

## ***Ćwiczenia laboratoryjne. Krystalografia z elementami informatyki.***

### *II rok chemii: specjalność chemia z zastosowaniami informatyki*

1. Zasady BHP. Symetria punktowa – brył i cząsteczek chemicznych. Narysować model kryształu i zaznaczyć elementy symetrii, stosując symbolikę Hermann'a-Mauguin'a. Narysować wybraną cząsteczkę chemiczną i określić jej symetrię punktową.
2. Komórka elementarna, węzy, symbole prostych, wskaźniki Millera płaszczyzn. Dla danej sieci Bravais'ego wyznaczyć współrzędne węzłów, symbole prostych i wskaźniki Millera płaszczyzn najgęściej obsadzonych węzłami.
3. Morfologia kryształów. Symetria punktowa brył, goniometria – przedstawić projekcję stereograficzną danej bryły, określić układ krystalograficzny, wskaźniki ścian, podać reprezentację macierzową operacji symetrii i symbol grupy punktowej.
4. Projekcja stereograficzna (położenia ogólne i szczególne) dla układów wysokosymetrycznych – rachunek pasowy i cosinusowy; symbolika Schoenfliesa.
5. *Kolokwium*. Dla danej sieci Bravais'go określić układ krystalograficzny, ilość węzłów, typ sieci, przedstawić graficznie symetrię grupy przestrzennej, wypisać ogólne i szczególne położenia symetrycznie równoważne.
6. Kontynuacja ćwiczenia 5 (może być dla innej sieci); podać też symbol grupy przestrzennej, macierze translacyjnych elementów symetrii oraz opisać słownie symetrię grupy przestrzennej.
7. Przedstawić graficznie symetrię grupy przestrzennej na podstawie podanego symbolu, wypisać ogólne i szczególne położenie równoważne, zapisać macierze odpowiadające elementom symetrii.  
Nauka korzystania z Tablic Międzynarodowych (International Tables for Crystallography).
8. Przedstawienie graficznie symetrii danej sieci złożonej, podać symbol grupy przestrzennej, z liczb koordynacyjnych wyznaczyć stosunek stechiometryczny składników.
9. *Kolokwium*. Wykonanie dyfraktogramu proszkowego w pracowni rentgenowskiej. Pokaz działania dyfraktometrów monokrystalicznych.
10. Równania Bragga. Wskaźnikowanie dyfraktogramu proszkowego kryształów regularnych, wyznaczenie stałej sieciowej i typu sieci Bravais'go.
11. Wyznaczenie parametrów komórki elementarnej, klasy Lauego i symetrii przestrzennej ze zdjęć niezdeformowanej sieci odwrotnej (korzystając z komputerowego programu edukacyjnego lub z kompletu zdjęć rentgenowskich).
12. Zaprojektowanie kompletu warstwic rentgenowskich dla podanego symbolu grupy przestrzennej.
13. *Kolokwium*. Omówić wybraną publikację krystalograficzną (*Acta Crystallographica C, B*, a w szczególnych przypadkach *A, D*). Krystalograficzna grafika komputerowa.
14. Dla sieci złożonej przedstawić graficznie symetrię grupy przestrzennej, wyznaczyć schematy koordynacyjne oraz typy luk i stosunek stechiometryczny składników.
15. Mikroskop polaryzacyjny: obserwacja przemian fazowych azotanu amonu, kąta wygaszania i zastosowanie klina kwarcowego.