

Sylabus przedmiotu na studiach doktoranckich

Nazwa przedmiotu	Metody badań strukturalnych kryształów
Nazwa jednostki prowadzącej przedmiot	Wydział Chemii
Język przedmiotu	Polski
Efekty kształcenia dla przedmiotu ujęte w kategoriach: wiedzy, umiejętności i kompetencji społecznych	<p>W zakresie wiedzy: Doktorant rozumie założenia i zna główne pojęcia oraz przybliżenia teorii ciała stałego; Zna główne mechanizmy oddziaływań i typy kwazicząstek występujących w różnych typach kryształów; Zna typowe metody matematyczne używane w teorii ciała stałego. Zna podstawy matematyczne metody i ograniczenia algorytmów badawczych stosowanych w dyfrakcji promieni X (N,e) na monokryształach i próbkach polikrystalicznych.</p> <p>W zakresie umiejętności: Doktorant potrafi wyciągać wnioski, kojarzyć analogie i różnice pomiędzy modelowymi przypadkami fizycznymi; Potrafi odnieść pojęcia teorii ciała stałego do swojej specjalności naukowej i podać przykłady jej zastosowań w kontekście swoich zainteresowań badawczych. Potrafi stosować zdobytą wiedzę w zakresie dyfrakcji promieni X, neutronów i elektronów oraz odpowiednie algorytmy badawcze w typowych warunkach.</p> <p>W zakresie kompetencji: Doktorant ma świadomość różnorodności przybliżeń granicznych używanych w teorii ciała stałego w zależności od kontekstu interpretacyjnego, w szczególności w odniesieniu do swojej dyscypliny badawczej; Ma świadomość rozwoju oprogramowania specjalistycznego z tego zakresu i konieczności aktualizacji wiedzy na jego temat. Potrafi ocenić przydatność metod dyfrakcji promieni X (N,e) na monokryształach i próbkach proszkowych do swoich problemów badawczych.</p>
Typ przedmiotu (obowiązkowy/fakultatywny)	Fakultatywny
Semestr/rok	Do wyboru przez słuchacza
Imię i nazwisko osoby/osób prowadzącej/prowadzących przedmiot	Wiesław Łasocha, Barbara Oleksyn, Katarzyna Stadnicka
Imię i nazwisko osoby/osób egzaminującej/egzaminujących bądź udzielającej zaliczenia, w przypadku gdy nie jest to osoba prowadząca dany przedmiot	
Sposób realizacji	Wykład
Wymagania wstępne i dodatkowe	Znajomość podstaw krytalografii i krytalochemii
Liczba punktów ECTS przypisana	6 ECTS lub 3 ECTS

przedmiotowi	
Bilans punktów ECTS	<p>Udział w wykładach - 30 godz.</p> <p>Samodzielne opanowanie omówionego materiału i studiowanie zalecanej literatury - 120 godz.</p> <p>Przygotowanie do egzaminu oraz obecność na egzaminie - 30 godz.</p> <p>Łączny nakład pracy doktoranta: 180 godz., co odpowiada 6 punktom ECTS.</p>
Stosowane metody dydaktyczne	<p>Metody podające - wykład informacyjny</p> <p>Metody problemowe - wykład problemowy</p>
Metody sprawdzania i oceny efektów kształcenia uzyskanych przez doktorantów	Egzamin pisemny
Forma i warunki zaliczenia przedmiotu, w tym zasady dopuszczenia do egzaminu, zaliczenia, a także forma i warunki zaliczenia przedmiotu	<p>Udział w większości wykładów.</p> <p>Zdanie egzaminu z wynikiem co najmniej dostatecznym.</p>
Treści przedmiotu*	<p>(W.Ł.) Dyfrakcja proszkowa. Budowa aparatów do badań dyfrakcyjnych: aparaty wielozadaniowe, liczniki PSD. Pomiary synchrotronowe i neutronowe. Metody wyznaczania parametrów sieciowych i grup przestrzennych. Nowe metody badań strukturalnych: metoda 'charge flipping', metody sieci rzeczywistej, metody globalnej optymalizacji. Nowości w metodzie Rietvela.</p> <p>(B.O.) Promieniowanie rentgenowskie jako narzędzie do badania struktury monokryształów – otrzymywanie i monochromatyzacja. Sfera (konstrukcja) Ewalda jako narzędzie do opisu dyfrakcji promieni X na mono- i polikryształach. Zasada działania dyfraktometru do badania monokryształów. Wybór monokryształu i promieniowania X – pomiar dyfraktometryczny: wyznaczenie parametrów sieci i grupy przestrzennej kryształu, strategia pomiaru natężeń wiązek ugiętych, redukcja danych eksperymentalnych. Podstawy metody Pattersona i metod bezpośrednich w zastosowaniu do rozwiązania problemu fazowego. Podstawy metodyki udokładniania struktury. Metody walidacji modelu struktury. Korzystanie z wyników analizy strukturalnej w opisie struktury cząsteczek oraz ich wzajemnych oddziaływań.</p> <p>K.S. Definicja matematyczna kryształu z wykorzystaniem splotu i jej konsekwencje (w wyniku transformaty Fouriera) dla interpretacji obrazu dyfrakcyjnego. Oddziaływanie promieniowania X z materią - podstawowe założenia teorii kinematycznej Thomsona (oddziaływanie bez straty energii) i podejścia Comptona - czynnik rozpraszania atomowego, czynnik struktury. Porównanie dyfrakcji promieni X neutronów i elektronów. 'Anomalna' dyspersja promieni X i jej uwzględnienie w rozszerzonych pojęciach symetrii klasy Łauego, symetrii map Pattersona, symetrii grup przestrzennych (teoria Wilsona) - grupy dichromatyczne (Szubnikowa) i wielowymiarowe oraz ich zastosowania.</p>

	Struktury współmierne i niewspółmierne - kwazikryształy.
Wykaz literatury podstawowej i uzupełniającej*	<p>M. Ladd, R. Palmer, Structure Determination by X-ray Crystallography, Kluwer Acad/PP, 4th ed. 2003</p> <p>J.P. Glusker et al. „Crystal Structure Analysis for Chemists and Biologists”, VCh, 1994 (wybrane rozdziały)</p> <p>W. Clegg, A.J. Blake, R.O. Gould, P. Main, “Crystal Structure Analysis. Principles and Practice” IUCr, Oxford Sci. Publ. 2009.</p> <p>Z.Dauter, Acta Cryst. D (1999) D55, 1703-1717.</p> <p>M.M. Woolfson, An Introduction to X-ray Crystallography, Cambridge University Press, 2nd edition, 1997.</p> <p>Fundamentals of Crystallography edited by C. Giacovazzo, IUCr, Oxford Univ. Press 1992 lub wydania następne (wybrane rozdziały).</p>

* W szczególnie uzasadnionych przypadkach można podać informację ogólną.