

Wykład i ćwiczenia laboratoryjne z krystalografii

Wykłady będą się odbywać w środy o godz. 11:30 (s. AI BB) i we wtorki o godz. 14 (s. AII EF).

W zajęciach mogą brać udział studenci studiów magisterskich i doktoranci, którzy takiego kursu nie odbyli.

wykładowca: dr hab. Katarzyna Ślepokura

prowadzący ćwiczenia laboratoryjne: dr hab. K. Ślepokura, dr M. Siczek, mgr D. Budzikur

30 godzin wykładu, 30 godzin ćwiczeń laboratoryjnych

Założenia i cele przedmiotu:

Cel przedmiotu:

Celem przedmiotu jest przekazanie studentom wiedzy z zakresu podstaw metod dyfrakcyjnych badania substancji zarówno mono-, jak i polikrystalicznych oraz zastosowania tych metod do rozwiązywania problemów analitycznych i strukturalnych. Dodatkowym celem jest rozwinięcie umiejętności interpretacji wyników badań i pisania opracowań naukowych.

Efekty kształcenia:

umiejętność uzyskiwania kryształów przydatnych do badań strukturalnych, posługiwania się techniką dyfrakcyjną w chemii i jej stosowania do rozwiązywania problemów analitycznych, identyfikacyjnych i strukturalnych, korzystania z krystalograficznych baz danych i użycia danych strukturalnych w opisie właściwości i zachowania faz krystalicznych.

Forma i warunki zaliczenia:

Wykład: egzamin pisemny i ustny

Laboratorium: kartkówki przed zajęciami, sprawozdania z wykonania ćwiczeń (konieczne jest zaliczenie ośmiu z dziewięciu sprawozdań), referat (dla chętnych).

Treści merytoryczne przedmiotu:

Krystalografia geometryczna

1. Przestrzenie, przekształcenia, operacje symetrii;
2. Struktura krystaliczna. Motyw struktury krystalicznej;
3. Sieci przestrzenne – klasy Bravais'a;
4. Baza krystalograficzna;
5. Krystalograficzne operacje symetrii;
6. Grupy przestrzenne;
7. Typy grup przestrzennych;
8. Geometryczne klasy krystalograficzne;
9. Płaszczyzny sieciowe, proste sieciowe;
10. Sieć odwrotna;
11. Odstęp międzypłaszczyźniowy;
12. Transformacje w krystalografii;
13. Rodziny krystalograficzne;
14. Układy krystalograficzne.

Techniki badawcze

1. Mikroskopy: polowy, elektronowy, tunelowy, (sił atomowych);
2. Źródła promieni rentgenowskich i neutronów;
3. Właściwości fizyczne promieni X i neutronów, czynniki atomowe, absorpcja;
4. Filtry i monochromatory w technikach dyfrakcyjnych;
5. Techniki dyfrakcyjne (metoda kołysanego kryształu, metoda Weissenberga, dyfraktometria czterokołowa, dyfraktometria z kamerami CCD i detektorami typu Hybrid Photon Counting (HPC));
6. Czynniki struktury a translacyjne elementy symetrii;
7. Czynniki polaryzacyjny, czynnik Lorentza, ekstynkcja, czynnik krotności płaszczyzn sieciowych;
8. Techniki pomiaru natężeń refleksów;
9. Metody określania struktury krystalicznej;
10. Udokładnianie struktury krystalicznej.

Elementy krystalochemii

1. Strukturalne bazy danych.
2. Konfiguracja absolutna cząsteczek związku chemicznego a konfiguracja absolutna kryształów;
3. Doświadczalne wyznaczenie gęstości elektronowej w związkach chemicznych (wiązań chemicznych, orbitali d, wolnej pary elektronowej);
4. Klasyfikacja wiązań chemicznych (jonowe, atomowe, międzymetaliczne, typu van der Waalsa, wodorowe);
5. Struktura krystaliczna magnetyków i ferroelektryków;
6. Krystalografia makrocząsteczek - biologia molekularna – budowa białek, kwasów nukleinowych, polisacharydów, wirusów i innych "struktur życia";
7. Otrzymywanie monokryształów;
8. Mechanizmy wzrostu kryształów;
9. Defekty w kryształach;
10. Elektronografia;
11. Metody proszkowe;
12. Redukcja komórki sieciowej;
13. Badania kryształów w różnych temperaturach i ciśnieniach;
14. Polimorfizm – podgrupy i nadgrupy grup przestrzennych;
15. Struktura szkieł;
16. Etapy procesu krystalizacji;
17. Pojęcie własności fizycznej i jej opis tensorowy;
18. Grupy graniczne (ciągłe).

Zalecane podręczniki:

Th. Hahn (ed.): *International Tables for Crystallography. Volume A, 5th edition*, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 2002 (lub nowsze wydania)

J. P. Glusker, K.N. Trueblood: *Zarys rentgenografii kryształów*, PWN, Warszawa, 1977.

M. Van Meerssche, J. Feneau-Dupont: *Krystalografia i chemia strukturalna*, PWN, Warszawa, 1984.

P. Luger: *Rentgenografia strukturalna monokryształów*, PWN, Warszawa, 1989.

G. E. Bacon: *Neutron diffraction*, Clarendon Press, Oxford, 1975.

Z. Bojarski, M. Gigla, K. Stróż, M. Surowiec: *Krystalografia*, PWN, Warszawa, 1996.

Z. Kosturkiewicz: *Metody krystalografii*, Wydawnictwo Naukowe UAM, Poznań 2000.

C. Giacovazzo, H. L. Monaco, D. Viterbo, F. Scordari, G. Gilli, G. Zanotti, M. Catti: *Fundamentals of Crystallography*, IUCR, Oxford University Press, 1992.

Instrukcje do ćwiczeń dostępne na serwerze studenckim.