 16 тижні
15,16	Вивід гіпотетичних структур родини високотемпературних надпровідників.	лабораторна робота		Визначити укладку шарів у структурі високо температурного надпровідника та на основі встановлених координат атомів вивести правильні системи точок; 4 год	
16	Контрольна робота № 3	контрольна робота			