**SYLABUS PRZEDMIOTU/MODUŁU ZAJĘĆ**

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
|  | Nazwa przedmiotu/modułu w języku polskim oraz angielskim  Instrumentalna analiza fazowa w praktyce  Instrumental phase analysis in practice | | |
|  | Dyscyplina  Nauki o Ziemi i środowisku | | |
|  | Język wykładowy  Język polski | | |
|  | Jednostka prowadząca przedmiot  Wydział Nauk o Ziemi i Kształtowania Środowiska, Instytut Nauk Geologicznych, Zakład Mineralogii i Petrologii | | |
|  | Kod przedmiotu/modułu  76-OS-AS-S2-E1-fIAFP, 76-OS-AS-S2-E2-fIAFP, 76-OS-AS-S2-E3-fIAFP, 76-OS-AS-S2-E4-fIAFP | | |
|  | Rodzaj przedmiotu/modułu *(obowiązkowy lub do wyboru)*  do wyboru | | |
|  | Kierunek studiów (specjalność)  Ochrona środowiska (Analityka środowiskowa) | | |
|  | Poziom studiów *(I stopień, II stopień, jednolite studia magisterskie)*  II stopień | | |
|  | Rok studiów *(jeśli obowiązuje*)  I/II | | |
|  | Semestr *(zimowy lub letni)*  zimowy/letni | | |
|  | Forma zajęć i liczba godzin (w tym liczba godzin zajęć online)  Wykład: 8  Ćwiczenia: 14  Ćwiczenia laboratoryjne: 12  Metody uczenia się:  -wykład multimedialny  -ćwiczenia praktyczne (planowanie strategii pomiarów, nauka obsługi oprogramowania, korzystania z baz danych, interpretacja i prezentacja uzyskanych wyników w zakresie jakościowej i ilościowej analizy fazowej)  -ćwiczenia laboratoryjne (zadania wykonywane w laboratorium Zakładu Mineralogii i Petrologii ING polegające preparatyce próbek i przeprowadzaniu pomiarów z wykorzystaniem dyfraktometru rentgenowskiego i spektrometru Ramana) | | |
|  | Imię, nazwisko, tytuł/stopień naukowy osoby prowadzącej zajęcia  Koordynatorzy: dr Iwona Korybska-Sadło, dr Krzysztof Turniak  Prowadzący zajęcia: dr Iwona Korybska-Sadło, dr Krzysztof Turniak | | |
|  | Wymagania wstępne w zakresie wiedzy, umiejętności i kompetencji społecznych dla przedmiotu/modułu  Podstawowe wiadomości z chemii i fizyki w zakresie realizowanym dla I stopnia kierunku Ochrona Środowiska | | |
|  | Cele kształcenia dla przedmiotu  Zapoznanie studenta z podstawami spektroskopii Ramana i rentgenowskiej dyfraktometrii proszkowej oraz możliwościami zastosowania tych metod w jakościowej i ilościowej analizie fazowej dla próbek środowiskowych.  Osiągnięcie przez studentów umiejętności przygotowywania preparatów, planowania i prowadzenia badań z wykorzystaniem dyfraktometru rentgenowskiego i spektrometru Ramana oraz interpretacji i prezentacji uzyskanych wyników. | | |
|  | Treści programowe  - realizowane w sposób tradycyjny (T)  Wykład: Budowa wewnętrzna ciał stałych. Promieniowanie rentgenowskie i jego źródła. Zjawisko dyfrakcji promieni X w krysztale. Rentgenowska dyfraktometrii proszkowa. Aparatura pomiarowa. Preparatyka próbek i planowanie pomiarów. Cyfrowe bazy danych krystalograficznych. Rentgenowska analiza fazowa (jakościowa i ilościowa). Metoda Rietvelda. Zastosowania rentgenowskiej dyfraktometrii proszkowej i jej ograniczenia w badaniach próbek środowiskowych.  Optyczne metody spektroskopowe oraz podstawy spektroskopii wibracyjnej. Rozpraszanie stokesowskie i antystokesowskie, rozpraszanie Rayleigha, polaryzowalność cząsteczek, efekt Ramana. Aparatura pomiarowa, źródła światła w spektrometrach ramanowskich. Preparatyka próbek i planowanie pomiarów. Zjawisko fluorescencji oraz polaryzacji. Analiza fazowa, interpretacja otrzymanych wyników. Cyfrowe bazy danych.Praktyczne zastosowania metod spektroskopowych (Raman, FT-IR) i ich ograniczenia.  Ćwiczenia oraz ćwiczenia laboratoryjne odbywają się w Pracowni Dyfrakcji Rentgenowskiej oraz w Pracowni Mikroskopii Elektronowej. W trakcie zajęć realizowane będą następujące treści programowe: przygotowywanie preparatów proszkowych do pomiaru. Preparatyka minerałów ilastych. Rodzaje uchwytów i techniki ładowania preparatów. Planowanie pomiaru i ustalanie warunków pomiarowych. Podstawy obsługi dyfraktometru rentgenowskiego. Interpretacja dyfraktogramu z wykorzystaniem programów wyszukujących (DiffracEva, QualX2). Identyfikacja faz z użyciem krystalograficznych baz danych (ICDD PDF4+, COD). Analiza ilościowa z wykorzystaniem programu TOPAS (metodą Rietvelda oraz DDM). Ilościowe oznaczanie zawartości substancji amorficznej w próbce (metody: wzorca wewnętrznego, wzorca zewnętrznego, PONKCS). Ekspertyza powierzonej próbki w zakresie analizy fazowej metodą dyfraktometrii rentgenowskiej. Budowa spektrometru ramanowskiego na przykładzie konfokalnego mikrospektrometru Ramana Renishaw. Praktyczne przygotowywanie preparatów do pomiaru. Planowanie pomiaru, ustalanie warunków pomiarowych ze względu na badaną próbkę. Zapoznanie z oprogramowaniem Wire. Podstawy obsługi aparatury pomiarowej (spektrometr Renishaw inVia Qontor). Interpretacja widm ramanowskich z wykorzystaniem programu Wire, CrystalSleuth. Mapowanie ramanowskie, pomiary punktowe, linowe. Zjawisko fluorescencji w próbkach oraz praktyczne metody usuwania fluorescencji. Analiza widm spektroskopowych w zakresie występowania drgań pochodzących od: grup hydroksylowych, cząsteczek wody, cząsteczek CO2 itp. Analiza wybranych faz mineralnych i amorficznych. Analiza tworzyw sztucznych (PE, PP, PET) i innych stałych zanieczyszczeń środowiska (siarczany, chlorki). Ekspertyza powierzonej próbki w zakresie analizy fazowej metodą spektroskopii ramanowskiej. | | |
|  | Zakładane efekty uczenia się  W\_1 Student zna podstawy fizyczne dyfraktometrii rentgenowskiej i spektroskopii ramanowskiej.  W\_2 Student ma wiedzę dotyczącą możliwości zastosowania metody proszkowej oraz spektroskopii Ramana w badaniach stosowanych w ochronie środowiska.  U\_1 Student posiada umiejętność przygotowania próbek proszkowych i wzorców do badań metodą dyfraktometrii rentgenowskiej i spektroskopii ramanowskiej.  U\_2 Student potrafi zaplanować i przeprowadzić pomiar XRD, zinterpretować i przedstawić otrzymane wyniki w zakresie identyfikacji fazowej i analizy ilościowej. Potrafi zaplanować i przeprowadzić ekspertyzę powierzonej próbki w zakresie analizy fazowej metodą spektroskopii ramanowskiej.  U\_3 Student potrafi obsługiwać specjalistyczne programy komputerowe oraz korzystać z cyfrowych baz danych krystalograficznych i spektroskopowych (ICDD, ICSD, COD, ASTM, RRUFF).  U\_4 Student potrafi przygotować ekspertyzę w zakresie analizy fazowej (jakościowej i ilościowej) powierzonej próbki, w oparciu o wyniki badań przeprowadzonych metodą dyfraktometrii rentgenowskiej oraz spektroskopii Ramana.  K\_1 Student rozumie potrzebę ciągłego uczenia się i śledzenia zmian w stanie wiedzy dotyczącej struktur ciał krystalicznych oraz technik analitycznych.  K\_2 Student potrafi planować pomiary w taki sposób, aby uzyskać oczekiwany efekt możliwie najmniejszym kosztem. | | Symbole odpowiednich kierunkowych efektów kształcenia:  K\_W05  K\_W12  K\_U02  K\_W13, K\_U02, K\_U04, K\_U07  K\_W03, K\_U01  K\_U02, K\_U04, K\_U05, K\_U07  K\_K01  K\_K06 |
|  | Literatura obowiązkowa:  Trzaska Durski Z., Trzaska Durska H.: Podstawy krystalografii strukturalnej i rentgenowskiej. PWN, Warszawa 1994  Literatura zalecana:  Bojarski Z., Gigla M., Stróż K., Surowiec M., Krystalografia+CD. Wydawnictwo Naukowe PWN. Warszawa, wyd. 3, 2017  Scarlett, N., & Madsen, I. (2006). Quantification of phases with partial or no known crystal structures. Powder Diffraction, 21(4), 278-284. doi:10.1154/1.2362855  Toraya, H. (2021). Review of the direct derivation method: Quantitative phase analysis with observed intensities and chemical composition data. Powder Diffraction, 36(3), 159-168. doi:10.1017/S0885715621000373  Praca zbiorowa pod red. Kamilli Małek. Spektroskopia oscylacyjna od teorii do praktyki. PWN, Warszawa, 2016.  Barańska H., Łabudzińska A., Terpiński Ł. Laserowa spektrometria ramanowska. Zastosowania analityczne. PWN, Warszawa, 1981.  Praca zbiorowa pod red. Kamilli Małek. Wybrane metody spektroskopii i spektroskopii molekularnej w analizie strukturalnej. Wydawnictwo Uniwersytetu Jagiellońskiego, Kraków, 2005. | | |
|  | Metody weryfikacji zakładanych efektów uczenia się:  - wykład (T) lub (O): egzamin pisemny (K\_W05, K\_W12)  - ćwiczenia (T): kolokwium zaliczeniowe (K\_U01, K\_U02, K\_U04, K\_U05, K\_U07, K\_K06)  - ćwiczenia laboratoryjne (T): przygotowanie i zrealizowanie projektu (K\_U01, K\_U02, K\_U04, K\_U05, K\_U07, K\_K06) | | |
|  | Warunki i forma zaliczenia poszczególnych komponentów przedmiotu/modułu:  Podstawą uzyskania zaliczenie przez studenta wykładu będzie obecność na wykładach oraz pozytywnie zaliczony egzamin pisemny (T) lub (O). Wynik pozytywny po uzyskaniu 50% możliwych do zdobycia punktów.    Zaliczenie części ćwiczeniowej odbędzie się na podstawie obecności oraz pozytywne napisanie kolokwium zaliczeniowego (min. 50% możliwych do zdobycia punktów), zaliczenie ćwiczeń laboratoryjnych odbędzie się na podstawie przygotowania i zrealizowania projektu (ekspertyzy badawczej) (T). | | |
|  | Nakład pracy studenta | | |
| forma realizacji zajęć przez studenta | liczba godzin przeznaczona na zrealizowanie danego rodzaju zajęć | |
| zajęcia (wg planu studiów) z prowadzącym:  - wykład: 8  - ćwiczenia: 14  - laboratorium: 12  - konsultacje: 8 | 42 | |
| praca własna studenta:  - przygotowanie do zajęć: 8  - czytanie wskazanej literatury: 5  - przygotowanie projektu: 10  - przygotowanie do egzaminu: 10 | 33 | |
| Łączna liczba godzin | 75 | |
| Liczba punktów ECTS (*jeśli jest wymagana*) | 3 | |

(T) – realizowane w sposób tradycyjny

(O) - realizowane online