



## Symetrie w układach krystalicznych

### Sylabus modułu zajęć

#### Informacje podstawowe

|   |  |
|---|--|
| <b>Kierunek studiów</b><br>Fizyka Techniczna                              | <b>Cykl dydaktyczny</b><br>2024/2025                     |
| <b>Specjalność</b><br>Wszystkie   | <b>Kod przedmiotu</b><br>FiISFTCS.IIi1S.5fe1bdc0b42ae.21 |
| <b>Jednostka organizacyjna</b><br>Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej | <b>Języki wykładowe</b><br>Polski                        |
| <b>Poziom kształcenia</b><br>studia magisterskie inżynierskie II stopnia  | <b>Obligatoryjność</b><br>Obowiązkowy                    |
| <b>Forma studiów</b><br>Stacjonarne                                       | <b>Blok zajęciowy</b><br>przedmioty specjalnościowe      |
| <b>Profil studiów</b><br>Ogólnoakademicki                                 | <b>Przedmiot powiązany z badaniami naukowymi</b><br>Tak  |
| <b>Koordynator przedmiotu</b>   | Radosław Strzałka  |
| <b>Prowadzący zajęcia</b>   | Radosław Strzałka  |

|                           |  |                                   |
|---------------------------|--|-----------------------------------|
| <b>Okres</b><br>Semestr 1 | <b>Forma weryfikacji uzyskanych efektów uczenia się</b><br>Zaliczenie            | <b>Liczba punktów ECTS</b><br>4.0 |
|                           | <b>Forma prowadzenia i godziny zajęć</b><br>Wykład: 15, Ćwiczenia projektowe: 30 |                                   |

#### Cele kształcenia dla przedmiotu

|    |   |
|----|---|
| C1 | Zapoznanie studenta z podstawowymi symetriami w strukturze atomowej ciał stałych, w szczególności w kryształach periodycznych i aperiodycznych.                                       |
| C2 | Pokazanie związku symetrii (periodyczności) z budową atomową i konsekwencje tego związku dla metod analizy strukturalnej kryształów.  |
| C3 | Zapoznanie studenta z powszechnie stosowanymi narzędziami informatycznymi do analizy strukturalnej kryształów; wykorzystanie tych narzędzi do konkretnych zastosowań w krytalografii. |

## Efekty uczenia się dla przedmiotu

| Kod   | Efekty w zakresie   | Kierunkowe efekty uczenia się   | Metody weryfikacji  |
|---|---|---------------------------------|---|
| <b>Wiedzy - Student zna i rozumie:</b>                  |   |                                 |   |
| W1  | pojęcie symetrii w strukturze atomowej i jej wpływu na budowę atomową kryształów  | FTC2A_W01, FTC2A_W03, FTC2A_W04 | Aktywność na zajęciach, Udział w dyskusji                 |
| W2  | cechy obrazu dyfrakcyjnego, metody jego powstawania i związku ze strukturą atomową kryształów   | FTC2A_W01, FTC2A_W03, FTC2A_W04 | Aktywność na zajęciach, Udział w dyskusji                 |
| W3  | ideę udokładniania struktury w oparciu o dane dyfrakcyjne, problemy z tym związane i przykłady metod  | FTC2A_W01, FTC2A_W03, FTC2A_W04 | Aktywność na zajęciach, Udział w dyskusji                 |
| W4  | co to są kryształy periodyczne i aperiodyczne, jakie są różnice w budowie atomowej, obrazie dyfrakcyjnych i metodach krystalograficznych do ich opisu   | FTC2A_W01, FTC2A_W03, FTC2A_W04 | Aktywność na zajęciach, Udział w dyskusji                 |
| <b>Umiejętności - Student potrafi:</b>                  |   |                                 |   |
| U1  | dokonać analizy obrazu dyfrakcji proszkowej na kryształach przy użyciu dedykowanych i samodzielnie opracowanych narzędzi                                | FTC2A_U01, FTC2A_U04            | Wykonanie ćwiczeń, Projekt, Zaangażowanie w pracę zespołu |
| U2  | przeprowadzić udokładnienie prostych struktur krystalicznych przy pomocy dedykowanych narzędzi  | FTC2A_U01, FTC2A_U04            | Wykonanie ćwiczeń, Projekt, Zaangażowanie w pracę zespołu |
| U3  | przeprowadzić podstawową analizę obrazu dyfrakcyjnego i struktury atomowej w układach aperiodycznych  | FTC2A_U01, FTC2A_U04            | Wykonanie ćwiczeń, Projekt, Zaangażowanie w pracę zespołu |
| <b>Kompetencje społecznych - Student jest gotów do:</b> |   |                                 |   |
| K1  | wzięcia udziału w dyskusji nt. zadanego problemu oraz przedstawienia wyników własnych rozwiązań problemu na forum grupy.                                | FTC2A_K01                       | Udział w dyskusji, Zaangażowanie w pracę zespołu          |
| K2  | współpracować w małym zespole i większej grupie nad danym zagadnieniem, wykorzystując swoją wiedzę i umiejętności w celu rozwiązania złożonego problemu | FTC2A_K02                       | Udział w dyskusji, Zaangażowanie w pracę zespołu          |

### Treści programowe zapewniające uzyskanie efektów uczenia się dla modułu zajęć

Wykłady dotyczące zagadnień teoretycznych oraz dyskutujące dostępne metody i narzędzia w analizie strukturalnej kryształów oraz zajęcia praktyczne (projektowe), służące zapoznaniu się z funkcjonalnością tych narzędzi i samodzielnemu zastosowaniu ich w danych zagadnieniach fizyki kryształów.

### Bilans punktów ECTS

| Rodzaje zajęć studenta | Średnia liczba godzin* przeznaczonych na zrealizowane rodzaje zajęć |
|------------------------|---|
| Wykład                 | 15  |
| Ćwiczenia projektowe   | 30  |

|   |                             |
|---|-----------------------------|
| Przygotowanie projektu, prezentacji, pracy pisemnej, sprawozdania | 30                          |
| Przygotowanie do zajęć  | 15                          |
| Samodzielne studiowanie tematyki zajęć                            | 30                          |
| <b>Łączny nakład pracy studenta</b>                               | <b>Liczba godzin</b><br>120 |
| <b>Liczba godzin kontaktowych</b>                                 | <b>Liczba godzin</b><br>45  |

\* godzina (lekcyjna) oznacza 45 minut

### Treści programowe

| Lp. | Treści programowe  | Efekty uczenia się dla przedmiotu | Formy prowadzenia zajęć |
|-----|--|-----------------------------------|-------------------------|
| 1.  | Podstawy krystalografii (przypomnienie): symetrie, struktury krystaliczne, komórka elementarna, czynnik strukturalny, dyfrakcja na kryształach, podstawy analizy strukturalnej   | W1                                | Wykład                  |
| 2.  | Symetria w kryształach: elementy symetrii; sieci krystaliczne; grupy punktowe, przestrzenne, klasy Lauego; układy krystalograficzne; symetrie wielowymiarowe                     | W1                                | Wykład                  |
| 3.  | Dyfrakcja rentgenowska na kryształach: symetria kryształu a obraz dyfrakcyjny; rozwiązanie struktury, mapa gęstości atomowej; problem fazowy                                     | W2                                | Wykład                  |
| 4.  | Podstawy metod udokładniania struktur periodycznych: odzyskiwanie fazy; model struktury atomowej; metody iteracyjne; przykłady udokładnień                                       | W3                                | Wykład                  |
| 5.  | Struktury modulowane: wektor modulacji, modulacja współmierna i niewspółmierna; obraz dyfrakcyjny; idea metody wielowymiarowej (superspace); przykłady                           | W2, W3, W4                        | Wykład                  |
| 6.  | Kwazikryształy: struktura atomowa i obraz dyfrakcyjny; rodziny kwazikryształów; podstawowe właściwości i zastosowania; metody modelowania; udokładnianie; metoda wielowymiarowa. | W1, W2, W3, W4                    | Wykład                  |
| 7.  | Metoda statystyczna opisu kwazikryształów: pojęcie średniej komórki elementarnej; modelowanie nieporządku; związek z metodą wielowymiarową                                       | W3, W4                            | Wykład                  |

|    |   |                    |                      |
|----|---|--------------------|----------------------|
| 8. | 1. Modelowanie i wizualizacja struktury atomowej (program VESTA)<br>2. Dyfrakcja na kryształach (proszkowa i na monokryształach): wskaźnikowanie obrazu dyfrakcyjnego, rozwiązywanie struktury (CrysAlis, FullProf)<br>3. Udokładnianie struktur monokrystalicznych (program JANA2006)<br>4. Odzyskiwanie fazy, mapy gęstości atomowej (structure solution): metoda bezpośrednia, metoda LDE, charge flipping (program Superflip, lodemac)<br>5. Analiza dyfrakcyjna i strukturalna kwazikryształów: metoda statystyczna i wielowymiarowa (dedykowane programy, pakiet QUASI) | U1, U2, U3, K1, K2 | Ćwiczenia projektowe |
|----|---|--------------------|----------------------|

## Informacje rozszerzone

### Metody i techniki kształcenia:

Dyskusja, Wykonanie projektu, Metoda pracy w grupie

| Rodzaj zajęć         | Sposób weryfikacji i oceny efektów uczenia się   | Warunki zaliczenia przedmiotu                                   |
|----------------------|--|---|
| Wykład               | Aktywność na zajęciach, Udział w dyskusji  | brak  |
| Ćwiczenia projektowe | Aktywność na zajęciach, Udział w dyskusji, Wykonanie ćwiczeń, Projekt, Zaangażowanie w pracę zespołu | udział w ćwiczeniach i realizacja zadań, lub wykonanie projektu |

### Dodatkowy opis

Wykład ma charakter teoretyczny, wprowadzający w zagadnienia analizy strukturalnej kryształów. W ramach ćwiczeń projektowych student ma możliwość zastosowania wiedzy teoretycznej oraz dedykowanych i własnych narzędzi do analizy wybranych przykładów struktur krystalicznych na dwa sposoby: (1) przez uczestnictwo w zajęciach i wykonywanie ćwiczeń pod nadzorem prowadzącego, lub (2) przez wykonanie projektu (samodzielnie lub w małych zespołach). Ścieżka (1) udziału studenta w ćwiczeniach wymaga od niego korzystania z własnego sprzętu komputerowego (laptopa). W ścieżce (2): tematy projektów zostaną określone przez prowadzącego na początku zajęć. Projekty można oddawać w formie opracowania (esej, raport + programy komputerowe, jeśli takie powstały), lub w trakcie prezentacji na ostatnich zajęciach.

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

W trakcie zajęć oceniane są:

- aktywność studenta w trakcie wykładów i ćwiczeń (udział w dyskusji, zaangażowanie w pracę)
- realizacja zadań w trakcie ćwiczeń, w tym samodzielność, stopień opanowania narzędzi, otrzymanie wyników (ścieżka (1))
- projekt, w tym stopień zaawansowania tematu i poprawnej realizacji tematu, sposób prezentacji wyniku (ścieżka (2))

## Sposób obliczania oceny końcowej

Podstawą obliczenia oceny końcowej (nota 2-5) jest: ocena realizacji wykonania zadań w trakcie ćwiczeń (ścieżka (1)) lub ocena za projekt (ścieżka (2)). Ocena może być dodatkowo powiększona o aktywność w trakcie wykładu i/lub ćwiczeń.

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

Samodzielna praca nad poruszonym w trakcie zajęć zagadnieniem, konsultacja z prowadzącym w celu ew. wyjaśnienia wątpliwości.

## Wymagania wstępne i dodatkowe

Wiedza z zakresu fizyki ciała stałego (dot. struktury krystalicznej), podstawowa wiedza z zakresu matematyki na poziomie I stopnia studiów (algebra, analiza matematyczna), podstawowa umiejętność programowania (w wybranym języku).

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

1. Udział w wykładzie jest nieobowiązkowy (zgodnie z Regulaminem Studiów AGH)
2. Udział w ćwiczeniach projektowych jest:
  - o obowiązkowy, jeśli student wybierze ścieżkę (1) realizacji zajęć (wykonywanie na bieżąco ćwiczeń zaleconych przez prowadzącego)
  - o nieobowiązkowy, jeśli student wybierze ścieżkę (2) realizacji zajęć (projekt)

## Literatura

### Obowiązkowa

1. "Fundamentals of Crystallography", C. Giacovazzo, H.L. Monaco, G. Artioli, D. Viterbo, G.Ferraris, G. Gilli, G. Zanotti, M. Catti, z serii IUCr Texts on Crystallography, Oxford University Press 2002 (lub starsze/nowsze)
2. "Rentgenografia strukturalna monokryształów", P. Luger, PWN Warszawa 1989.
3. "Crystallography of Quasicrystals. Concepts, Methods and Structures", W. Steurer, S. Deloudi, Springer-Verlag Berlin Heidelberg 2009.
4. "Quasicrystals. A Primer", C. Janot, z serii Oxford Science Publications, Oxford University Press, New York 1992.

### Dodatkowa

1. Statistical approach to diffraction of periodic and non-periodic crystals - review / Radosław STRZAŁKA, Ireneusz BUGAŃSKI, Janusz WOLNY // Crystals [Dokument elektroniczny]. — Czasopismo elektroniczne ; ISSN 2073-4352. — 2016 vol. 6 iss. 9, [art. no.] 104, s. [1-19]. — Wymagania systemowe: Adobe Reader. — Tryb dostępu: <http://www.mdpi.com/2073-4352/6/9/104/pdf> [2016-09-27]. — Bibliogr. s. 17-19, Abstr.. — Publikacja dostępna online od: 2016-08-26
2. Model refinement of quasicrystals / Janusz WOLNY, Ireneusz BUGAŃSKI, Radosław STRZAŁKA // Crystallography Reviews ; ISSN 0889-311X. — 2018 vol. 24 no. 1, s. 22-64. — Bibliogr. s. 58-64, Abstr.. — tekst: <https://www-1.tandfonline-1.com-15qtywsv0030c.wbg2.bg.agh.edu.pl/doi/pdf/10.1080/0889311X.2017.1340276>

## Badania i publikacje

### Badania

1. "Badania strukturalne kwazikryształów dekalgonalnych i ikozaedrycznych - nieporządek atomowy, budowa klastrowa i własności fizyczne." - projekt NCN OPUS 2020-2022, kierownik prof. Janusz Wolny
2. "Badanie struktury kwazikryształów ikozaedrycznych - analiza dyfrakcyjna i modelowanie" - projekt NCN PRELUDIUM 2015-2017, kierownik dr Radosław Strzałka
3. "Własności strukturalne i mechaniczne metali - od prostych struktur do złożonych stopów metali na przykładzie kwazikryształów i innych układów międzymetalicznych" - projekt NCN OPUS 2014-2016, kierownik prof. Janusz Wolny

### Publikacje

1. Model refinement of quasicrystals / Janusz WOLNY, Ireneusz BUGAŃSKI, Radosław STRZAŁKA // *Crystallography Reviews* ; ISSN 0889-311X. — 2018 vol. 24 no. 1, s. 22-64. — Bibliogr. s. 58-64, Abstr.. — tekst:  
<https://www-tandfonline-1com-15qtywsv0030c.wbg2.bg.agh.edu.pl/doi/pdf/10.1080/0889311X.2017.1340276>
2. Statistical approach to diffraction of periodic and non-periodic crystals - review / Radosław STRZAŁKA, Ireneusz BUGAŃSKI, Janusz WOLNY // *Crystals* [Dokument elektroniczny]. — Czasopismo elektroniczne ; ISSN 2073-4352. — 2016 vol. 6 iss. 9, [art. no.] 104, s. [1-19]. — Wymagania systemowe: Adobe Reader. — Tryb dostępu:  
<http://www.mdpi.com/2073-4352/6/9/104/pdf> [2016-09-27]. — Bibliogr. s. 17-19, Abstr.. — Publikacja dostępna online od: 2016-08-26
3. <https://bpp.agh.edu.pl/autor/?idA=06874&fodR=0&fdoR=2021&fagTP=4&fagIF=0&fagPM=0&afi=1&vt=c#vtype>

## Kierunkowe efekty uczenia się

| Kod       | Treść   |
|-----------|---|
| FTC2A_K01 | potrafi myśleć i działać w sposób kreatywny, doceniając rolę ciągłego doksztalcania oraz właściwie określać priorytety stosując zasady etyki zawodowej  |
| FTC2A_K02 | potrafi współdziałać w środowisku interdyscyplinarnym oraz rozumie pozatechniczne skutki stosowania metod fizyki technicznej (w tym jej wpływu na środowisko) i związanej z tym odpowiedzialności za podejmowane decyzje                |
| FTC2A_U01 | potrafi zastosować metody i techniki z zakresu fizyki do rozwiązywania złożonych, interdyscyplinarnych problemów technicznych i naukowych, w sposób nieszablonowy, ze świadomością uwarunkowań ekonomicznych, prawnych i środowiskowych |
| FTC2A_U04 | potrafi formułować i testować hipotezy związane z rozwiązywaniem złożonych zadań inżynierskich i prowadzeniem prac badawczych, w tym zastosować zaawansowane metody analizy statystycznej   |
| FTC2A_W01 | ma pogłębioną i rozszerzoną wiedzę z zakresu matematyki i fizyki niezbędną do zrozumienia podstawowych procesów zachodzących w przyrodzie   |
| FTC2A_W03 | ma pogłębioną wiedzę o trendach rozwojowych w wybranych działach fizyki oraz jej zastosowaniach we współczesnych technologiach  |
| FTC2A_W04 | dysponuje pogłębioną znajomością metod matematycznych i numerycznych niezbędnych do analizy procesów fizycznych i technologicznych  |