

**AGH**AGH UNIVERSITY OF SCIENCE
AND TECHNOLOGY

Nazwa modułu: Metody analizy strukturalnej i dyfrakcyjnej układów aperiodycznych

Rok akademicki: 2017/2018 Kod: JFT-1-045-s Punkty ECTS: 2

Wydział: Fizyki i Informatyki Stosowanej

Kierunek: Fizyka Techniczna Specjalność: —

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

Język wykładowy: Polski Profil kształcenia: Ogólnoakademicki (A) Semestr: 0

Strona www: —

Osoba odpowiedzialna: dr inż. Strzałka Radosław (Radoslaw.Strzalka@fis.agh.edu.pl)

Osoby prowadzące: dr inż. Strzałka Radosław (Radoslaw.Strzalka@fis.agh.edu.pl)

Krótką charakterystyka modułu

Zajęcia mają na celu wprowadzenie w tematykę układów aperiodycznych i poznanie podstawowych narzędzi analizy strukturalnej i dyfrakcyjnej, na przykładzie modelowych kwazikryształów i innych układów.

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 opis struktury atomowej i obrazu dyfrakcyjnego układów aperiodycznych w podejściu wielowymiarowym i statystycznym.	FT1A_W05, FT1A_W05, FT1A_W06, FT1A_W06, FT1A_W09	Zaliczenie laboratorium, Wykonanie ćwiczeń laboratoryjnych, Udział w dyskusji, Aktywność na zajęciach
M_W002	Student zna narzędzia i metody analizy układów aperiodycznych.	FT1A_W05, FT1A_W05, FT1A_W06, FT1A_W06, FT1A_W09	Zaliczenie laboratorium, Wykonanie ćwiczeń laboratoryjnych, Aktywność na zajęciach
Umiejętności			

M_U001	Student potrafi zaprogramować metody analizy strukturalnej i dyfrakcyjnej układów aperiodycznych, wygenerować dane numeryczne i je opracować, a także opracować dane eksperymentalne (na przykładzie kwazikryształów, ciągów aperiodycznych 1D i struktur modulowanych).	FT1A_U11, FT1A_U08, FT1A_U01, FT1A_U10, FT1A_U04, FT1A_U02, FT1A_U04, FT1A_U01, FT1A_U02	Zaliczenie laboratorium, Wykonanie ćwiczeń laboratoryjnych, Aktywność na zajęciach
Kompetencje społeczne			
M_K001	Student posiada umiejętność zwięzłego i precyzyjnego opisanie własnych rozwiązań oraz komunikatywnego ich przedstawienia.	FT1A_K09, FT1A_K04	Udział w dyskusji, Studium przypadków, Aktywność na zajęciach

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 opis struktury atomowej i obrazu dyfrakcyjnego układów aperiodycznych w podejściu wielowymiarowym i statystycznym.	+	-	+	-	-	-	-	-	-	-	-
M_W002	Student zna narzędzia i metody analizy układów aperiodycznych.	+	-	+	-	-	-	-	-	-	-	-
Umiejętności												
M_U001	Student potrafi zaprogramować metody analizy strukturalnej i dyfrakcyjnej układów aperiodycznych, wygenerować dane numeryczne i je opracować, a także opracować dane eksperymentalne (na przykładzie kwazikryształów, ciągów aperiodycznych 1D i struktur modulowanych).	-	-	+	-	-	-	-	-	-	-	-
Kompetencje społeczne												

M_K001	Student posiada umiejętność zwięzłego i precyzyjnego opisanie własnych rozwiązań oraz komunikatywnego ich przedstawienia.	+	-	+	-	-	-	-	-	-	-	-
--------	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---

Treść modułu zajęć (program wykładów i pozostałych zajęć)

Wykład

Tematyka wykładu:

1. Periodyczność vs. aperiodyczność (komórka elementarna, zabronione osie symetrii, pokrycie aperiodyczne, historia odkrycia kwazikryształów)
2. Obraz dyfrakcyjny (symetria, indeksowanie)
3. Opis strukturalny: metoda statystyczna i wielowymiarowa (idea obu metod, modelowanie)
4. Modele strukturalne (kwazikryształy dekadonalne i ikozaedryczne)
5. Narzędzia do modelowania (odzyskiwanie fazy, udokładnianie struktury)

Ćwiczenia laboratoryjne

Ciąg Fibonacciego – generowanie i numeryczny obraz dyfrakcyjny:

Generowanie ciągu aperiodycznego, obliczenie obrazu dyfrakcyjnego: numeryczna transformata Fouriera, wskaźnikowanie obrazu dyfrakcyjnego, skalowanie, generowanie ciągu Fibonacciego w metodzie wielowymiarowej.

Metoda wielowymiarowa – na przykładzie ciągu Fibonacciego:

Baza sieci prostej i odwrotnej, idea powierzchni atomowej, generowanie ciągu Fibonacciego, "teoretyczny" obraz dyfrakcyjny.

Metoda statystyczna – średnia komórka elementarna dla ciągu Fibonacciego:

Generowanie rozkładu statystycznego (średniej komórki elementarnej), własności rozkładu statystycznego, skalowanie, czynnik strukturalny i obraz dyfrakcyjny.

Obliczenia analityczne w metodzie statystycznej (zajęcia rachunkowe):

Wyprowadzenie czynnika strukturalnego, skalowanie, średnia komórka elementarna.

Inne jednowymiarowe układy aperiodyczne i analogie:

Ciąg Thue-Morse'a, struktura niewspółmiernie modulowana, analogia: siatka dyfrakcyjna.

Kwazikryształ dwuwymiarowy (dekagonalny):

Pokrycie Penrose'a, obliczenia numeryczne obrazu dyfrakcyjnego, średnia komórka elementarna.

Kwazikryształ trójwymiarowy (ikozaedryczny):

Pokrycie Ammanna, średnia komórka elementarna i powierzchnia atomowa, wskaźnikowanie obrazu dyfrakcyjnego proszkowego.

Gotowe narzędzia do analizy układów aperiodycznych:

Dedykowane pakiety oprogramowania, narzędzia do wizualizacji struktury, narzędzia do odzyskiwania fazy czynnika strukturalnego (QUASI, VESTA, Superflip, lodemac itp.).

Sposób obliczania oceny końcowej

Ocena końcowa będzie wystawiona na podstawie aktywności studentów podczas zajęć komputerowych, stopnia realizacji przez nich założonych celów i samodzielności.

Wymagania wstępne i dodatkowe

Student powinien znać w zakresie podstawowym dowolny język programowania. Wskazana, lecz niekonieczna jest znajomość podstaw krytalografii.

Zalecana literatura i pomoce naukowe

1. W. Steurer, S. Deloudi, *Crystallography of Quasicrystals. Concepts, Methods and Structures*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg 2009.
2. M. Baake, U. Grimm, *Aperiodic Order. Volume 1: A Mathematical Invitation*, Cambridge University Press 2013
3. R. Strzałka, I. Bugański, J. Wolny, *Statistical Approach to Diffraction of Periodic and Non-Periodic Crystals - Review*, Crystals 6 (2016) 104-123.
4. J. Wolny, I. Bugański, R. Strzałka, Model refinement of quasicrystals, *Crystallography Reviews*. (2017) 1-43

Publikacje naukowe osób prowadzących zajęcia związane z tematyką modułu

<http://bpp.agh.edu.pl/autor/strzalka-radoslaw-06874>

Informacje dodatkowe

Wiedza i umiejętności nabyte po ukończeniu kursu pozwalają podjąć pracę badawczą w tematyce układów aperiodycznych na poziomie pracy inżynierskiej i magisterskiej.

Obecność na ćwiczeniach laboratoryjnych jest obowiązkowa. Student może z usprawiedliwieniem opuścić dwoje zajęć. W razie nieobecności należy wyrównać zaległości w formie samodzielnego opracowania tematu omawianego podczas opuszczonych zajęć.

Nakład pracy studenta (bilans punktów ECTS)

Forma aktywności studenta	Obciążenie studenta
Udział w wykładach	10 godz
Udział w ćwiczeniach laboratoryjnych	20 godz
Przygotowanie do zajęć	20 godz
Samodzielne studiowanie tematyki zajęć	10 godz
Sumaryczne obciążenie pracą studenta	60 godz
Punkty ECTS za moduł	2 ECTS