

Plan seminariów z Krystalochemii

Seminarium 1

Pojęcia podstawowe: definicja kryształu, budowa kryształu, sieć rzeczywista, sieci Bravais'a, symetria zewnętrzna i wewnętrzna.

Sprawdzian 20 min. będzie obejmować:

- rodzaje elementów symetrii,
- symbole wszystkich elementów,
- znajomość układów krystalograficznych z uwzględnieniem występujących w nich elementów symetrii,
- działanie elementów symetrii,
- co to są i co opisują klasy symetrii,
- co to są i co opisują grupy przestrzenne.

Seminarium 2

Metody obrazowania struktur krystalicznych: w czasopismach naukowych, rysowanie rzutów struktur, rysunki trójwymiarowe, określanie długości wiązań chemicznych i kątów walencyjnych, korzystanie ze zbiorów CIF.

Sprawdzian 20 min. będzie obejmować:

- przekształcenia symetryczne: określanie współrzędnych pozycji równoznacznych wybranych elementów symetrii (środka symetrii, osi dwukrotnej, dwukrotnej osi śrubowej, płaszczyzny zwierciadlanej, płaszczyzn poślizgu a , b , c oraz n).
- określanie układu krystalograficznego oraz symbolu grupy przestrzennej na podstawie rozkładu elementów symetrii,
- określanie rodzajów elementów symetrii kryształu na podstawie symbolu grupy przestrzennej dla układów: trójskośnego, jednoskośnego i rombowego.

Seminarium 3

Prezentacja bazy danych CSD.

Sprawdzian 20 min. będzie obejmować:

- typy i charakterystyka kryształów,
- zasadę najgęstsze upakowania,
- znajomość długości niektórych wiązań chemicznych oraz kątów walencyjnych,
- zasady identyfikacji oddziaływań wewnątrz- i międzycząsteczkowych,
- geometryczna charakterystyka wybranych oddziaływań międzycząsteczkowych.

Seminarium 4

Grupy przestrzenne układów trójskośnego, jednoskośnego (sieci P i C) i rombowego (sieci P): zmiana symbolu grupy po zamianie osi układu krystalograficznego, określanie współrzędnych pozycji ogólnych i szczególnych.

Sprawdzian 20 min. będzie obejmować:

- zakres możliwych informacji zawartych w bazie CSD,
- sposoby formułowania zadań ze szczególnym uwzględnieniem oddziaływań wewnątrz- i międzycząsteczkowych,
- możliwość analizy geometrycznej struktur krystalicznych grup związków chemicznych.

Seminarium 5

Na zajęciach studenci prezentują wyniki analizy bazy danych CSD. W tym celu każda para studentów przedstawia referat (np. w PowerPoint) z wykorzystaniem rzutnika komputerowego. Prezentacja powinna zawierać wstęp historyczny i chemiczny dotyczący badanych związków, metodykę przeszukiwania bazy CSD, istotne szczegóły dotyczące uzyskanych informacji. Ponadto, w zależności od tematu badań, prezentacja powinna zawierać interpretację wyników z punktu widzenia właściwości chemicznych badanych związków, charakterystykę długości wiązań chemicznych i kątów walencyjnych, charakterystykę konformacyjną związków, informacje o oddziaływaniach wewnątrz- i międzycząsteczkowych w wybranych kryształach i inne istotne wiadomości. Na każdą prezentację przewidziano 10-15 min. Prezentacje będą oceniane indywidualnie wszyscy studenci i prowadzący zajęcia.

Pozytywna ocena czterech sprawdzianów będzie podstawą uzyskania zaliczenia wykładu.