

|                                                     |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                 |
|-----------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <b>Освітній компонент</b>                           | Вибірковий освітній компонент<br><b>6 «Методи визначення кристалічної структури сполук»</b>                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     |
| Рівень ВО                                           | другий (магістерський) рівень                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   |
| Назва спеціальності / освітньо-професійної програми | ЕЗ Хімія / Хімія                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |
| Форма навчання                                      | Денна                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                           |
| Курс, семестр, протяжність                          | 2 (3 семестр), 4 кредити ЄКТС                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   |
| Семестровий контроль                                | залік                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                           |
| Обсяг годин (усього: з них лекції / практичні)      | 120 год., з них: лекц. – 10 год., практ. – 14 год.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                              |
| Мова викладання                                     | українська                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      |
| Кафедра, яка забезпечує викладання                  | кафедра неорганічної та фізичної хімії                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                          |
| Автор ОК                                            | Доктор хімічних наук;<br>Професор, завідувач кафедри неорганічної та фізичної хімії<br>Гулай Любомир Дмитрович                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  |
| <b>Короткий опис</b>                                |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                 |
| Вимоги до початку вивчення                          | Необхідною навчальною базою перед початком вивчення освітнього компоненту є володіння знаннями з фізики, хімії, кристалохімії.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  |
| Що буде вивчатися                                   | Природа X-променів. Правила техніки безпеки при роботі у спеціалізованій лабораторії з іонізуючим випромінюванням. Взаємодія X-променів з речовиною. Кристалічний стан речовини; симетрія кристалічних многогранників і кристалів. Вузлові (атомні) площини, їх індексування. Типи комірок Браве. Базис елементарної комірки. Дифракція X-променів на кристалах. Закони дифракції. Основні методи X-променевого структурного аналізу, особливості цих методів і їх застосування. Вплив різних факторів на інтенсивність інтерференційних відбиттів на дифрактограмах.                                                                                                                                                                                                                                                           |
| Чому це цікаво / треба вивчати                      | Вивчення дисципліни полягає в ознайомленні з теоретичними основами, методами і прийомами X-променевого структурного аналізу; ознайомленні з методикою роботи у рентгенівській лабораторії та розшифровкою кристалічної структури сполук методами монокристалу та полікристалу з використанням спеціальних комп'ютерних програм.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                 |
| Чому можна навчитися (результати навчання)          | Отримати дифрактограму полікристалічного зразка. За експериментальними дифрактограмами провести фазовий аналіз досліджуваних зразків. Ідентифікувати синтезовану речовину, маючи літературні дані про її кристалічну структуру. За літературними даними про кристалічну структуру сполуки побудувати теоретичну дифрактограму, що їй відповідає, використовуючи PowderCell. Обробити одержану дифрактограму із використанням комп'ютерної програми WinCSD, уточнити періоди ідентичності елементарної комірки сполуки. Провести розрахунок кристалічної структури сполуки методом полікристалу з допомогою програми WinCSD. Провести розрахунок кристалічної структури сполуки методом монокристалу з допомогою програми SHELXL. Проаналізувати кристалічну структуру сполуки за допомогою програм WinCSD, PowderCell, Diamond. |
| Як можна користуватися                              | Проводити фазовий аналіз досліджуваних зразків, визначати                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       |

|                                                     |                                                   |
|-----------------------------------------------------|---------------------------------------------------|
| набутими знаннями й<br>уміннями<br>(компетентності) | кристалічну структуру, ідентифікувати фази і т.д. |
|-----------------------------------------------------|---------------------------------------------------|