

Opis przedmiotu			
Kod przedmiotu	1020-TC000-ISP-5004		
Nazwa przedmiotu	Podstawy krystalografii rentgenowskiej		
	Fundamentals of X-ray crystallography		
Wersja przedmiotu	2021/2022		
A. Usytuowanie przedmiotu w systemie studiów			
Poziom kształcenia	Studia I stopnia		
Forma i tryb prowadzenia studiów	Studia stacjonarne		
Kierunek studiów	Technologia Chemiczna		
Profil studiów	Ogólnoakademicki		
Specjalność	Przedmiot wspólny dla kierunku		
Jednostka prowadząca przedmiot	Wydział Chemiczny, Katedra Chemii Nieorganicznej		
Jednostka realizująca przedmiot (zlecenia międzywydziałowe)	Nie dotyczy		
Koordinator przedmiotu	dr hab. inż. Izabela Madura, profesor uczelni		
B. Ogólna charakterystyka przedmiotu			
Przynależność do grupy/bloku przedmiotów	Przedmioty kierunkowe		
Poziom przedmiotu	Poziom podstawowy		
Status przedmiotu	Przedmiot obowiązkowy		
Język prowadzenia zajęć	polski		
Usytuowanie przedmiotu w planie zajęć - semestr nominalny	5		
Usytuowanie realizacji przedmiotu w roku akademickim	Semestr zimowy		
Wymagania wstępne - formalne	brak		
Limit liczby studentów	brak		
C. Efekty uczenia się i sposób prowadzenia zajęć			
Cel przedmiotu	Zapoznanie studentów z podstawami teorii budowy faz krystalicznych i metodami doświadczalnymi prowadzącymi do wyznaczenia struktury krystalicznej związków chemicznych.		
	To acquaint students with the basics of the theory of crystal phase structure and experimental methods leading to the determination of the crystal structure of chemical compounds		
Efekty uczenia się (z podziałem na W, U i KS) wraz z odniesieniem do efektów uczenia się dla obszaru i kierunku			
<i>Nr efektu</i>	<i>Opis efektu</i>	<i>Odniesienie do charakterystyk efektów uczenia się</i>	<i>Odniesienie do efektów uczenia się w programie</i>
<i>Zakładane efekty uczenia się w zakresie wiedzy</i>			
W01	Posiada teoretyczne podstawy opisu budowy faz krystalicznych	I.P6S_WG.o III.P6S_WG	K_W01 K_W02 K_W03
	The student has a theoretical basis for describing the structure of crystalline phases		
W02	Zna metody doświadczalne służące do charakteryzacji faz krystalicznych oraz pozwalające na wyznaczenie struktury krystalicznej	I.P6S_WG.o	K_W05
	The student knows the experimental methods for the characterization of crystalline phases and for the determination of the crystal structure		
<i>Zakładane efekty uczenia się w zakresie umiejętności</i>			

U01	Potrafi pozyskiwać i interpretować dane literaturowe oraz zgromadzone w bazach danych strukturalnych dotyczące wyników badań dyfrakcyjnych i oceniać ich rzetelność	I.P6S_UW.o I.P6S_UK III.P6S_UW.o	K_U01			
	The student is able to acquire and interpret literature data and data collected in structural databases (obtained from the diffraction experiments) and assess their reliability					
U02	Posiada praktyczną umiejętność opisu struktur krystalicznych i posługiwania się podstawowymi pojęciami krystalograficznymi zarówno w języku polskim jak i angielskim	I.P6S_UK I.P6S_UW.o	K_U02 K_U03			
	The student has a practical ability to describe crystal structures and use the basic terms of crystallography in both Polish and English					
U03	Potrafi scharakteryzować różne stany materii wykorzystując teorie używane do ich opisu	I.P6S_UW.o III.P6S_UW.o	K_U14			
	The student can characterize various states of matter using theories used to describe them					
U04	Potrafi pracować w zespole i ma świadomość odpowiedzialności za wspólnie realizowane zadania, związane z pracą zespołową.	I.P6S_UO	K_U27			
	He/she is able to work in a team and is aware of the responsibility for collaborative tasks related to teamwork.					
<i>Zakładane efekty uczenia się w zakresie kompetencji społecznych</i>						
KS01	Ma świadomość poziomu swojej wiedzy i umiejętności, rozumie potrzebę ciągłego dokształcania się - podnoszenia kompetencji zawodowych i osobistych, potrafi określić kierunki dalszego uczenia się i realizować proces samokształcenia.	I.P6S_KK	K_K01			
	The student is aware of the level of his knowledge and skills, understands the need for constant learning - improving professional and personal competences, is able to determine directions for further learning and implement the process of self-education.					
Forma zajęć dydaktycznych i ich wymiar (liczba godzin)						
		Wykład	Ćwiczenia	Laboratorium	Projekt/laboratorium komputerowe	Seminarium
W planie tygodniowym		1	2			
W całym semestrze		15	30			
Treści kształcenia – oddzielnie dla każdej z formy zajęć dydaktycznych						
Treści kształcenia – oddzielnie dla każdej z formy zajęć dydaktycznych		<i>Wykład:</i>				
		<ol style="list-style-type: none"> 1. Definicja kryształu i wprowadzenie podstawowych pojęć: sieć przestrzenna i sieć krystaliczna, komórka elementarna, współrzędne krystalograficzne, proste sieciowe, płaszczyzny sieciowe. 2. Ważniejsze wzory krystalograficzne 3. Rzut stereograficzny. 4. Operacje i elementy symetrii oraz grupy punktowe symetrii (klas symetrii). 5. Opis morfologii kryształu. Postacie proste i złożone kryształów. 6. Układy krystalograficzne. 7. Symetria translacyjna sieci. Sieci Bravais'ego. 8. Strukturalne elementy symetrii. 9. Grupy przestrzenne - charakterystyka wybranych prostych grup przestrzennych. 10. Źródła promieniowania rentgenowskiego i jego oddziaływanie z materią. 11. Warunki dyfrakcji na kryształach. Równania Lauego i Braggów. 12. Sieć odwrotna a geometria dyfrakcji - konstrukcja Ewalda. 13. Dyfrakcyjna sieć odwrotna - czynnik struktury, wygaszania systematyczne, prawo Friedla, grupy dyfrakcyjne Lauego. 14. Problem fazowy i metody rozwiązywania struktury kryształu. 15. Udokładnianie modelu struktury. 16. Interpretacja danych strukturalnych. 17. Doświadczalne metody krystalografii rentgenowskiej - badania monokryształów i polikryształów. 18. Bazy danych krystalograficznych 				
		<i>Ćwiczenia:</i>				
		Ćwiczenia są prowadzone jako zajęcia uzupełniające i wspomagające wykład z podstaw krystalografii rentgenowskiej. Rozwiązując proste problemy krystalograficzne studenci				

	<p>rozwijają wyobraźnię przestrzenną i zdobywają praktyczne umiejętności posługiwania się pojęciami z krytalografii geometrycznej i rentgenowskiej. Treści merytoryczne ćwiczeń obejmują:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Wyznaczanie wskaźników płaszczyzn oraz prostych sieciowych. 2. Obliczenia geometryczne w układach współrzędnych krytalograficznych. 3. Rzut stereograficzny ścian kryształu i wyznaczanie klasy krytalograficznej. Wykorzystanie siatki Wulfa i projekcje wybranych figur (monokryształów). 4. Wyznaczanie grupy punktowej symetrii dla wybranych cząsteczek. 5. Analiza morfologiczna wybranych kryształów. 6. Sieci Bravais'ego i strukturalne elementy symetrii oraz ich złożenie. 7. Międzynarodowe symbole grup przestrzennych i określanie na tej podstawie układu krytalograficznego, klasy krytalograficznej oraz operacji symetrii. 8. Wyznaczanie elementów symetrii i zespołów pozycji symetrycznie równoważnych dla wybranych grup przestrzennych. 9. Zapoznanie studentów z przebiegiem pomiaru dyfrakcyjnego dla monokryształu na czterokołowym dyfraktometrze z detektorem CCD oraz procedurą wyznaczania struktury kryształu. 10. Określanie typu sieci Bravais, klasy Lauego oraz grupy przestrzennej na podstawie otrzymanych obrazów dyfrakcyjnych sieć odwrotnych. 11. Zapoznanie z przebiegiem pomiaru dyfrakcyjnego próbek polikrytalicznych. Wykorzystanie równania Braggów w obliczeniach dla dyfraktogramów proszkowych. 12. Ćwiczenia z wykorzystaniem strukturalnych baz danych ICSD/CSD. 13. Analiza strukturalna i prezentacja jej wyników. Opis budowy cząsteczek i ich upakowania w sieci krytalicznej. Graficzna prezentacja struktur. Interpretacja warunków pomiaru oraz uzyskanych wskaźników rozbieżności
	<ol style="list-style-type: none"> 1. Crystal definition and introduction of basic concepts: 3D lattice and crystal lattice, unit cell, crystallographic coordinates, lattice direction, lattice planes. 2. Important crystallographic equations 3. Stereographic projection. 4. Operations and symmetry elements, and symmetry point groups (symmetry classes). 5. Description of crystal morphology. Simple and complex forms of crystals. 6. Crystallographic systems. 7. Translational symmetry. Bravais lattices. 8. Structural symmetry elements. 9. Space symmetry groups - characteristics of selected simple groups. 10. Sources of X-ray radiation and its interaction with matter. 11. Crystal diffraction conditions. Laue and Bragg equations. 12. The reciprocal lattice and the geometry of diffraction - Ewald's construction. 13. Diffractive reciprocal lattice - structure factor, systematic extinctions, Friedel's law, Laue diffraction groups. 14. Phase problem and methods of crystal structure solution. 15. Refinement of the structure model. 16. Interpretation of crystal data. 17. Experimental methods of X-ray crystallography - single crystals and polycrystals. 18. Crystallographic databases <p><i>Classes:</i></p> <p>Classes are conducted as complementary and supporting lectures on the basics of X-ray crystallography. By solving simple crystallographic problems, students develop spatial imagination and acquire practical skills in using the concepts of geometric and X-ray crystallography. The content of the exercises includes:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Determination of planes and lattice directions indices. 2. Geometric calculations in crystallographic coordinate systems. 3. Stereographic projection of the crystal faces and determination of the crystallographic class. The use of the Wulf net and projections of selected figures (single crystals). 4. Determination of the symmetry point group for selected molecules. 5. Morphological analysis of selected crystals. 6. Bravais networks and structural symmetry elements and their composition. 7. International symbols of space groups and on this basis determination of the crystallographic system, crystallographic class and symmetry operation. 8. Determination of symmetry elements and sets of symmetrically equivalent positions for selected space groups. 9. To acquaint students with the course of diffraction measurement for a single crystal on a four-wheel diffractometer with a CCD detector and the procedure of crystal structure determination.

	<p>10. Determination of Bravais lattice type, Laue class and space group on the basis of obtained inverse lattice diffraction images.</p> <p>11. Acquainting with the course of diffraction measurement of polycrystalline samples. Using the Braggs equation in calculations for powder diffraction patterns.</p> <p>12. Exercises with the use of structural ICSD / CSD databases.</p> <p>13. Structural analysis and presentation of its results. Description of the structure of molecules and their packing in the crystal lattice. Graphical presentation of structures. Interpretation of the measurement conditions and the obtained indicators of divergence.</p>
Metody kształcenia	<p><i>Wykład:</i> Wykład z prezentacją multimedialną</p> <p><i>Ćwiczenia:</i> Wykonanie zadań samodzielnie i w grupach</p>
Metody sprawdzania efektów uczenia się (dla każdej pozycji efektów uczenia się, w tym, dla umiejętności odwołanie do konkretnych zadań projektowych, laboratoryjnych itp.)	
Nr efektu	Sposób sprawdzania
Zakładane efekty uczenia się w zakresie wiedzy	
W01	kolokwium pisemne
W02	kolokwium pisemne
Zakładane efekty uczenia się w zakresie umiejętności	
U01	kolokwium pisemne
U02	kolokwium pisemne
U03	kolokwium pisemne
U04	ocena aktywności w trakcie zajęć
Zakładane efekty uczenia się w zakresie kompetencji społecznych	
KS01	kolokwium pisemne, ocena aktywności w trakcie zajęć
Metody oceny	
	<p><i>Wykład i Ćwiczenia:</i></p> <p>Ocena za aktywności w trakcie zajęć (0-5 pkt)</p> <p>5 kolokwium pisemnych (łącznie 35pkt)</p> <p>Ocena końcowa będzie obliczana z sumy punktów uzyskanych z ćwiczeń i wykładu (maksymalna liczba punktów do zdobycia to 40): 50-60% - 3,0; 61-70% - 3,5; 71-80% - 4,0; 81-90% - 4,5%; 91-100% - 5,0.</p> <p>W przypadku uzyskania <50% punktów w trakcie semestru student ma prawo do kolokwium poprawkowego, z którego student może otrzymać tylko jedną z następujących ocen: 2,0 (< 50% punktów), 3,0 (50% - 70%) lub 3,5 (> 71% pkt.).</p>
Egzamin	Nie
Literatura	<ol style="list-style-type: none"> Z. Trzaska-Durski, H. Trzaska-Durska "Podstawy krystalografii strukturalnej i rentgenowskiej", PWN, Warszawa, 1994. Z. Bojarski, M. Gigla, K. Stróż, M. Surowiec "Krystalografia - podręcznik wspomagany komputerowo", PWN, Warszawa, 2001, 2006. P. Luger, "Rentgenografia strukturalna monokryształów" PWN 1989. M. van Meerssche, J. Feneau-Dupont "Krystalografia i chemia strukturalna", PWN, Warszawa, 1984. W. Massa, "Crystal Structure Determination", 2nd ed., Springer Verlag 2004. International Tables for Crystallography (wersja on-line) https://symotter.org/ https://spacegroups.symotter.org/
Witryna www przedmiotu	http://janzac.ch.pw.edu.pl/krystalografia/
D. Nakład pracy studenta	
Liczba punktów ECTS	3
Liczba godzin pracy studenta związanych z osiągnięciem efektów uczenia się	<ol style="list-style-type: none"> 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 zapoznanie się ze wskazaną literaturą i materiałami na stronie www- 10 h wykonanie zadań treningowych -10 h przygotowanie do kolokwium- 10h <p>Razem nakład pracy studenta: 90 h, co odpowiada 3 punktom ECTS</p>
Liczba punktów ECTS na zajęciach wymagających	<ol style="list-style-type: none"> obecność na wykładach - 15 h, udział w ćwiczeniach - 30 h

bezpośredniego udziału nauczycieli akademickich	3. udział konsultacjach - 15 h Razem: 60 h, co odpowiada 2 punktom ECTS
Liczba punktów ECTS, którą student uzyskuje w ramach zajęć o charakterze praktycznym	0
E. Informacje dodatkowe	
Uwagi	O ile nie powoduje to zmian w zakresie powiązań danego przedmiotu z efektami uczenia się określonymi dla programu studiów w treściach kształcenia mogą być wprowadzane na bieżąco zmiany związane z uwzględnieniem najnowszych osiągnięć naukowych.
Data aktualizacji	24-10-2022