

Wykład - Krystalochemia

II rok Chemii: specjalność Chemia materiałowa

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 Krystalochemia.**
 - 3.1 Oddziaływania w sieci krystalicznej, promienie atomowe, jonowe, van der Waalsa.
 - 3.2 Klasyfikacje struktur krystalicznych: metaliczne, jonowe, kowalencyjne, molekularne, z wiązaniami wodorowymi, inkluzyjne, makromolekularne.
 - 3.3 Wielościany koordynacyjne.
 - 3.4 Pokrewieństwo krystalograficzne, izotypia, heterotypia, roztwory stałe, diadochia, izomorfizm, polimorfizm.
 - 3.5 Przekształcenia strukturalne i tensorowy opis właściwości kryształów, grupy graniczne.
- 5 Dyfraktografia.**
 - 5.1 Falowa natura promieniowania elektromagnetycznego i cząstek elementarnych.
 - 5.2 Interferencja i dyfrakcja.
 - 5.3 Kryształ jako siatka dyfrakcyjna, wzór Bragga, transformaty Fouriera.
 - 5.4 Rentgenografia, elektronografia, neutronografia.
 - 5.5 Problem fazowy i badania strukturalne.

Piśmiennictwo:

- Z. Bojarski, M. Gigla, 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.
- Z. Kosturkiewicz „Metody krystalografii”, Wydawnictwo Naukowe UAM, Poznań, 2000.
- C. Giacobozzo, H. L. Monaco, D. Viterbo, F. Scordari, G. Gilli, G. Zanotti, M. Catti „Fundamentals of Crystallography”, Oxford University Press, 1992.