

Analiza rentgenograficzna

Sylabus zajęć

Informacje podstawowe

Kierunek studiów Chemia		Cykl dydaktyczny 2023/24	
Specjalność SYNTEZA I ANALIZA CHEMICZNA		Kod zajęć 02CHESACS.14P.01979.23	
Jednostka organizacyjna Wydział Chemii		Języki wykładowe polski	
Poziom studiów studia pierwszego stopnia		Obligatoryjność Obowiązkowy	
Forma studiów studia stacjonarne		Blok zajęciowy Przedmioty podstawowe	
Profil studiów profil ogólnoakademicki			
Koordynator zajęć	Maciej Kubicki		
Prowadzący zajęcia	Maciej Kubicki, Agnieszka Janiak		
Okres Semestr 3	Forma zajęć / liczba godzin / forma zaliczenia - Wykład: 15, Zaliczenie z oceną - Laboratorium: 30, Zaliczenie z oceną		Liczba punktów ECTS 4

Cele kształcenia dla zajęć

Kod	Cel
C1	Przekazanie wiedzy pozwalającej na opis, charakterystykę i analizę substancji w stanie krystalicznym.
C2	Rozwinięcie zdolności opisu symetrii brył skończonych oraz sieci przestrzennych kryształów.
C3	Przekazanie podstawowej wiedzy pozwalającej na doświadczalne badanie wewnętrznej struktury kryształów.
C4	Rozwinięcie zdolności opisu zjawiska dyfrakcji i przewidywania geometrii sieci odwrotnej kryształu.
C5	Poznanie metod matematycznych związanych z rentgenowską analizą strukturalną.
C6	Rozwinięcie umiejętności komunikacji i pracy w grupie.

Wymagania wstępne

Brak wymagań wstępnych.

Efekty uczenia się dla zajęć

Kod	Efekty uczenia się dla zajęć w zakresie	Efekty uczenia się dla kierunku	Metody weryfikacji osiągnięcia efektów uczenia się dla zajęć
Wiedzy - Student/ka:			
W1	zna i rozumie stan krystaliczny oraz symetrię modelu zewnętrznej postaci kryształu.	CHE_K1_W07, CHE_K1_W08	Test
W2	zna pojęcie atomowego czynnika rozpraszania oraz rozumie skąd się bierze i jakie jest znaczenie czynnika struktury.	CHE_K1_W06, CHE_K1_W07	Test
W3	zna metody otrzymywania promieniowania rentgenowskiego, jego właściwości i związane z nim zagrożenia.	CHE_K1_W06, CHE_K1_W07, CHE_K1_W08	Test
W4	zna i rozumie istotę problemu fazowego oraz metody opisu jego rozwiązania, zna i rozumie mapy gęstości różnicowej oraz sposoby ich interpretowania.	CHE_K1_W06, CHE_K1_W07	Test
W5	zna i rozumie jakie warunki powinny spełniać materiały nadające się do rentgenowskiej analizy strukturalnej.	CHE_K1_W06	Test
Umiejętności - Student/ka:			
U1	potrafi wskazać i opisać symetrię modelu zewnętrznej postaci kryształu.	CHE_K1_U13	Kolokwium pisemne, Raport
U2	potrafi opisać sieć przestrzenną kryształu, a w niej wskaźniki Millera płaszczyzn sieciowych, narysować elementy symetrii grupy przestrzennej i znaleźć położenia i współrzędne punktów symetrycznie równoważnych.	CHE_K1_U13	Kolokwium pisemne, Raport
U3	potrafi opisać zjawisko dyfrakcji, użyć opisu Lauego i Braggów do przewidywania symetrii sieci odwrotnej.	CHE_K1_U10, CHE_K1_U13	Kolokwium pisemne, Raport
U4	potrafi przewidzieć wygaszenia systematyczne na podstawie atomowego czynnika rozpraszania.	CHE_K1_U08, CHE_K1_U13	Kolokwium pisemne, Raport

Kod	Efekty uczenia się dla zajęć w zakresie	Efekty uczenia się dla kierunku	Metody weryfikacji osiągnięcia efektów uczenia się dla zajęć
U5	potrafi dobrać odpowiednie warunki doświadczalne do pomiaru rentgenowskiego.	CHE_K1_U13, CHE_K1_U14, CHE_K1_U15	Kolokwium pisemne, Raport
U6	potrafi opisać kolejne etapy doświadczalne i obliczeniowe rentgenowskiej analizy strukturalnej, potrafi wybrać próbkę do badań.	CHE_K1_U08, CHE_K1_U10	Kolokwium pisemne, Raport
U7	potrafi wskazać oddziaływania biorące udział w tworzeniu struktury kryształu molekularnego (wiązania wodorowe itd.) oraz korzystać z ogólnodostępnych baz danych strukturalnych.	CHE_K1_U13	Kolokwium pisemne, Raport
Kompetencje społecznych - Student/ka:			
K1	jest gotów/gotowa do krytycznej oceny jakości otrzymanych wyników w celu określenia struktury.	CHE_K1_K05, CHE_K1_K06	Raport
K2	jest gotów/gotowa do krytycznej oceny wkładu pracy własnej i partnera w wykonywanych wspólnie ćwiczeniach.	CHE_K1_K03, CHE_K1_K04	Raport
K3	jest gotów/gotowa do stosowania zasad bezpieczeństwa i higieny pracy w laboratorium.	CHE_K1_K03	Kolokwium pisemne

Treści programowe dla zajęć

Lp.	Treści programowe dla zajęć	Efekty uczenia się dla zajęć	Formy zajęć
1.	Stan krystaliczny, symetria, elementy symetrii, grupy punktowe, historia krystalografii.	W1	Wykład
2.	Sieć przestrzenna i jej opis: wskaźniki Millera, Sieci Bravais'go, translacyjne elementy symetrii, grupy przestrzenne.	W1, W2, U1, U2	Wykład, Laboratorium
3.	Bezpieczeństwo i higiena pracy w laboratorium.	K3	Laboratorium
4.	Ruch falowy; dyfrakcja, interferencja, teorie Lauego i Braggów.	W2, U3	Wykład, Laboratorium
5.	Atomowy czynnik rozpraszania, czynnik struktury, prawo Friedla, klasy Lauego, wygaszenia systematyczne.	W3, U3, U4	Wykład, Laboratorium
6.	Otrzymywanie promienia rentgenowskiego, lampy rentgenowskie, synchrotron. Właściwości promieniowania rentgenowskiego, monochromatyzacja, absorpcja.	W3, U4, U5	Wykład, Laboratorium
7.	Problem fazowy i metody jego rozwiązywania, metoda Pattersona, metody bezpośrednie itd., mapy Fouriera i ich interpretacja, wpływ temperatury.	W4, U5, K2	Wykład, Laboratorium
8.	Typowy eksperyment rentgenowski: od wyboru kryształu do udokładnienia struktury, problemy: nieporządek, zbliźniaczenie.	W5, U5, U6, U7, K2, K3	Wykład, Laboratorium

Lp.	Treści programowe dla zajęć	Efekty uczenia się dla zajęć	Formy zajęć
9.	Analiza wyników rentgenowskiej analizy strukturalnej: współrzędne, geometria cząsteczki, oddziaływania międzycząsteczkowe, odchylenia standardowe, kryształ molekularny jako supermolekuła.	W4, U6, U7, K1	Wykład, Laboratorium
10.	Bazy danych strukturalnych: CCDC, PDB itd., wyszukiwanie potrzebnych informacji.	W5, U7	Wykład, Laboratorium

Informacje dodatkowe

Forma zajęć	Metody i formy prowadzenia zajęć
Wykład	Wykład z prezentacją multimedialną wybranych zagadnień, Dyskusja
Laboratorium	Metoda ćwiczeniowa, Metoda laboratoryjna, Metoda badawcza (dociekania naukowego), Praca w grupach

Forma zajęć	Warunki zaliczenia zajęć
Wykład	Warunki zaliczenia: - Pozytywna ocena z ćwiczeń laboratoryjnych. - Test końcowy maksimum 30 punktów. Skala ocen z zastosowanym rozkładem procentowym: - bardzo dobry (bdb; 5,0): osiągnięcie przez studenta zakładanych efektów uczenia się minimum 95% - dobry plus (+db; 4,5): osiągnięcie przez studenta zakładanych efektów uczenia się minimum 85% - dobry (db; 4,0): osiągnięcie przez studenta zakładanych efektów uczenia się minimum 75% - dostateczny plus (+dst; 3,5): osiągnięcie przez studenta zakładanych efektów uczenia się minimum 65% - dostateczny (dst; 3,0): osiągnięcie przez studenta zakładanych efektów uczenia się minimum 55% - niedostateczny (ndst; 2,0): nieosiągnięcie przez studenta zakładanych efektów uczenia się
Laboratorium	<u>Warunkiem klasyfikacji jest obecność na minimum 60% zajęć.</u> Składowe oceny końcowej z ćwiczeń laboratoryjnych: - Sprawdzian przygotowania teoretycznego do zajęć - maksymalnie 5 pkt. za każde ćwiczenie - Ocena pracy eksperymentalnej - maksymalnie 5 pkt. za każde ćwiczenie - Ocena raportu - maksymalnie 5pkt. za każde wykonane ćwiczenie Skala ocen z zastosowanym rozkładem procentowym: - bardzo dobry (bdb; 5,0): osiągnięcie przez studenta zakładanych efektów uczenia się minimum 95% - dobry plus (+db; 4,5): osiągnięcie przez studenta zakładanych efektów uczenia się minimum 85% - dobry (db; 4,0): osiągnięcie przez studenta zakładanych efektów uczenia się minimum 75% - dostateczny plus (+dst; 3,5): osiągnięcie przez studenta zakładanych efektów uczenia się minimum 65% - dostateczny (dst; 3,0): osiągnięcie przez studenta zakładanych efektów uczenia się minimum 55% - niedostateczny (ndst; 2,0): nieosiągnięcie przez studenta zakładanych efektów uczenia się

Literatura

Obowiązkowa

1. Z. Kosturkiewicz „Metody krystalografii”, Wydawnictwo Naukowe UAM, Poznań, 2000.
2. P. Luger „Rentgenografia strukturalna monokryształów”, PWN, Warszawa, 1989.
3. M. van Meersche, J. Feneau-Dupont „Krystalografia i chemia strukturalna”, PWN, Warszawa, 1984.

Dodatkowa

1. Z. Bojarski, E. Łągiewka „Rentgenowska analiza strukturalna”, Wydawnictwo UŚ, Katowice, 1995.

Nakład pracy studenta i punkty ECTS

Rodzaje zajęć studenta	Średnia liczba godzin* przeznaczonych na zrealizowane rodzaje zajęć
Wykład	15
Laboratorium	30
Przygotowanie do zajęć	20
Czytanie wskazanej literatury	10
Przygotowanie raportu	5
Przygotowanie projektu	10
Przygotowanie do egzaminu	30
Łączny nakład pracy studenta	Liczba godzin 120
Liczba punktów ECTS	ECTS 4

* godzina (lekcyjna) oznacza 45 minut

Efekty uczenia się dla kierunku

Kod	Treść
CHE_K1_K03	Absolwent/ka jest gotów/gotowa do prawidłowego szacowania ryzyka przy przeprowadzaniu eksperymentów chemicznych
CHE_K1_K04	Absolwent/ka jest gotów/gotowa do szacowania działalności zawodowej chemika oraz jej wpływu na środowisko i ponoszenia odpowiedzialności za podejmowane decyzje
CHE_K1_K05	Absolwent/ka jest gotów/gotowa do stosowania etyki zawodowej w działaniach własnych i innych
CHE_K1_K06	Absolwent/ka jest gotów/gotowa do formułowania pytań służących pogłębieniu własnego zrozumienia tematu lub odnalezieniu brakujących elementów rozumowania
CHE_K1_U08	Absolwent/ka potrafi stosować metody matematyczne w obliczeniach chemicznych i fizykochemicznych
CHE_K1_U10	Absolwent/ka potrafi interpretować i analizować ilościowy opis podstawowych zjawisk fizykochemicznych
CHE_K1_U13	Absolwent/ka potrafi stosować pojęcia związane z symetrią do interpretacji struktur krystalograficznych
CHE_K1_U14	Absolwent/ka potrafi pracować w laboratorium chemicznym zgodnie z zasadami bezpieczeństwa i higieny pracy
CHE_K1_U15	Absolwent/ka potrafi pracować w grupie przyjmując różne funkcje, w tym lidera grupy
CHE_K1_W06	Absolwent/ka zna i rozumie budowę przestrzenną cząsteczek i kryształów
CHE_K1_W07	Absolwent/ka zna i rozumie zagadnienia z zakresu krystalochemii
CHE_K1_W08	Absolwent/ka zna i rozumie właściwości chemiczne substancji w zależności od ich budowy/składu