

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
Волинський національний університет імені Лесі Українки
Навчально-науковий інститут хімії та екології
Кафедра неорганічної та фізичної хімії

СИЛАБУС

Вибіркового освітнього компонента

МЕТОДИ ВИЗНАЧЕННЯ КРИСТАЛІЧНОЇ СТРУКТУРИ СПОЛУК

підготовки магістра

Луцьк – 2026

Силабус освітнього компонента «Методи визначення кристалічної структури сполук» підготовки магістра.

Розробник: Гулай Л.Д., завідувач кафедри-професор кафедри неорганічної та фізичної хімії, доктор хімічних наук, професор

Погоджено

Гарант освітньо-професійної програми
д.х.н., проф.



Сливка Н. Ю.

Силабус освітнього компонента затверджено на засіданні кафедри неорганічної та фізичної хімії
протокол № 5 від 26 січня 2026 р.

Завідувач кафедри: д.х.н., проф.



Гулай Л.Д.

© Гулай Л.Д., 2026

I. Опис освітнього компонента

Найменування показників	Галузь знань, спеціальність, освітньо-професійна програма, освітній рівень	Характеристика освітнього компонента
Денна форма здобуття освіти	Е Природничі науки, математика та статистика ЕЗ Хімія Хімія магістр	Вибірковий
Кількість годин/кредитів <u>120/4</u>		Рік навчання <u>2</u>
		Семестр <u>3</u>
ІНДЗ: <u>немає</u>		Лекції <u>10</u> год.
		Практичні <u>14</u> год.
		Лабораторні <u>-</u> год.
		Індивідуальні <u>-</u> год.
		Самостійна робота <u>88</u> год.
	Консультації <u>8</u> год.	
	Форма контролю: залік	
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- професор кафедри
неорганічної та фізичної хімії	
Контактна інформація	0673326625, Gulay.Lyubomyr@vnu.edu.ua
Дні занять	https://ps.vnu.edu.ua/cgi-bin/timetable.cgi?n=700

III. Опис дисципліни

1. Анотація курсу. Силабус вибіркового освітнього компонента «Методи визначення кристалічної структури сполук» складено з урахуванням можливості формування індивідуальної освітньої траєкторії здобувачів освіти другого (магістерського) рівня.

2. Мета і завдання освітнього компонента. Метою вивчення освітнього компонента «Методи визначення кристалічної структури сполук» є спеціальна базова підготовка здобувачів освіти в області дослідження будови неорганічних та органічних речовин методами полікристалу та монокристалу. Завданням освітнього компонента є засвоєння здобувачами освіти методів отримання дифрактограм полікристалічних зразків; проведення за експериментальними

дифрактограмами фазового аналізу досліджуваних зразків; ідентифікація синтезованої речовини; обробка експериментальної дифрактограми; уточнення періодів ідентичності елементарної комірки сполуки; проведення розрахунку кристалічної структури сполуки методом полікристалу чи монокристалу.

3. Soft skills. Курс передбачає формування комунікативної складової: вміння слухати, переконувати, вести дискусії наукової тематики; навички командної роботи: здатність взаємодіяти, підтримувати, брати відповідальність за прийняття наукових рішень; формування адаптивності: гнучкість, здатність швидко вчитися та працювати в стресових умовах та при складанні складних технологічних процесів; та розвиток критичного мислення: аналіз інформації, прийняття обґрунтованих рішень.

4. Структура освітнього компонента

Назва змістових модулів і тем	Усього	Лекції	Лаб. заняття	Прак тичні	Сам. роб.	Конс	Форма контролю/ Бали
Змістовий модуль 1. Метод полікристалу							
Тема 1. Фактори, що впливають на інтенсивність рефлексів.	19	2		2	14	1	<i>УО/РЗ/10</i>
Тема 2. Проведення експериментальних досліджень методом полікристалу.	17	2		2	12	1	<i>УО*/РЗ*/20</i>
Тема 3. Розрахунок кристалічної структури методом полікристалу.	27	2		3	20	2	<i>УО/РЗ/30</i>
Разом за змістовим модулем 1	63	6		7	46	4	<i>МКР1/60</i>
Змістовий модуль 2. Метод монокристалу							
Тема 4. Проведення експериментальних досліджень методом монокристалу.	18	2		2	12	2	<i>УО/РЗ/20</i>
Тема 5. Розрахунок кристалічної структури методом монокристалу.	39	2		5	30	2	<i>УО/РЗ/20</i>
Разом за змістовим модулем 2	57	4		7	42	4	<i>МКР2/40</i>
Всього годин/Балів	120	10		14	88	8	100

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

1. Теми лекцій

№ з/п	Тема	К-ть год.
1	Фактори, що впливають на інтенсивність рефлексів	2
2	Проведення експериментальних досліджень методом полікристалу	2
3	Розрахунок кристалічної структури методом полікристалу	2
4	Проведення експериментальних досліджень методом монокристалу	2
5	Розрахунок кристалічної структури методом монокристалу	2
Разом за семестр		10

2. Теми практичних занять

№ з/п	Тема	К-ть год.
1	Обробка порошкової дифрактограми зразка	2
2	Індексування порошкограм	2
3	Розрахунок кристалічної структури сполуки відомого структурного типу методом полікристалу	3
4	Визначення кристалічної структури сполуки методом монокристалу	7
Разом за семестр		14

3. Самостійна робота

Питання на самостійне опрацювання	К-ть год.
Природа X-променів	6
Рівняння Брега	6
Геометрія порошкового дифрактометра	5
Геометрія монокристального дифрактометра	5
Вибір просторової групи. Погасання.	6
Структурна амплітуда	12
Координати атомів	6
Прямі методи	12
Метод важкого атома	12
Синтез Фур'є	12
Міжатомні відстані	6
Разом	88

IV. Політика оцінювання

Здобувач освіти повинен відвідувати лекції і практичні заняття.

На початку вивчення курсу здобувачі освіти ознайомлюються з основними засадами академічної доброчесності. У випадку виявлення порушень, здобувач освіти не отримує балів за виконану роботу

Пропущені практичні заняття (з будь яких причин) відпрацьовуються у позаурочний час. У разі поганого написання модульної контрольної роботи здобувач освіти може презентувати її в усній формі викладачу.

V. Підсумковий контроль

Формою підсумкового контролю є залік. Якщо протягом семестру здобувач освіти набрав 60 і більше балів, він може отримати залік, не складаючи його. У випадку незадовільної підсумкової оцінки або за бажанням покращити свій результат здобувач освіти може отримати додаткові бали за рахунок виконання додаткових завдань.

Шкала оцінювання

Оцінка в балах	Лінгвістична оцінка
90–100	Зараховано
82–89	
75–81	
67–74	
60–66	
0–59	Незараховано (необхідне перескладання)

Перелік питань для складання заліку

1. Кут відбиття.
2. Міжплощинна відстань.
3. Інтенсивність відбиття.
4. Функція для опису піків дифрактограми.
5. Яка причина виникнення фону дифрактограми?
6. В чому суть індексування порошкограми?
7. Що таке індекси площин?
8. Що таке параметри елементарної комірки?
9. Охарактеризувати повнопрофільний метод Рітвельда.
10. Охарактеризувати фактор розбіжності R_I .
11. Охарактеризувати фактор розбіжності R_P .
12. Охарактеризувати фактор розбіжності R_{WP} .
13. Які функції описують піки порошкограми?
14. Що таке прямі методи?
15. Що таке метод Патерсона?

16. Що таке фактор розбіжності $R1$?
17. Що таке фактор розбіжності $wR2$?
18. Що таке ізотропне та анізотропне наближення?

VI. Рекомендована література та інтернет-ресурси

1. Гулай Л. Д. Методи визначення кристалічної структури сполук : методичні рекомендації до практичних робіт. Луцьк: ПП Іванюк. В. П, 2024. 42 с. <https://evnuir.vnu.edu.ua/handle/123456789/25421>
1. Березнюк О. П., Піскач Л. В., Гулай Л. Д., Климович О. С., Іващенко І. А. Квазіпотрійні системи $Al_2X - Cn_2X_3 - DIVX_2$ (Al – Cu, Ag; Cn – As, Sb; DIV – Ge, Sn; X – S, Se): фазові рівноваги, склоутворення, властивості проміжних фаз : монографія. Луцьк : Вежа-Друк, 2025. 304 с. <https://evnuir.vnu.edu.ua/handle/12345678/28441>
1. <https://wincsd.eu/>.
2. Akselrud L., Grin Yu..WinCSD: software package for crystallographic calculations (Version 4). *J. Appl. Cryst.*2014. Vol. 47. P. 803.
3. [https://doi.org/10.1016/S0925-8388\(01\)01424-4/](https://doi.org/10.1016/S0925-8388(01)01424-4/).
4. [https://doi.org/10.1016/0025-5408\(72\)90218-8](https://doi.org/10.1016/0025-5408(72)90218-8).
5. <https://shelx.uni-goettingen.de/>.
6. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2006.11.168/>.
7. <https://doi.org/10.1107/S2053229614024218/>.