**Nazwa przedmiotu:**

Podstawy krystalografii rentgenowskiej

**Koordynator przedmiotu:**

dr hab. inż. Janusz Zachara

**Status przedmiotu:**

Fakultatywny dowolnego wyboru

**Poziom kształcenia:**

Studia II stopnia

**Program:**

Technologia Chemiczna

**Grupa przedmiotów:**

Wspólne

**Kod przedmiotu:**

brak

**Semestr nominalny:**

1 / rok ak. 2010/2011

**Liczba punktów ECTS:**

3

**Liczba godzin pracy studenta związanych z osiągnięciem efektów uczenia się:**

**Liczba punktów ECTS na zajęciach wymagających bezpośredniego udziału nauczycieli akademickich:**

**Język prowadzenia zajęć:**

polski

**Liczba punktów ECTS, którą student uzyskuje w ramach zajęć o charakterze praktycznym:**

**Formy zajęć i ich wymiar w semestrze:**

|  |  |
| --- | --- |
| Wykład:  | 15h |
| Ćwiczenia:  | 30h |
| Laboratorium:  | 0h |
| Projekt:  | 0h |
| Lekcje komputerowe:  | 0h |

**Wymagania wstępne:**

Matematyka, Fizyka, Chemia Fizyczna

**Limit liczby studentów:**

**Cel przedmiotu:**

Celem przedmiotu jest zapoznanie słuchaczy z podstawami teorii budowy faz krystalicznych i metodami doświadczalnymi prowadzącymi do wyznaczenia struktury krystalicznej.

**Treści kształcenia:**

Celem przedmiotu jest zapoznanie słuchaczy z podstawami teorii budowy faz krystalicznych i metodami doświadczalnymi prowadzącymi do wyznaczenia struktury krystalicznej.
Treści merytoryczne wykładu:
- Definicja kryształu i wprowadzenie podstawowych pojęć: sieć przestrzenna i sieć krystaliczna, komórka elementarna, współrzędne krystalograficzne, proste sieciowe, płaszczyzny sieciowe. Ważniejsze wzory krystalograficzne.
- Operacje i elementy symetrii grup punktowych (klas symetrii). Rzut stereograficzny. Złożenie elementów symetrii. Przegląd klas symetrii.
- Układy krystalograficzne. Symetria translacyjna sieci. Sieci Bravais'ego.
- Opis morfologii kryształu. Postacie proste i złożone kryształów. Przykładowe projekcje monokryształów.
- Strukturalne elementy symetrii. Grupy przestrzenne - charakterystyka wybranych prostych grup przestrzennych.
- Źródła promieniowania rentgenowskiego i jego oddziaływanie z materią. Warunki dyfrakcji na kryształach. Równania Lauego i Braggów. Sieć odwrotna a geometria dyfrakcji - konstrukcja Ewalda.
- Dyfrakcyjna sieć odwrotna - czynnik struktury, wygaszania systematyczne, prawo Friedla, grupy dyfrakcyjne Lauego.
- Problem fazowy i metody rozwiązywania struktury kryształu. Udokładnianie modelu struktury.
- Interpretacja danych strukturalnych.
- Doświadczalne metody krystalografii rentgenowskiej - badania monokryształów i polikryształów.
Ćwiczenia są prowadzone jako zajęcia uzupełniające i wspomagające wykład z podstaw krystalografii rentgenowskiej. Rozwiązując proste problemy krystalograficzne studenci rozwijają wyobraźnię przestrzenną i zdobywają praktyczne umiejętności posługiwania się pojęciami z krystalografii geometrycznej i rentgenowskiej.
Treści merytoryczne ćwiczeń obejmują:
- Wyznaczanie wskaźników płaszczyzn oraz prostych sieciowych.
- Obliczenia geometryczne w układach współrzędnych krystalograficznych.
- Rzut stereograficzny ścian kryształu i wyznaczanie klasy krystalograficznej. Wykorzystanie siatki Wulfa i projekcje wybranych figur (monokryształów).
- Przypisywanie grupy punktowej dla wybranych cząsteczek. Analiza morfologiczna wybranych kryształów.
- Sieci Bravais'ego i strukturalne elementy symetrii oraz ich złożenie. Międzynarodowe symbole grup przestrzennych i określanie na tej podstawie układu krystalograficznego, klasy krystalograficznej oraz operacji symetrii.
- Wyznaczanie elementów symetrii i zespołów pozycji symetrycznie równoważnych dla wybranych grup przestrzennych.
- Zapoznanie studentów z przebiegiem pomiaru dyfrakcyjnego dla monokryształu na czterokołowym dyfraktometrze z detektorem CCD oraz procedurą wyznaczania struktury kryształu.
- Określanie typu sieci Bravais, klasy Lauego oraz grupy przestrzennej na podstawie otrzymanych obrazów dyfrakcyjnych sieć odwrotnych.
- Zapoznanie z przebiegiem pomiaru dyfrakcyjnego próbek polikrystalicznych. Wykorzystanie równania Braggów w obliczeniach dla dyfraktogramów proszkowych.
- Ćwiczenia z wykorzystaniem strukturalnych baz danych ICSD/CSD.
- Analiza strukturalna i prezentacja jej wyników. Opis budowy cząsteczek i ich upakowania w sieci krystalicznej. Graficzna prezentacja struktur. Interpretacja warunków pomiaru oraz uzyskanych wskaźników rozbieżności.

**Metody oceny:**

Sprawdzian pisemny z ćwiczeń i egzamin pisemny

**Egzamin:**

**Literatura:**

1. Z. Trzaska-Durski, H. Trzaska-Durska, Podstawy krystalografii strukturalnej i rentgenowskiej, PWN 1994.
2. Z. Bojarski, M. Gigla, K. Stróż, M. Surowiec, Krystalografia - podręcznik wspomagany komputerowo, PWN 1996, 2001.
3. P. Luger, Rentgenografia strukturalna monokryształów, PWN 1989.
4. M. van Meerssche, J. Feneau-Dupont, Krystalografia i chemia strukturalna, PWN 1984.
5. W. Massa, Crystal Structure Determination, 2nd ed., Springer Verlag 2004.

**Witryna www przedmiotu:**

**Uwagi:**

## Efekty przedmiotowe