

# KOMPUTEROWE ĆWICZENIA WYZNACZANIA GRUP PRZESTRZENNYCH Z WYGASZEŃ SYSTEMATYCZNYCH

**Renata Budzianowska, Armand Budzianowski i Andrzej Katrusiak**

*Zakład Krystalografii UAM, ul. Grunwaldzka 6, 60-780 Poznań  
e-mail: renia@hpc.amu.edu.pl, armand@amu.edu.pl, katran@amu.edu.pl.*

Krystalografia - dziedzina nauki przyciągająca swoim pięknem, ale również "złożonością" zależności symetrii struktury i ich obrazów dyfrakcyjnych, przerażająca niektórych studentów. Chociaż obecnie podczas rutynowych pomiarów dyfraktometrycznych najczęściej etap analizy wygaszeń systematycznych pozostawiany jest komputerom, w ramach ćwiczeń z krystalografii studenci powinni dobrze posiadać elementarną wiedzę o symetrii i dyfrakcji, a także o wyznaczaniu symetrii kryształów na podstawie wygaszeń systematycznych. Ćwiczenia z wygaszeń systematycznych zazwyczaj ilustrowane są głównie zdjęciami rentgenowskimi warstwic. W celu zarejestrowania takich warstwic do celów dydaktycznych należy wyszukać kryształy odpowiedniej jakości i o interesującej nas symetrii. W ten sposób można latami zbierać środki dydaktyczne, powoli powiększając kolekcję, która w miarę użytkowania ulega niszczeniu i jest dekompletowana. Tymczasem coraz więcej studentów doskonale obsługuje komputery.

Wychodząc naprzeciw potrzebom dydaktycznym i obeznaniu studentów z komputerami opracowaliśmy w oparciu o możliwości istniejących aplikacji komputerowych, dokument umożliwiający w prosty sposób generowanie niezniekształconych warstwic (analogicznych do warstwic z komory precesyjnej lub de Jounga-Baumana) z wygaszeniami systematycznymi dla żądanej grupy przestrzennej. Wykorzystując ten zestaw ćwiczeń do wyznaczania grup przestrzennych z obrazów dyfrakcyjnych można m.in.: obserwować wygaszania refleksów związane z poszczególnymi elementami symetrii podczas generowania obrazu dyfrakcyjnego warstwic dla wybranej grupy przestrzennej; dokonywać szybkiego porównania różnych warstwic; analizować wygaszenia od jednego elementu symetrii w różnych kierunkach.

Wykonany przez nas komputerowy zestaw do ćwiczeń można wykorzystywać do zajęć w zespołach, indywidualnych ćwiczeń studentów, a także do przygotowania zadań na kolokwia.