

Wykład kursowy. Krystalografia z elementami informatyki
II rok chemii: specjalność chemia z zastosowaniami informatyki

- 1. Wprowadzenie:** historia, podstawowe pojęcia i dzisiejsze znaczenie krystalografii w naukach przyrodniczych.
 - 1.1 Definicja kryształu (morfologiczna, strukturalna, dyfrakcyjna) i program wykładu.
 - 1.2 Obliczenia (komputerowe) w krystalografii.
- 2. Krystalografia geometryczna i strukturalna.**
 - 2.1 Symetria.
 - 2.2 Symetria punktowa.
 - 2.3 Symetria cząstek chemicznych i dowolnych obiektów „zamkniętych”, symetria krystalograficzna vs. niekrystalograficzna.
 - 2.4 Morfologia, symetria właściwości makroskopowych kryształów.
 - 2.5 Sieć krystaliczna, symetria translacyjna, komórka elementarna - - budowa mikroskopowa kryształów; układy krystalograficzne, sieci Bravais'go.
 - 2.6 Projekcje stereograficzne, goniometria, kierunki krystalograficzne, płaszczyzny i pasy. Podstawy rachunku pasowego.
 - 2.7 Matematyczne opisy operacji symetrii: macierze, kwaterniony.
 - 2.8 Grupy punktowe, tablice mnożenia operacji symetrii.
 - 2.9 Symetria translacyjna, grupy przestrzenne.
 - 2.10 Macierzowy opis symetrii obiektów „otwartych”, działania na macierzach.
 - 2.11 Reprezentacja graficzna grup przestrzennych.
- 3. Dyfraktografia.**
 - 3.1 Falowa natura promieniowania elektromagnetycznego i cząstek elementarnych.
 - 3.2 Interferencja i dyfrakcja, transformaty Fouriera, rozdzielczość.
 - 3.3 Rentgenografia, elektronografia, neutronografia..
 - 3.4 Wzór Bragga; sieć odwrotna, macierz orientacji, obroty Eulera.
 - 3.5 Dyfraktometria proszkowa vs. dyfraktometria monokrystaliczna.
 - 3.6 Atomowy czynnik rozpraszania i czynnik struktury.
 - 3.7 Prawo Friedla, klasy Lauego.
 - 3.8 Wygaszenia systematyczne i klasy dyfrakcyjne.
 - 3.9 Udokładnianie struktury – metoda najmniejszych kwadratów.
 - 3.10 Anomalne rozpraszanie, konfiguracja absolutna.
 - 3.11 Problem fazowy i badania strukturalne.
- 4. Krystalochemia.**
 - 4.1 Oddziaływania w sieci krystalicznej, promienie atomowe, jonowe, van der Waalsa.
 - 4.2 Wielościany koordynacyjne.
 - 4.3 Klasyfikacje struktur krystalicznych: metaliczne, jonowe, kowalencyjne, molekularne, z wiązaniami wodorowymi, inkluzyjne, makromolekularne.
 - 4.4 Pokrewieństwo krystalograficzne, izotypia, heterotypia, roztwory stałe, diadochia, izomorfizm, polimorfizm.
 - 4.5 Przekształcenia strukturalne i tensorowy opis właściwości kryształów, grupy graniczne.
 - 4.6 Mikroskop polaryzacyjny, optyka liniowa i nieliniowa.

Piśmiennictwo:

- Z. Kosturkiewicz „Metody krystalografii”, Wydawnictwo Naukowe UAM, Poznań, 2000.
Z. Bojarski, M. Gigła, K. Stróż, M. Surowiec „Krystalografia. Podręcznik wspomagany komputerowo”, PWN, Warszawa, 2001.
Z. Bojarski, H. Habla, M. Surowiec „Materiały do nauki krystalografii”, Uniwersytet Śląski, 1993.
J. Chojnacki „Elementy krystalografii chemicznej i fizycznej”, PWN, Warszawa, 1971.
M. Van Meerssche, J. Feneau-Dupont „Krystalografia i chemia strukturalna“, PWN, Warszawa, 1984.
T. Penkala „Zarys krystalografii”, PWN, Warszawa, 1983.
C. Giacovazzo, H. L. Monaco, D. Viterbo, F. Scordari, G. Gilli, G. Zanotti, M. Catti „Fundamentals of Crystallography”, Oxford University Press, 1992.