

## **Wstęp**

### **1. Pojęcia podstawowe**

**1.1. Kryształ, budowa substancji krystalicznej**

**1.2. Transformacje układów współrzędnych**

**1.3. Zadania do rozdziału pierwszego**

### **2. Symetria punktowa obiektów skończonych**

**2.1. Opis symetrii. Operacje i elementy symetrii. Zgodność symetrii z siecią translacyjną**

**2.1.1. Warunek izometryczności w ortonormalnym układzie współrzędnych**

**2.1.2. Warunek izometryczności w dowolnym układzie współrzędnych**

**2.1.3. Operacje symetrii i elementy symetrii w przestrzeni trójwymiarowej**

**2.1.4. Operacje i elementy symetrii w przestrzeniach dowolnego wymiaru**

**2.1.5. Operacje symetrii w przestrzeni trójwymiarowej – opis matematyczny**

**2.2. Rozpoznawanie operacji symetrii**

**2.2.1. Niezmienniki operacji symetrii**

**2.2.2. Wyznaczanie położenia elementów symetrii**

**2.3. Grupy symetrii**

**2.4. Składanie operacji symetrii**

**2.4.1. Współistnienie osi symetrii**

**2.4.2. Współistnienie płaszczyzn symetrii i osi**

**2.5. Klasyfikacja i symbolika grup punktowych**

**2.5.1. Przypisywanie grupy punktowej do obiektów**

**2.5.2. Projekcja stereograficzna grup symetrii**

**2.6. Grupy magnetyczne**

**2.7. Zadania do rozdziału drugiego**

### **3. Sieci przestrzenne**

**3.1. Układy krystalograficzne**

**3.2. Definiowanie pozycji, kierunków i płaszczyzn w krystalografii**

**3.2.1. Definiowanie położenia punktu**

**3.2.2. Proste sieciowe**

**3.2.3. Płaszczyzny sieciowe**

**3.2.4. Pasy płaszczyzn**

9

11

12

19

21

27

27

28

29

30

33

34

38

39

41

44

45

46

48

49

52

54

58

61

65

65

67

67

67

68

78

3.3.	Obliczanie parametrów geometrycznych	79
3.4.	Morfologia kryształów	84
3.4.1.	Opis	84
3.4.2.	Postacie kryształów	87
3.5.	Zadania do rozdziału trzeciego	98
4.	Symetria obiektów nieskończonych	101
4.1.	Operacje symetrii w nieskończonych sieciach translacyjnych	101
4.2.	Symetria sieci translacyjnych	105
4.3.	Operacje symetrii w kryształach	109
4.4.	Grupy przestrzenne	111
4.5.	Odczytywanie informacji zawartej w symbolu grupy przestrzennej	115
4.6.	Opis przekształceń symetrii przy użyciu macierzy czterowymiarowych	118
4.6.1.	Sposoby zapisu operacji symetrii zawierających translację	118
4.6.2.	Przesuwanie elementu symetrii do nowego położenia	119
4.7.	Zadania do rozdziału czwartego	121
5.	Typowe struktury pierwiastków i związków nieorganicznych	123
5.1.	Najgęstsze upakowanie jednakowych kul	124
5.2.	Struktury pierwiastków	127
5.3.	Struktury związków chemicznych	130
5.4.	Izomorfizm i polimorfizm	134
6.	Oddziaływania międzycząsteczkowe w kryształach	143
6.1.	Wiązania wodorowe	144
6.2.	Wiązania halogenowe i im pokrewne	148
6.3.	Oddziaływania warstwowe	150
6.4.	Analiza oddziaływań międzycząsteczkowych w kryształach. Powierzchnia Hirshfelda	152
7.	Krystalografia eksperymentalna. Metody dyfrakcyjne	157
7.1.	Warunki dyfrakcji Lauego i Braggów. Konstrukcja Ewalda. Sieć odwrotna	157
7.2.	Budowa dyfraktometrów monokrystalicznych	163
7.3.	Przebieg analizy strukturalnej	170
7.3.1.	Metody rozwiązywania struktur	177
7.3.2.	Udokładnianie struktur krystalicznych	185
7.3.3.	Symetria dyfrakcyjnej sieci odwrotnej. Wyznaczenie grupy przestrzennej. Wygaszenia systematyczne	187
7.4.	Rozpraszanie anomalne i wyznaczenie struktury absolutnej	194
7.5.	Komplikacje. Nieuporządkowanie strukturalne oraz kryształy zbliźnionzone	201
7.6.	Dyfrakcja elektronowa	209
7.7.	Dyfrakcja neutronowa	212
7.8.	Metody badania materiałów polikrystalicznych	216
7.9.	Zadania do rozdziału siódmego	222
8.	Otrzymywanie kryształów	223
8.1.	Wstęp ogólny, znaczenie i zakres teorii krystalizacji	223
8.2.	Techniki prowadzenia krystalizacji	230
8.2.1.	Laboratoryjne metody hodowli kryształów	230
8.2.2.	Przemysłowe metody wzrostu kryształów	237
8.2.3.	Otrzymywanie warstw epitaksjalnych	240
9.	Właściwości fizyczne kryształów i ich związek z symetrią	243
9.1.	Tensorowy charakter właściwości fizycznych	244
9.2.	Związek symetrii kryształu z symetrią właściwości fizycznych	247

9.3.	Klasy graniczne Curie i ich znaczenie	250
9.4.	Zadania do rozdziału dziewiątego	264
10.	Dodatek, uzupełnienia	265
10.1.	Iloczyn skalarny	265
10.2.	Iloczyn wektorowy	268
10.3.	Wyznaczanie składowej translacyjnej operacji symetrii zapewniającej zgodność z translacjami sieciowymi	270
10.4.	Symetria w wyższych wymiarach, zagadnienie własne	273
	Literatura polecana	281