

**AGH**AGH UNIVERSITY OF SCIENCE
AND TECHNOLOGY

Nazwa modułu zajęć: Krystalografia i krystalochemia

Rok akademicki: 2019/2020 Kod: CIMT-1-303-s Punkty ECTS: 7

Wdział: Inżynierii Materiałowej i Ceramiki

Kierunek: Inżynieria Materiałowa Specjalność: —

Poziom studiów: Studia I stopnia Forma studiów: Stacjonarne

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

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

Prowadzący moduł: dr inż. Rokita Magdalena (rokita@agh.edu.pl)

Treści programowe zapewniające uzyskanie efektów uczenia się dla modułu zajęć

Moduł zapoznaje z symetrią kryształów, grupami punktowymi i przestrzennymi. Wprowadza krystalochemiczny podział struktur krystalicznych i zapoznaje z możliwościami generowania struktur.

Opis efektów uczenia się dla modułu zajęć

Kod MEU	Student, który zaliczył moduł zajęć zna i rozumie/potrafi/jest gotów do	Powiązania z KEU	Sposób weryfikacji i oceny efektów uczenia się osiągniętych przez studenta w ramach poszczególnych form zajęć i dla całego modułu zajęć
Wiedza: zna i rozumie			
M_W001	Student zna podstawowe pojęcia krystalografii oraz symbolikę grup punktowych i przestrzennych, ze szczególnym uwzględnieniem symboliki międzynarodowej	IMT1A_W03	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	IMT1A_W01, IMT1A_W03	Aktywność na zajęciach, Egzamin, Kolokwium, Wykonanie ćwiczeń
Umiejętności: potrafi			
M_U001	Student potrafi stosować wskaźniki (hkl) i [uvw], wyszukiwać elementy symetrii kryształu, stosować symbolikę grup punktowych i przestrzennych	IMT1A_U05, IMT1A_U02	Aktywność na zajęciach, Egzamin, Kolokwium, Wykonanie ćwiczeń, Zaangażowanie w pracę zespołu

M_U002	Student potrafi klasyfikować struktury krystaliczne oraz tworzyć modele struktur krystalicznych	IMT1A_U05, IMT1A_U02	Aktywność na zajęciach, Egzamin, Kolokwium, Wykonanie ćwiczeń
Kompetencje społeczne: jest gotów do			
M_K001	Student ma świadomość odpowiedzialności za pracę własną oraz pracę w grupie	IMT1A_K02	Aktywność na zajęciach, Egzamin, Kolokwium, Zaangażowanie w pracę zespołu
M_K002	Student rozumie potrzebę i zna możliwości dokształcania się różnymi metodami, również z zastosowaniem źródeł internetowych	IMT1A_K01	Aktywność na zajęciach, Egzamin, Kolokwium, Wykonanie ćwiczeń

Liczba godzin zajęć w ramach poszczególnych form zajęć

Suma	Forma zajęć dydaktycznych										
	Wykład	Ćwiczenia audytoryjne	Ćwiczenia laboratoryjne	Ćwiczenia projektowe	Konwersatorium	Zajęcia seminaryjne	Zajęcia praktyczne	Zajęcia terenowe	Zajęcia warsztatowe	Prace kontrolne i przejściowe	Lektorat
90	45	0	0	0	0	45	0	0	0	0	0

Matryca kierunkowych efektów uczenia się w odniesieniu do form zajęć i sposobu zaliczenia, które pozwalają na ich uzyskanie

Kod MEU	Student, który zaliczył moduł zajęć zna i rozumie/potrafi/jest gotów do	Forma zajęć dydaktycznych										
		Wykład	Ćwiczenia audytoryjne	Ćwiczenia laboratoryjne	Ćwiczenia projektowe	Konwersatorium	Zajęcia seminaryjne	Zajęcia praktyczne	Zajęcia terenowe	Zajęcia warsztatowe	Prace kontrolne i przejściowe	Lektorat
Wiedza: zna i rozumie												
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: potrafi												

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: jest gotów do												
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	+	-	-	-	-	+	-	-	-	-	-

Nakład pracy studenta (bilans punktów ECTS)

Forma aktywności studenta	Obciążenie studenta
Udział w zajęciach dydaktycznych/praktyka	90 godz
Przygotowanie do zajęć	15 godz
Samodzielne studiowanie tematyki zajęć	80 godz
Egzamin lub kolokwium zaliczeniowe	2 godz
Dodatkowe godziny kontaktowe	5 godz
Sumaryczne obciążenie pracą studenta	192 godz
Punkty ECTS za moduł	7 ECTS

Pozostałe informacje

Szczegółowe treści kształcenia w ramach poszczególnych form zajęć (szczegółowy program wykładów i pozostałych zajęć)

Wykład

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

1. Wprowadzenie do krystalografii.
2. Prawa Krystalografii. Projekcja stereograficzna
3. Symetria punktowa; klasy symetrii, symbolika międzynarodowa Klas symetrii.
4. Przegląd klas symetrii punktowej.
5. Symbolika Schoenfliesa grup punktowych.
6. Otwarte i wtórne operacje symetrii.
7. Symetria w sieci przestrzennej.
8. Podstawy dyfraktometrii rentgenowskiej (XRD). Struktury kryształów a Tablice

Wyckoff'a.

9. Wprowadzenie do krystalochemii.
10. Kryształy kowalencyjne i metaliczne.
11. Kryształy jonowe. Krzemiany
12. Kryształy molekularne, ciekłe kryształy, szkło.
13. Powiązanie struktury i wybranych właściwości ciał krystalicznych cz. 1.
14. Powiązanie struktury i wybranych właściwości ciał krystalicznych cz. 2.
15. Podsumowanie materiału.

Zajęcia seminaryjne

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

1. Kryształy w ujęciu makro i mikroskopowym.
2. Opis ścian i krawędzi kryształu (płaszczyzn i prostych sieciowych) – wskaźniki (hkl) i [uvw].
3. Projekcja stereograficzna ścian kryształu.
4. Elementy symetrii kryształu. Rozróżnianie układów krystalograficznych na podstawie elementów symetrii.
5. Grupy punktowe – zapis międzynarodowy.
6. Macierze przekształceń – analiza.
7. Generowanie grup punktowych metodą analityczną.
8. Przekształcenia otwarte i odpowiadające im elementy symetrii.
10. Tablice Wyckoff'a – wstęp i interpretacja.
11. Tablice Wyckoff'a – generowanie prostych grup przestrzennych.
12. Podstawy krystalochemii.
13. Sposoby wizualizacji struktur kryształów.
14. Komputerowe generowanie struktur krystalicznych.
15. Zajęcia zaliczeniowe; repetytorium.

Metody i techniki kształcenia:

Wykład: Treści prezentowane na wykładzie są przekazywane w formie prezentacji multimedialnej w połączeniu z klasycznym wykładem tablicowym wzbogaconymi o pokazy odnoszące się do prezentowanych zagadnień.

Zajęcia seminaryjne: Na zajęciach seminaryjnych podstawą jest prezentacja multimedialna oraz ustna prowadzona przez studentów. Kolejnym ważnym elementem kształcenia są odpowiedzi na powstałe pytania, a także dyskusja studentów nad prezentowanymi treściami.

Warunki i sposób zaliczenia poszczególnych form zajęć, w tym zasady zaliczeń poprawkowych, a także warunki dopuszczenia do egzaminu:

Nie określono

Zasady udziału w poszczególnych zajęciach, ze wskazaniem, czy obecność studenta na zajęciach jest obowiązkowa:

Wykład:

– Obecność obowiązkowa: Nie

– Zasady udziału w zajęciach: Studenci uczestniczą w zajęciach poznając kolejne treści nauczania zgodnie z sylabusem przedmiotu. Studenci winni na bieżąco zadawać pytania i wyjaśniać wątpliwości. Rejestracja audiowizualna wykładu wymaga zgody prowadzącego.

Zajęcia seminaryjne:

– Obecność obowiązkowa: Tak

– Zasady udziału w zajęciach: Studenci prezentują na forum grupy temat wskazany przez prowadzącego oraz uczestniczą w dyskusji nad tym tematem. Ocenie podlega zarówno wartość merytoryczna prezentacji, jak i tzw. kompetencje miękkie.

Sposób obliczania oceny końcowej

Ocena z zajęć seminaryjnych ($S = (K1+K2+...Kn)/n$, gdzie n - ilość kolokwiów, $K1, K2, ...Kn$ - ilość punktów uzyskanych z kolokwiów cząstkowych) oraz z egzaminu końcowego (E) są obliczane następująco: procent uzyskanych punktów (za odpowiedzi poprawne uzyskuje się $ins > 1$ punkt, za odpowiedzi błędne -1 punkt) jest przeliczany na ocenę zgodnie z regulaminem studiów AGH.

Ocena końcowa (OK) jest obliczana wg. wzoru:

$OK = 0,6 \cdot E / ins > 0,4 \cdot S$ (S, E - oceny uzyskane w pierwszym terminie lub

średnia arytmetyczna z ocen uzyskanych we wszystkich terminach,

opowiednio E i S),

i zaokrąglana dla $OK \geq 3,25$ (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.

Sposób i tryb wyrównywania zaległości powstałych wskutek nieobecności studenta na zajęciach:

Nie określono

Wymagania wstępne i dodatkowe, z uwzględnieniem sekwencyjności modułów

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

- 1.M. Handke, M. Rokita, A. Adamczyk „Krystalografia i krystalochemia dla ceramików”
2. Transformation of silicate gels during heat treatment in air and in argon - spectroscopic studies / M. ROKITA, W. MOZGAWA, A. ADAMCZYK // Journal of Molecular Structure ; ISSN 0022-2860. — 2014 vol. 1070, s. 125-130. — Bibliogr. s. 130, Abstr.. — tekst:
3. The structural studies of Ag containing TiO₂-SiO₂ gels and thin films deposited on steel / Anna ADAMCZYK, Magdalena ROKITA // Journal of Molecular Structure ; ISSN 0022-2860. — 2016 vol. 1114, s. 171-180. — Bibliogr. s. 180, Abstr.. — Publikacja dostępna online od: 2016-02-18. — tekst:
- 4.Synthesis and characterization of the manganese cobaltite spinel prepared using two "soft chemical" methods / Tomasz BRYLEWSKI, Andrzej KRUK, Anna ADAMCZYK, Witold KUCZA, Mirosław STYGAR, Kazimierz PRZYBYLSKI // Materials Chemistry and Physics ; ISSN 0254-0584. — Tytuł poprz.: Materials Chemistry. — 2012 vol. 137 iss. 1, s. 310-316. — Bibliogr. s. 316, Abstr.. — tekst:
5. A study of the interaction between perylene and the TiO₂(110)-(1×1) surface-based on XPS, UPS and NEXAFS measurements / Jens Bæk Simonsen, Bartosz HANDKE, Zheshen Li, Preben Juul Møller // Surface Science ; ISSN 0039-6028. — 2009 vol. 603 iss. 9, s. 1270-1275. — Bibliogr. s. 1275, Abstr.. — tekst:
6. Crystal structure, electronic structure, and bonding properties of anhydrous nickel oxalate / Andrzej KOLEŻYŃSKI, Bartosz HANDKE, Ewa DROŻDŻ-CIEŚLA // Journal of Thermal Analysis and Calorimetry ; ISSN 1388-6150. — Tytuł poprz.: Journal of Thermal Analysis ; ISSN: 0368-4466. — 2013 vol. 113 iss. 1,

s. 319-328. — Bibliogr. s. 328, Abstr.. — tekst:

7. Structural studies of crystalline octamethylsilsesquioxane (CH₃)₈Si₈O₁₂ / Bartosz HANDKE, Witold JASTRZĘBSKI, Włodzimierz MOZGAWA, Anna Kowalewska // Journal of Molecular Structure ; ISSN 0022-2860. — 2008 vol. 887 iss. 1-3, s. 159-164. — Bibliogr. s. 163-164, Abstr.. — tekst:

8. Studies of dodecaphenyl polyhedral oligomeric silsesquioxane thin films on Si(100) wafers / Bartosz HANDKE, Łukasz KLITA, Jacek NIZIOŁ, Witold JASTRZĘBSKI, Anna ADAMCZYK // Journal of Molecular Structure ; ISSN 0022-2860. — 2014 vol. 1065-1066, s. 248-253. — Bibliogr. s. 253, Abstr.. — tekst:

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.