**Nazwa przedmiotu:**

Laboratorium krystalografii rentgenowskiej

**Koordynator przedmiotu:**

dr hab. inż. Janusz Zachara dr inż. Izabela Madura

**Status przedmiotu:**

Fakultatywny dowolnego wyboru

**Poziom kształcenia:**

Studia II stopnia

**Program:**

Technologia Chemiczna

**Grupa przedmiotów:**

Obieralne

**Kod przedmiotu:**

brak

**Semestr nominalny:**

2 / rok ak. 2013/2014

**Liczba punktów ECTS:**

0

**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: | 0h |
| Ćwiczenia: | 0h |
| Laboratorium: | 0h |
| Projekt: | 0h |
| Lekcje komputerowe: | 0h |

**Wymagania wstępne:**

Wymagane wcześniejsze zaliczenie „Podstaw krystalografii rentgenowskiej” (sem I).

**Limit liczby studentów:**

**Cel przedmiotu:**

Celem zajęć jest zdobycie umiejętności samodzielnego wykonywania pomiarów dyfrakcyjnych wraz z obliczeniami oraz analizy struktur krystalicznych, co ma umożliwić w sem. III wykonanie pracy magisterskiej z krystalografii.

**Treści kształcenia:**

W trakcie laboratorium studenci wyznaczą struktury krystaliczne szeregu związków chemicznych wybranych odpowiednio do określonego problemu chemicznego i przeprowadzą analizę struktur z wykorzystaniem krystalograficznych baz danych. Na zakończenie zajęć przygotują projekt publikacji do czasopisma krystalograficznego. Treści merytoryczne laboratorium.
- Krystalizacja wybranego zestawu związków z zastosowaniem odpowiednich technik krystalizacji.
- Zbadanie właściwości optycznych i określenie morfologii otrzymanych kryształów z zastosowaniem mikroskopu polaryzacyjnego. Selekcja monokryształów odpowiednich do badań dyfrakcyjnych.
- Wykonanie pomiarów dyfrakcyjnych na dyfraktometrze wyposażonym w detektor CCD.
- Wyznaczenie symetrii badanych kryształów i rozwiązywanie struktur z wykorzystaniem metod bezpośrednich, metody funkcji Pattersona, metody „charge-flipping”.
- Udokładnienie modeli struktur metodą najmniejszych kwadratów.
- Multipolowe udokładniania struktury i analiza eksperymentalnej gęstości elektronowej dla wybranego monokryształu
- Interpretacja otrzymanych danych strukturalnych i praktyczne wykorzystanie strukturalnych baz danych CSD i ICSD.
- Graficzna prezentacja struktur – szczegółowe zapoznanie z programami komputerowymi.
- Przygotowanie projektu publikacji do czasopism krystalograficznych (Acta Cryst., Z. Kryst.) w opraciu o uzyskane wyniki badań i przeprowadzoną analizę strukturalną.

**Metody oceny:**

Ocena seminarium końcowego i projektu publikacji.

**Egzamin:**

**Literatura:**

1. P. Luger, Rentgenografia strukturalna monokryształów, PWN, 1989.
2. C. Giacovazzo, H.L. Monaco, G. Artioli, D. Viterbo, G. Ferraris, G. Gilli, G. Zanotti, M. Catti, Fundamentals of Crystallography, 2nd ed., International Union of Crystallography, Texts on Crystallography 7, Oxford University Press 2002.
3. W. Massa, Crystal Structure Determination, 2nd ed., Springer Verlag 2004.

**Witryna www przedmiotu:**

**Uwagi:**

## Efekty przedmiotowe