

Plan seminariów z *Krytalografii Biomolekuł*

Zajęcia odbywają się we wtorki w sali 5 oraz w czwartki i/lub piątki w sali 17 (bud. B).

	Tematyka zajęć	Termin zajęć. Sala (jeśli nie 5)
SEM 1/2	Definicja i budowa kryształu. Przestrzenie. Przekształcenia. Symetria. Operacje symetrii, krystalograficzne operacje symetrii. Elementy symetrii. Struktura krystaliczna. Motyw struktury krystalicznej. Sieci przestrzenne. Baza krystalograficzna. Komórka elementarna. Klasyfikacja sieci przestrzennych – klasy Bravais'a. Holoedrie. Krystalograficzne grupy przestrzenne. Typy grup przestrzennych. Klasyfikacja grup przestrzennych, geometryczne klasy krystalograficzne, rodziny i układy krystalograficzne.	21, 28 IV  gr. 1: godz. 10-11 gr. 2: godz. 11-12
SEM 3	<u>Sprawdzian 1</u> : Symetria. Rodzaje, działanie i symbole elementów symetrii. Elementy symetrii a układy krystalograficzne. Wyznaczanie współrzędnych pozycji symetrycznie równoważnych (dla wybranych elementów symetrii w trójskośnym, jednoskośnym i rombowym układzie krystalograficznym: $\bar{1}$ , 2, $2_1$ , $m$ , $a$ , $b$ , $c$ , $n$ ).	zostanie ustalony później
SEM 4	Pozycje ogólne i szczególne. Jednostka asymetryczna (część niezależna komórki elementarnej) i $Z'$ . Liczba cząsteczek formalnych w komórce elementarnej ( $Z$ ). Zmiana symbolu grupy przestrzennej po zmianie osi układu.	jw.
SEM 5	Konfiguracja absolutna. Chiralność i helikalność biomolekuł (na przykładzie wybranych leków, cukrów, aminokwasów, nukleotydów, białek, kwasów nukleinowych, cząsteczek bez asymetrycznych atomów węgla...). Praca z modelami przestrzennymi. Struktura absolutna kryształu. Typy chiralnych i achiralnych grup przestrzennych. Pary enancjomorficzne. Typy grup przestrzennych Sohncke'a.	jw.
SEM 6	<u>Sprawdzian 2</u> : Określanie układu krystalograficznego oraz symbolu grupy przestrzennej na podstawie graficznej prezentacji symetrii. $Z$ . Określenie symbolu grupy przestrzennej po zmianie osi układu. Typy grup przestrzennych „dozwolone” dla cząsteczek chiralnych.	jw.
SEM 7/8	Proste sieciowe i płaszczyzny sieciowe. Sieć odwrotna. Odstęp międzypłaszczyźniany. Równania kwadratowe sieci. Geometria i warunki dyfrakcji promieniowania X w monokryształach. Warunek Ewalda. Równanie Bragga. Położenie i intensywność refleksów. Symetria obrazu dyfrakcyjnego. Czynniki struktury a translacyjne elementy symetrii. Wygaszenia systematyczne.	jw.
SEM 9	<b>Wyznaczanie grupy dyfrakcyjnej.</b> Wyznaczenie klasy Lauego i układu krystalograficznego, analiza wygaszeń systematycznych i wyznaczenie grupy dyfrakcyjnej (zapropozowanie grupy przestrzennej) kryształu.	jw.  s. 17
SEM 10	<u>Sprawdzian 3</u> : Charakterystyczne i ciągłe promieniowanie X. Czynniki wpływające na wielkość absorpcji w kryształach. Równanie Bragga. Proste i płaszczyzny sieciowe. Określanie układu krystalograficznego metodami dyfrakcyjnymi. Wyznaczanie grupy dyfrakcyjnej przez analizę wygaszeń systematycznych. Określanie $Z$ w danym kryształach na podstawie znajomości jego gęstości, parametrów komórki elementarnej. Wyznaczanie kątów ugięcia dla danego kryształu i warunków pomiarowych.	zostanie ustalony później