

**МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ  
ДВНЗ «ПРИКАРПАТСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ  
ІМЕНІ ВАСИЛЯ СТЕФАНИКА»**

Факультет природничих наук

Кафедра хімії

**СИЛАБУС НАВЧАЛЬНОЇ ДИСЦИПЛІНИ  
ДЕФЕКТИ У КРИСТАЛІЧНИХ ТІЛАХ  
(DEFECTS IN CRYSTALLINE SOLIDS)**

Освітньо-наукова програма ДОКТОРА ФІЛОСОФІЇ

Спеціальність 102 Хімія

Галузь знань 10 Природничі науки

Затверджено на засіданні кафедри  
Протокол № 11 від “06” травня 2021 р.

м. Івано-Франківськ - 2021

## **ЗМІСТ**

1. Загальна інформація
2. Анотація до курсу
3. Мета та цілі курсу
4. Результати навчання (компетентності)
5. Організація навчання курсу
6. Система оцінювання курсу
7. Політика курсу
8. Рекомендована література

<b>1. Загальна інформація</b>	
<b>Назва дисципліни</b>	Дефекти у кристалічних тілах (Defects in Crystalline Solids)
<b>Викладач (-і)</b>	Доцент Татарчук Тетяна Романівна
<b>Контактний телефон викладача</b>	0500867345
<b>Е-mail викладача</b>	<a href="mailto:tetyana.tatarchuk@pnu.edu.ua">tetyana.tatarchuk@pnu.edu.ua</a>
<b>Формат дисципліни</b>	Lectures, classes
<b>Обсяг дисципліни</b>	3 ECTS, 60 hours
<b>Посилання на сайт дистанційного навчання</b>	<a href="https://d-learn.pnu.edu.ua">https://d-learn.pnu.edu.ua</a>
<b>Консультації</b>	Every week
<b>2. Анотація до курсу</b>	
<p>Дисципліна «Дефекти у кристалічних тілах (Defects in Crystalline Solids)» належить до вибіркових дисциплін циклу професійної підготовки. Дисципліна «Дефекти у кристалічних тілах (Defects in Crystalline Solids)» вивчається аспірантами спеціальності 102 Хімія у третьому семестрі. Курс читається на англійській мові. Предмет спрямований на ознайомлення студентів із недосконаlostями (дефектами) будови реальних кристалів, їх параметрами і характеристиками, причинами утворення, сучасними дослідженнями і проблемами в області хімії дефектних сполук, зокрема із процесами, які обумовлюють вплив дефектів на реакційну здатність матеріалів. Аспіранти отримують знання про роль дефектної структури простих та складних речовин у вирішенні конкретних задач хімії відповідно до сучасних потреб. Маючи інформацію про нестехіометрію тієї чи іншої сполуки, можна встановити механізм реакції в системах “тверде-тверде”, “тверде-рідке”, “тверде-газ”. Без глибоких знань в області хімії дефектних кристалів неможлива підготовка висококваліфікованого фахівця в області хімії.</p>	
<b>3. Мета та цілі курсу</b>	
<p>У результаті вивчення курсу аспірант повинен:</p> <p><b>знати:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• основні принципи класифікації матеріалів та методи їх одержання;</li> <li>• будову реального кристалу та класифікацію атомних дефектів;</li> <li>• вплив дефектів на фізичні та хімічні властивості кристалів;</li> <li>• типи дефектів: дефекти 0D (точкові дефекти), 1D (лінійні дефекти), 2D (поверхневі дефекти), 3D (об’ємні дефекти);</li> <li>• особливості нестехіометричних сполук;</li> <li>• типи дефектів у оксидах;</li> <li>• типи електронних дефектів у напівпровідниках;</li> <li>• типи структурних дефектів у графені та їх вплив на властивості;</li> <li>• принципи інженерії дефектів;</li> </ul> <p><b>вміти:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• класифікувати дефекти за ознакою їх вимірності;</li> <li>• прогнозувати властивості дефектних матеріалів;</li> <li>• описувати дефекти у оксидах на основі антиструктурного моделювання;</li> <li>• застосовувати принципи інженерії дефектів для створення матеріалів із наперед заданими властивостями.</li> </ul>	
<b>4. Результати навчання (компетентності)</b>	
<p><b>Загальні компетентності (ЗК):</b></p> <p>ЗК3. Здатність до пошуку, обробки та аналізу інформації з різних джерел.</p> <p>ЗК7. Здатність презентувати наукові матеріали та аргументи у письмовій та усній формі.</p> <p>ЗК 10. Здатність працювати в міжнародному контексті.</p>	

**Спеціальні (фахові, предметні) компетентності (СК):**

СК1. Здатність виконувати оригінальні дослідження, як теоретичні так й експериментальні, досягати наукових результатів, які створюють нові знання у галузі хімії та дотичних до неї міждисциплінарних напрямках і можуть бути опубліковані у провідних наукових виданнях з хімії та суміжних галузей.

СК2. Здатність усно і письмово презентувати та обговорювати результати наукових досліджень та/або інноваційних розробок державною та англійською мовами, глибоке розуміння англомовних наукових текстів за напрямом досліджень.

**Програмні результати навчання (ПРН):**

ПРН1. Мати передові концептуальні та методологічні знання з хімії та на межі предметних галузей, а також дослідницькі навички, достатні для проведення наукових і прикладних досліджень на рівні останніх світових досягнень з відповідного напрямку, отримання нових знань та/або здійснення інновацій.

ПРН2. Вільно презентувати та обговорювати з фахівцями і нефахівцями результати досліджень, наукові та прикладні проблеми хімії державною та іноземною мовами, кваліфіковано відображати результати досліджень у наукових публікаціях у провідних міжнародних наукових виданнях.

ПРН6. Застосовувати сучасні інструменти і технології пошуку, оброблення та аналізу інформації, зокрема, статистичні методи аналізу даних великого обсягу та/або складної структури, спеціалізовані бази даних та інформаційні системи.

ПРН11. Застосовувати знання про взаємозв'язок хімічної структури з фізичними і хімічними властивостями в ході створення нових перспективних матеріалів.

**5. Організація навчання курсу**

## Обсяг курсу

Вид заняття	Загальна кількість годин
Лекції	20
Семінарські заняття	10
Самостійна робота	60

## Ознаки курсу

Семестр	Спеціальність	Курс (рік навчання)	Нормативний / Вибірковий
Третій	102 Хімія	Другий	Вибірковий

## Тематика курсу

Тема	Форма заняття	Література	Завдання, год	Вага оцінки	Термін виконання
<b>Тема 1.</b> Perfect and Imperfect Crystals.	Лекція	[1 – 7]	Л – 2 год. СР – 4 год.		Згідно розкладу
<b>Тема 2.</b> Types of Defect: 0D-Point Defects.	Лекція	[1 – 7]	Л – 2 год. СР – 4 год.		Згідно розкладу
<b>Тема 3.</b> Types of Defect: 1D-Line Defects.	Лекція	[1 – 7]	Л – 2 год. СР – 4 год.		Згідно розкладу
<b>Тема 4.</b> Types of Defect: 2D-Surface Defects.	Лекція	[1 – 7]	Л – 2 год. СР – 4 год.		Згідно розкладу
<b>Тема 5.</b> Types of Defect: 3D-Volume Defects.	Лекція	[1 – 7]	Л – 2 год. СР – 4 год.		Згідно розкладу

Types of Defects.	Семінарське заняття	[1 – 7]	СЗ – 2 год. СР – 4 год.	Максимальна оцінка – 10 балів	Згідно розкладу
<b>Тема 6.</b> Non-stoichiometric compounds.	Лекція	[1 – 7]	Л – 2 год. СР – 4 год.		Згідно розкладу
Non-stoichiometric compounds	Семінарське заняття	[1 – 7]	СЗ – 2 год. СР – 4 год.	Максимальна оцінка – 10 балів	Згідно розкладу
<b>Тема 7.</b> Defects in the oxides.	Лекція	[1 – 7]	Л – 2 год. СР – 4 год.		Згідно розкладу
<b>Тема 8.</b> Electronic defects in semiconductors.	Лекція	[1 – 7]	Л – 2 год. СР – 4 год.		Згідно розкладу
Antistructural modeling.	Семінарське заняття	[1 – 7]	СЗ – 4 год. СР – 8 год.	Максимальна оцінка – 20 балів	Згідно розкладу
<b>Тема 9.</b> Structural Defects in Graphene.	Лекція	[1 – 7]	Л – 2 год. СР – 4 год.		Згідно розкладу
<b>Тема 10.</b> Defects Engineering: Defects Structure and Properties of Nanomaterials.	Лекція	[1 – 7]	Л – 2 год. СР – 4 год.		Згідно розкладу
Defects Engineering and Properties of Nanomaterials.	Семінарське заняття	[1 – 7]	СЗ – 2 год. СР – 4 год.	Максимальна оцінка – 10 балів	Згідно розкладу
<b>6. Система оцінювання курсу</b>					
Загальна система оцінювання курсу	Залік: максимальна оцінка – 100 балів. Оцінка за семінарські заняття – 50 балів. Залікова робота – 50 балів.				
Семінарські заняття	Кожна тема оцінюється максимально у 10 або 20 балів (див. п.5). Протягом семестру аспірант повинен здати 4 теми, винесені на семінарські заняття, оцінка за які в сумі складає максимум 50 балів.				
Умови допуску до підсумкового контролю	Відвідування більше 50% лекційних та 100% семінарських занять.				
<b>7. Політика курсу</b>					
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Неприпустимі списування, аспірант повинен вільно володіти матеріалом.</li> <li>• Лекційні заняття не відпрацьовуються, але знання лекційного матеріалу обов'язкове.</li> <li>• Якщо аспірант пропустив більше 50% лекційних занять, він повинен пройти тестування і тільки тоді буде допущений до складання заліку.</li> <li>• Пропуски семінарських занять відпрацьовуються наступним чином: опрацювання теми, а також здача теми в такий час, щоб не заважати проведенню інших семінарських занять.</li> <li>• Якщо аспірант не відпрацював пропущені семінарські заняття, він не допускається до заліку.</li> <li>• Обов'язковим є для отримання заліку відвідування більш 50% занять, робота на семінарських заняттях, а також виконання самостійної роботи.</li> </ul>					

### 8. Рекомендована література

1. R. J. D. Tilley. Crystals and crystal structure / John Wiley & Sons Ltd, The Atrium, Southern Gate, Chichester, 2006, 270 p.
2. Smith, W. F., (2011). Foundations of materials science and engineering. (5th edition). Singapore: McGraw-Hill.
3. Callister, W. D. (2014). Materials science and engineering. (9th edition). Hoboken, NJ: John Wiley & Sons.
4. Askeland, D. R., Phule P. P., (2016). The science and engineering of materials. (7th edition). Stamford, CT: Cengage Learning.
5. Shakelford, J. F. (2015). Introduction to materials science for engineers. (8th edition). Upper Saddle River, New Jersey: Prentice Hall.
6. T. Tatarchuk, M. Bououdina, N. Paliychuk, I. Yaremiy, V. Moklyak. Structural characterization and antistructure modeling of cobalt-substituted zinc ferrites. Journal of Alloys and Compounds 2017; 694: 777-791. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2016.10.067>
7. T. Tatarchuk, B. Al-Najar, M. Bououdina, M.A.A. Ahmed (2019) Catalytic and Photocatalytic Properties of Oxide Spinel. In: L. Martínez, O. Kharissova, B. Kharisov (eds) Handbook of Ecomaterials. Springer, Cham, pp. 1701-1750, ISBN 978-3-319-68254-9, [https://doi.org/10.1007/978-3-319-68255-6\\_158](https://doi.org/10.1007/978-3-319-68255-6_158)

Викладач \_\_\_\_\_ Т.Р. Татарчук