**Nazwa przedmiotu:**

Podstawy krystalografii rentgenowskiej

**Koordynator przedmiotu:**

Prof. nzw dr hab. inż. Janusz Zachara, dr hab. inż. Izabela Madura

**Status przedmiotu:**

Obowiązkowy

**Poziom kształcenia:**

Studia I stopnia

**Program:**

Technologia Chemiczna

**Grupa przedmiotów:**

Obowiązkowe

**Kod przedmiotu:**

CH.TIK5003

**Semestr nominalny:**

5 / rok ak. 2019/2020

**Liczba punktów ECTS:**

3

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

1. godziny kontaktowe - 60 h, w tym:
a) obecność na wykładach - 15 h,
b) udział w ćwiczeniach - 30 h
c) konsultacje do wykładu i ćwiczeń - 15 h
2. zapoznanie się ze wskazaną literaturą - 10 h
3. wykonanie zadań indywidualnych i zespołowych -10 h
4. przygotowanie do kolokwium – 10h
Razem nakład pracy studenta: 90 h, co odpowiada 3 punktom ECTS.

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

1. obecność na wykładach - 15 h,
2. udział w ćwiczeniach - 30 h
3. udział konsultacjach - 15 h
Razem: 60 h, co odpowiada 2 punktom ECTS.

**Język prowadzenia zajęć:**

polski

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

Planowane zajęcia nie mają charakteru praktycznego (0 punktów ECTS).

**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:**

brak

**Cel przedmiotu:**

Po ukończeniu kursu student powinien: • mieć wiedzę teoretyczną na temat budowy faz krystalicznych, • umieć właściwie operować podstawowymi pojęciami krystalograficznymi i wykonać podstawowe obliczenia krystalograficzne • znać metody doświadczalne prowadzące do wyznaczenia struktury krystalicznej, • na podstawie literatury i innych źródeł zapoznać się samodzielnie z wybranym zagadnieniem

**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 oceny z prac domowych

**Egzamin:**

nie

**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:**

ch.pw.edu.pl

**Uwagi:**

## Charakterystyki przedmiotowe

### Profil ogólnoakademicki - wiedza

**Charakterystyka W01:**

zna teoretyczne podstawy opisu budowy faz krystalicznych

Weryfikacja:

kolokwium

**Powiązane charakterystyki kierunkowe:** K\_W01, K\_W02, K\_W03

**Powiązane charakterystyki obszarowe:**

**Charakterystyka W02:**

zna metody doświadczalne służące do charakteryzacji faz krystalicznych oraz pozwalające na wyznaczenie struktury krystalicznej

Weryfikacja:

kolokwium

**Powiązane charakterystyki kierunkowe:** K\_W05

**Powiązane charakterystyki obszarowe:**

### Profil ogólnoakademicki - umiejętności

**Charakterystyka U01:**

umie pozyskiwać i interpretować dane literaturowe oraz zgromadzone w bazach danych strukturalnych dotyczące wyników badań dyfrakcyjnych i oceniać ich rzetelność

Weryfikacja:

zadania indywidualne

**Powiązane charakterystyki kierunkowe:** K\_U01

**Powiązane charakterystyki obszarowe:**

**Charakterystyka U02:**

posiada praktyczną umiejętność opisu struktur krystalicznych i posługiwania się podstawowymi pojęciami krystalograficznymi zarówno w języku polskim jak i angielskim

Weryfikacja:

kolokwium

**Powiązane charakterystyki kierunkowe:** K\_U02, K\_U03

**Powiązane charakterystyki obszarowe:**

### Profil ogólnoakademicki - kompetencje społeczne

**Charakterystyka K01:**

ma umiejętności pozwalające na prowadzenie efektywnego procesu samokształcenia

Weryfikacja:

kolokwium

**Powiązane charakterystyki kierunkowe:** K\_K01

**Powiązane charakterystyki obszarowe:**

**Charakterystyka K02:**

posiada umiejętność pracy w zespole, do którego potrafi wnieść samodzielne myślenie

Weryfikacja:

zespołowe zadanie

**Powiązane charakterystyki kierunkowe:** K\_K05

**Powiązane charakterystyki obszarowe:**