

SPIS TREŚCI

Przedmowa	11
1. Podstawowe prawa i pojęcia	13
1.1. Sieć krystaliczna i sieć przestrzenna	13
1.2. Osie krystalograficzne i jednostki osiowe	17
1.3. Ściana jednostkowa i stosunek osiowy	18
1.4. Układy krystalograficzne	20
1.5. Węzły, proste i płaszczyzny w sieciach przestrzennych	23
1.5.1. Węzły	23
1.5.2. Proste	25
1.5.3. Płaszczyzny	26
1.5.4. Proste i płaszczyzny w układzie heksagonalnym	31
1.6. Pas płaszczyzn — prawo pasowe	33
1.7. Ważniejsze wzory krystalograficzne	35
1.7.1. Kąty między płaszczyznami	35
1.7.2. Objętość komórki elementarnej	36
1.7.3. Odległości międzywęzłowe	36
1.7.4. Odległości międzypłaszczyznowe	36
1.8. Rachunek wektorowy i macierzowy w krystalografii	38
1.8.1. Krystalograficzne układy osi współrzędnych	38
1.8.2. Przestrzeń odwrotna	40
1.8.3. Rachunek macierzowy	50
1.9. Programy komputerowe	65
1.9.1. Układy krystalograficzne. Wskaźnikowanie kierunków i płaszczyzn krystalograficznych	65
1.9.2. Obliczenia krystalograficzne	66
1.9.3. Sieć odwrotna	68
1.10. Ćwiczenia	68
2. Projektcja sferyczna, cyklograficzna, stereograficzna i gnomoniczna	84
2.1. Projektcja sferyczna	84
2.2. Projektcja cyklograficzna i stereograficzna	85
2.3. Określenie położenia punktu na projekcji sferycznej, cyklograficznej i stereograficznej	87

2.4.	Projekcja osi krystalograficznych	93
2.5.	Projekcja płaszczyzny pasowej	93
2.6.	Stereograficzne projekcje standardowe monokrystalów	95
2.7.	Operacje na siatce Wulfa	97
2.7.1.	Wyznaczanie punktów o danych współrzędnych kątowych	97
2.7.2.	Pomiar kątów	99
2.7.3.	Wyznaczenie projekcji stereograficznej płaszczyzny przy zmianie płaszczyzny projekcji	100
2.7.4.	Konstrukcja małych kół na projekcji, reprezentujących miejsca geometryczne punktów równoodległych kątowo od danego punktu	100
2.8.	Projekcja gnomoniczna	102
2.9.	Program komputerowy	103
2.10.	Ćwiczenia	104
3.	Symetria w morfologii kryształów. Grupy punktowe	122
3.1.	Symetria względem punktu — środek symetrii	122
3.2.	Symetria względem prostej — oś symetrii	123
3.3.	Symetria względem płaszczyzny — płaszczyzna symetrii	124
3.4.	Osie inwersyjne	125
3.5.	Projekcje elementów symetrii	129
3.6.	Kombinacje elementów symetrii	129
3.6.1.	Kombinacje osi symetrii	130
3.6.2.	Kombinacje osi symetrii i środka symetrii	132
3.6.3.	Kombinacje osi symetrii i osi inwersyjnych	134
3.7.	Grupy punktowe — klasy symetrii	135
3.8.	Postacie kryształów	140
3.8.1.	Przegląd postaci kryształów w układach krystalograficznych i w przyporządkowanych im klasach symetrii	148
3.8.2.	Określenie klasy symetrii kryształów	167
3.8.3.	Postacie enancjomorficzne	169
3.8.4.	Pokrój kryształów	171
3.9.	Elementy symetrii i grupy punktowe w ujęciu macierzowym	172
3.9.1.	Środek symetrii	173
3.9.2.	Płaszczyzny symetrii	174
3.9.3.	Osie symetrii	177
3.9.4.	Osie inwersyjne	181
3.9.5.	Grupy punktowe	182
3.10.	Opis programu komputerowego	186
3.10.1.	Elementy symetrii i grupy punktowe	186
3.10.2.	Postacie proste i złożone	187
3.11.	Ćwiczenia	188
4.	Symetria w budowie wewnętrznej ciał krystalicznych. Grupy przestrzenne	198
4.1.	Translacja. Komórki elementarne Bravais'go	198
4.2.	Proste grupy przestrzenne	203
4.3.	Symetria w budowie wewnętrznej ciał krystalicznych	206
4.3.1.	Osie śrubowe	206
4.3.2.	Płaszczyzny ślizgowe	210
4.4.	Grupy przestrzenne	212
4.5.	Punkty symetrycznie równoważne	217
4.6.	Charakterystyka grup przestrzennych w „Międzynarodowych tablicach krystalograficznych”	220

4.7. Wstęp do analitycznego ujęcia grup przestrzennych	222
4.7.1. Analityczny opis osi śrubowych i płaszczyzn ślizgowych	224
4.7.2. Generowanie nowych elementów symetrii w wyniku translacji	227
4.8. Ćwiczenia	232
5. Klasyfikacja ciał krystalicznych. Typy struktur	243
5.1. Klasyfikacja ciał krystalicznych oparta na wiązaniach chemicznych	243
5.2. Klasyfikacja ciał krystalicznych oparta na składzie chemicznym i stosunkach stechiometrycznych	246
5.3. Klasyfikacja struktur według symboliki Pearsona	248
5.4. Liczba koordynacyjna. Wielościan koordynacyjny	251
5.5. Promienie atomowe i jonowe	253
5.6. Zwarte przestrzenne ułożenie kul o jednakowym promieniu	257
5.6.1. Zwarta warstwa heksagonalna	257
5.6.2. Zwarte przestrzenne ułożenie kul	258
5.6.3. Luki	262
5.7. Regularne przestrzenne centrowane ułożenie kul	265
5.8. Struktury pierwiastków	267
5.8.1. Struktura A1 — typ miedzi	269
5.8.2. Struktura A2 — typ wolframu ot	270
5.8.3. Struktura A3 — typ magnezu	272
5.8.4. Struktura A4 — typ diamentu	273
5.8.5. Struktura A9 — typ grafitu	275
5.8.6. Fullereny	277
5.9. Struktury związków AB	279
5.9.1. Struktura B1 — typ chlorku sodu, NaCl	279
5.9.2. Struktura £2 — typ chlorku cezu, CsCl	282
5.9.3. Struktura B3 — typ sfalerytu (blendy cynkowej), ZnS	284
5.9.4. Struktura B4 — typ wurcytu, ZnS	286
5.10. Struktury związków AB ₂	287
5.10.1. Struktura C1 — typ fluorytu, CaF ₂	287
5.10.2. Struktura C2 — typ pirytu, FeS ₂	289
5.10.3. Struktura C4 — typ rutyłu, TiO ₂	290
5.11. Struktury związków o bardziej złożonym składzie chemicznym A _m B _n X ₂	291
5.11.1. Struktura E2 ₁ — typ perowskitu, CaTiO ₃	291
5.11.2. Struktura H ₁ — typ spinelu, AB ₂ O ₄	294
5.12. Struktury związków z więcej niż dwoma rodzajami atomów i wyodrębnionymi kompleksami anionowymi lub kationowymi A _m B _n X _z	296
5.12.1. Struktura GO, — typ kalcytu, CaCO ₃ , A[BX ₃]	297
5.12.2. Struktura J1j — typ sześciochloroplatynianu potasu, K ₂ [PtCl ₆], A ₂ [BX ₆] . . .	298
5.13. Program opisujący typy struktur	299
5.14. Ćwiczenia	301
6. Rzeczywista budowa ciał krystalicznych	311
6.1. Defekty punktowe	313
6.2. Roztwory stałe	316
6.2.1. Roztwory podstawieniowe	317
6.2.2. Roztwory międzywęzłowe	318
6.2.3. Związki niestechiometryczne	319
6.3. Defekty liniowe — dyslokacje	320
6.3.1. Geometria dyslokacji	320

6.3.2. Reakcje między dyslokacjami	324
6.3.3. Ruch dyslokacji	326
6.4. Defekty płaszczynowe (powierzchniowe)	329
6.4.1. Granice wąskokątowe	330
6.4.2. Granice szerokokątowe	332
6.4.3. Granice bliźniacze	334
6.4.4. Błędy ułożenia	336
6.4.5. Granice domen antyfazowych	337
6.5. Opis programu komputerowego ilustrującego defekty w sieci krystalicznej	338
6.5.1. Defekty punktowe	338
6.5.2. Wspinanie się dyslokacji	339
6.5.3. Poślizg dyslokacji	339
6.6. Ćwiczenia	339
•	
7. Rentgenowska analiza strukturalna	350
7.1. Geometria dyfrakcji promieni rentgenowskich	352
7.1.1. Równania Lauego	352
7.1.2. Równanie Bragga	358
7.1.3. Zmodyfikowane równania kwadratowe	361
7.1.4. Sieć odwrotna a geometria dyfrakcji. Równoznaczność równań Lauego i równania Bragga	362
7.2. Natężenie rentgenowskich refleksów dyfrakcyjnych	366
7.2.1. Atomowy czynnik rozpraszania. Czynnik struktury	366
7.2.2. Systematyczne wygaszanie refleksów dyfrakcyjnych	371
7.2.3. Prawo Friedla. Grupy dyfrakcyjne Lauego	375
7.3. Metody rentgenowskiej analizy strukturalnej	376
7.3.1. Metody badania monokryształów	377
7.3.2. Metody badania polikryształów	390
7.3.3. Metody specjalne	397
7.4. Program komputerowy opisujący dyfrakcję promieniowania rentgenowskiego	398
7.5. Ćwiczenia	399
8. Kwazikrystaliczny stan materii	408
Wstęp	408
Zasada translacji a elementy symetrii — złoty iloraz	409
Jednowymiarowa sieć przestrzenna — łańcuchy Fibonacciego	410
4. Dwuwymiarowe pokrycia Penrose'a — właściwości	411
5. Modelowanie przestrzenne struktur aperiodycznych	413
8.5.1. Romboedry Ammanna	414
8.5.2. Cztery typy komórek elementarnych sieci aperiodycznych	414
8.5.3. Ikosaedr Mackeya	416
Występowanie niekrystalograficznych osi symetrii	417
Otrzymywanie struktur kwazikrystalicznych	418
Podsumowanie	419
Ćwiczenia	419
Literatura	
Dodatek A. Wektory	422
A.1. Wprowadzenie	422
A.2. Iloczyn skalarny	424

A.3. Iloczyn wektorowy	425
A.4. Iloczyn mieszany wektorów	427
Dodatek B. Macierze	428
B.1. Wprowadzenie	428
B.2. Wyznacznik macierzy	429
B.3 Mnożenie macierzy	430
B.4. Macierz jednostkowa	431
B.5. Dodawanie macierzy	432
B.6. Macierz odwrotna	432
B.7. Macierz transponowana	435
Dodatek C. Grupy	436
Literatura zalecana	439