

**AGH**AGH UNIVERSITY OF SCIENCE
AND TECHNOLOGY

Nazwa modułu: Krystalografia i krystalochemia

Rok akademicki: 2012/2013 Kod: CIM-1-303-s Punkty ECTS: 7

Wydział: Inżynierii Materiałowej i Ceramiki

Kierunek: Inżynieria Materiałowa Specjalność: —

Poziom studiów: Studia I stopnia Forma i tryb studiów: Stacjonarne

Język wykładowy: Polski Profil kształcenia: Ogólnoakademicki (A) Semestr: 3

Strona www: <http://kckizw.ceramika.agh.edu.pl>

Osoba odpowiedzialna: prof. dr hab. Handke Mirosław (mhandke@agh.edu.pl)

Osoby prowadzące: dr inż. Adamczyk Anna (aadamcz@agh.edu.pl)
dr Handke Bartosz (bhandke@agh.edu.pl)
prof. dr hab. Handke Mirosław (mhandke@agh.edu.pl)
dr Jastrzębski Witold (witjas@agh.edu.pl)
dr inż. Rokita Magdalena (rokita@agh.edu.pl)

Opis efektów kształcenia dla modułu zajęć

Kod EKM	Student, który zaliczył moduł zajęć wie/umie/potrafi	Powiązania z EKK	Sposób weryfikacji efektów kształcenia (forma zaliczeń)
Wiedza			
M_W001	Student zna podstawowe pojęcia krystalografii oraz symbolikę grup punktowych i przestrzennych, ze szczególnym uwzględnieniem symboliki międzynarodowej	IM1A_W06	Aktywność na zajęciach, Kolokwium, Egzamin, Wykonanie ćwiczeń, Zaangażowanie w pracę zespołu
M_W002	Student ma wiedzę z dziedziny krystalochemii, zna zasady podziału struktur na homo/heterodesmiczne; jonowe/kowalencyjne/metaliczne/molekularne; jonowe izo/mezo/anizodesmiczne	IM1A_W03, IM1A_W06	Aktywność na zajęciach, Egzamin, Kolokwium, Wykonanie ćwiczeń
Umiejętności			
M_U001	Student potrafi stosować wskaźniki (hkl) i [uvw], wyszukiwać elementy symetrii kryształu, stosować symbolikę grup punktowych i przestrzennych	IM1A_U07, IM1A_U09	Aktywność na zajęciach, Egzamin, Kolokwium, Wykonanie ćwiczeń, Zaangażowanie w pracę zespołu
M_U002	Student potrafi klasyfikować struktury krystaliczne oraz tworzyć modele struktur krystalicznych	IM1A_U07, IM1A_U09	Aktywność na zajęciach, Egzamin, Kolokwium, Wykonanie ćwiczeń

Kompetencje społeczne			
M_K001	Student ma świadomość odpowiedzialności za pracę własną oraz pracę w grupie	IM1A_K03	Aktywność na zajęciach, Egzamin, Kolokwium, Zaangażowanie w pracę zespołu
M_K002	Student rozumie potrzebę i zna możliwości doksztalcania się różnymi metodami, również z zastosowaniem źródeł internetowych	IM1A_K01	Aktywność na zajęciach, Egzamin, Kolokwium, Wykonanie ćwiczeń

Matryca efektów kształcenia w odniesieniu do form zajęć

Kod EKM	Student, który zaliczył moduł zajęć wie/umie/potrafi	Forma zajęć										
		Wykład	Ćwiczenia audytoryjne	Ćwiczenia laboratoryjne	Ćwiczenia projektowe	Konwersatorium	Zajęcia seminaryjne	Zajęcia praktyczne	Zajęcia terenowe	Zajęcia warsztatowe	Inne	E-learning
Wiedza												
M_W001	Student zna podstawowe pojęcia krystalografii oraz symbolikę grup punktowych i przestrzennych, ze szczególnym uwzględnieniem symboliki międzynarodowej	+	-	-	-	-	+	-	-	-	-	-
M_W002	Student ma wiedzę z dziedziny krystalochemii, zna zasady podziału struktur na homo/heterodesmiczne; jonowe/kowalencyjne/metaliczne/molekularne; jonowe izo/mezo/anizodesmiczne	+	-	-	-	-	+	-	-	-	-	-
Umiejętności												
M_U001	Student potrafi stosować wskaźniki (hkl) i [uvw], wyszukiwać elementy symetrii kryształu, stosować symbolikę grup punktowych i przestrzennych	+	-	-	-	-	+	-	-	-	-	-
M_U002	Student potrafi klasyfikować struktury krystaliczne oraz tworzyć modele struktur krystalicznych	+	-	-	-	-	+	-	-	-	-	-
Kompetencje społeczne												
M_K001	Student ma świadomość odpowiedzialności za pracę własną oraz pracę w grupie	+	-	-	-	-	+	-	-	-	-	-
M_K002	Student rozumie potrzebę i zna możliwości doksztalcania się różnymi metodami, również z zastosowaniem źródeł internetowych	+	-	-	-	-	+	-	-	-	-	-

Treść modułu zajęć (program wykładów i pozostałych zajęć)

Wykład

Krystalografia -geometria i struktura kryształu; krystalochemia ogólna i opisowa typów struktur

1. Wprowadzenie do krystalografii.
2. Teoria sieci krystalicznej.
3. Przekształcenia izometryczne w sieci krystalicznej.
4. Symetria punktowa.
5. Otwarte i wtórne operacje symetrii.
6. Symetria w sieci przestrzennej.
7. Struktury kryształów.
8. Dyfraktometria rentgenowska (XRD).
9. Wprowadzenie do krystalochemii.
10. Kryształy kowalencyjne.
11. Kryształy jonowe.
12. Krzemiany jako mezodesmiczne struktury jonowe.
13. Metale i kryształy molekularne.
14. Ciekłe kryształy i szkło.

Zajęcia seminaryjne

Symetria opisowa i analityczna, generowanie modeli struktur w oparciu o symbolikę H-M grup przestrzennych, tablice Wyckoff'a i charakter wiązań

1. Kryształ w ujęciu makro i mikroskopowym.
2. Opis ścian i krawędzi kryształu (płaszczyzn i prostych sieciowych) – wskaźniki (hkl) i [uvw].
3. Elementy symetrii kryształu.
4. Macierze przekształceń – analiza.
5. Generowanie grup punktowych metodą analityczną.
6. Projekcja elementów symetrii kryształu.
7. Typy komórek Bravais.
8. Grupy przestrzenne.
9. Rentgenografia doświadczalną ilustracją krystalografii.
10. Tablice Wyckoff'a.
11. Podstawowe pojęcia krystalochemii – elektroujemność, promień jonowy, liczba koordynacyjna, wytrzymałość wiązań.
12. Podział struktur na jonowe, kowalencyjne i metaliczne.
13. Reguły Paulinga, struktury izo, anizo i mezodesmiczne.
14. Sposoby wizualizacji struktur kryształów.
15. Komputerowe generowanie struktur krystalicznych.

Sposób obliczania oceny końcowej

Ocena z zajęć seminaryjnych ($S = (K_1 + K_2 + \dots + K_n)/n$, gdzie n - ilość kolokwiów, K_1, K_2, \dots, K_n - oceny z kolokwiów cząstkowych) oraz z egzaminu końcowego (E) są obliczane następująco: procent uzyskanych punktów jest przeliczany na ocenę zgodnie z regulaminem studiów AGH.

Ocena końcowa (OK) jest obliczana wg. wzoru:

$OK = 0,6 \cdot E + 0,4 \cdot S$ (S, E - oceny uzyskane w pierwszym terminie lub średnia arytmetyczna z ocen uzyskanych we wszystkich terminach, odpowiednio E i S),

i zaokrąglana dla $OK_{3,25}$ (pod warunkiem uzyskania pozytywnych ocen S oraz E) - 3,0;

dla $3,25 < OK_{3,75} < 3,5$;

dla $3,75 < OK_{4,25} < 4,0$;

dla $4,25 < OK_{4,75} < 4,5$;

dla $OK > 4,75 - 5,0$.

Wymagania wstępne i dodatkowe

Student powinien mieć opanowany program matematyki oraz chemii, ze szczególnym uwzględnieniem podstaw teorii grup i rachunku macierzowego oraz zagadnień dotyczących rodzajów wiązań chemicznych, jak również powinien, przy pomocy instrukcji, radzić sobie z obsługą prostych programów komputerowych i korzystaniem z baz danych.

Zalecana literatura i pomoce naukowe

- 1.M. Handke, M. Rokita, A. Adamczyk „Krystalografia i krystalochemia dla ceramików”
- 2.J. Chojnacki „Elementy krystalografii chemicznej i fizycznej” PWN
- 3.Z. Bojarski, H. Habla, M. Surowiec „Materiały do nauki krystalografii” PWN
- 4.Z. Bojarski, M. Gigla, K. Stróż, M. Surowiec „Krystalografia”
- 5.T. Penkala „Zarys krystalografii” PWN
- 6.Z. Trzaska Durski, H. Trzaska Durska „Podstawy krystalografii strukturalnej i rentgenowskiej” PWN
- 7.M. Van Meerssche, J. Feneau-Dupont „Krystalografia i chemia strukturalna” PWN
- 8.<http://kckizw.ceramika.agh.edu.pl/>
- 9.www.iucr.org
- 10.www.cryst.ehu.es
- 11.www.crystallography.net

Publikacje naukowe osób prowadzących zajęcia związane z tematyką modułu

Nie podano dodatkowych publikacji

Informacje dodatkowe

Materiały pomocnicze są dostępne na stronie internetowej: <http://kckizw.ceramika.agh.edu.pl/>.

W trakcie zajęć seminaryjnych przeprowadzane są m.in. ćwiczenia indywidualne z symetrii z zastosowaniem modeli krystalograficznych oraz zajęcia komputerowe z wykorzystania baz danych krystalograficznych i generowania struktur krystalicznych.

Nakład pracy studenta (bilans punktów ECTS)

Forma aktywności studenta	Obciążenie studenta
Udział w wykładach	45 godz
Egzamin lub kolokwium zaliczeniowe	6 godz
Udział w zajęciach seminaryjnych	45 godz
Przygotowanie do zajęć	15 godz
Samodzielne studiowanie tematyki zajęć	80 godz
Dodatkowe godziny kontaktowe z nauczycielem	10 godz
Sumaryczne obciążenie pracą studenta	201 godz
Punkty ECTS za moduł	7 ECTS