

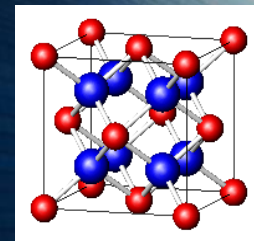


ZAKŁAD KRYSTALOGRAFII

Wydział Chemii UMCS



Kierownik Zakładu:
prof. dr hab. Stanisław Pikus



Pracownicy

naukowo-dydaktyczni:

prof. dr hab. Anna Koziół

dr hab. Daniel Kamiński

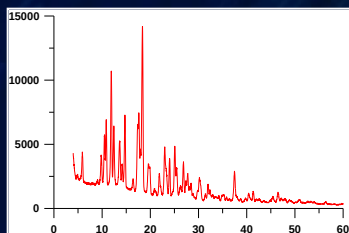
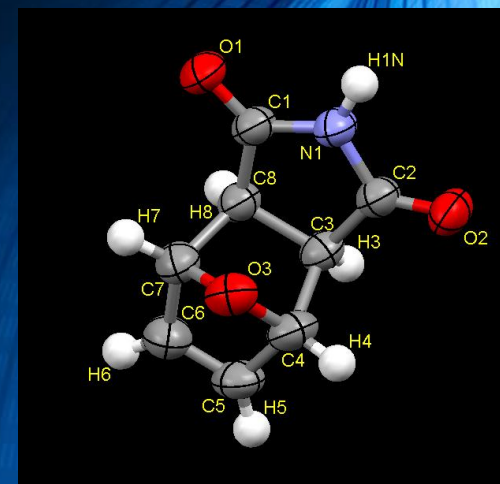
dr Barbara Mirosław

dydaktyczni

dr Elżbieta Olszewska

doktoranci:

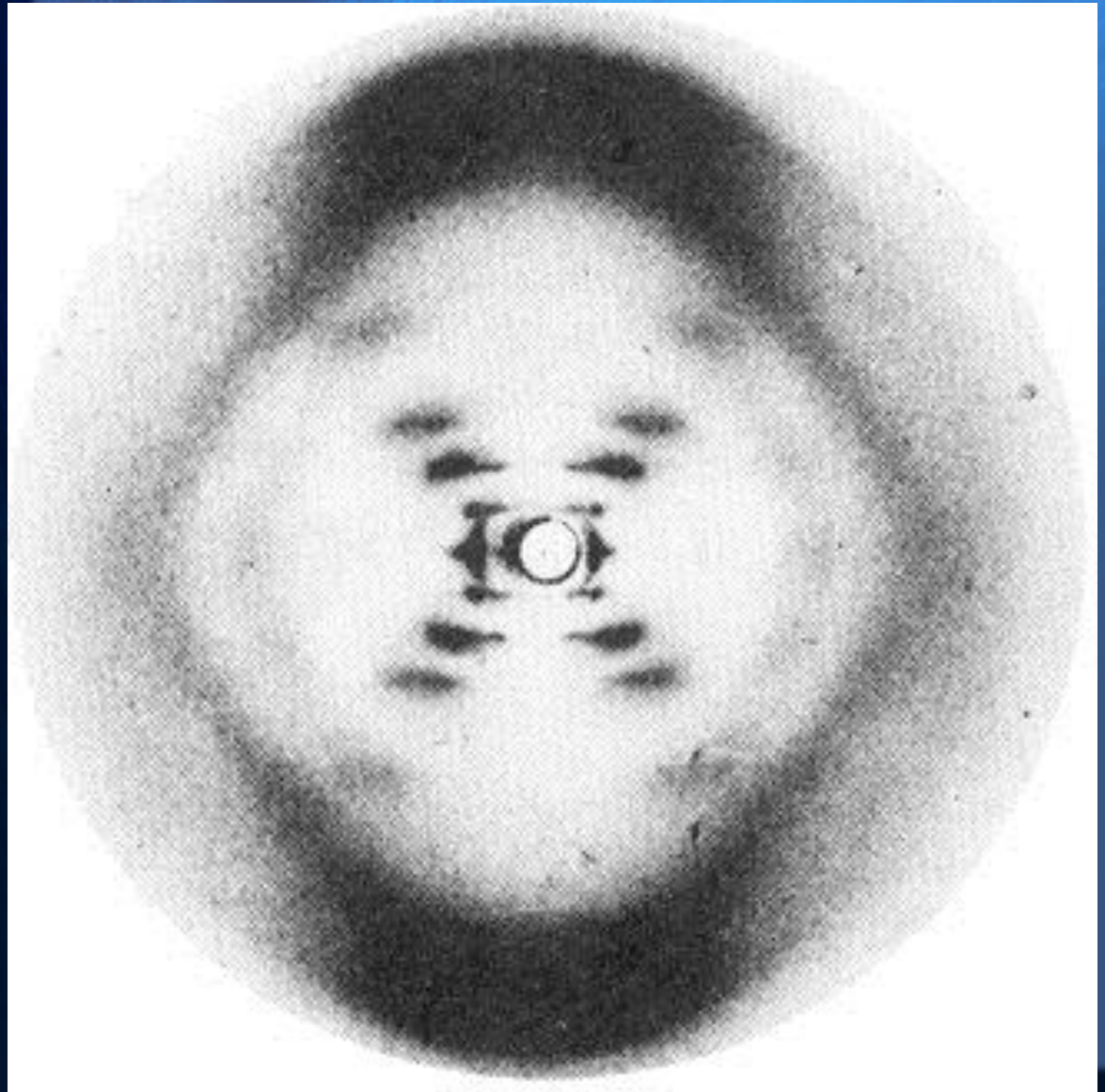
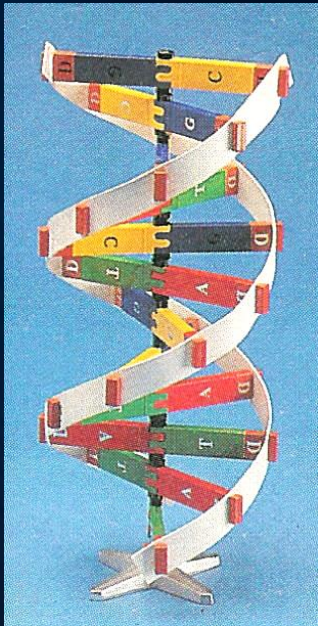
mgr Urszula Maciołek



B-DNA

R. Franklin
1952

J. D. Watson,
F. H. C. Crick
1954

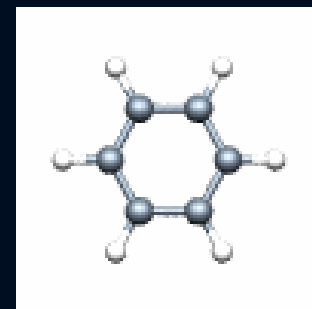


DYFRAKCJA PROSZKOWA

- ✓ Nowoczesne dyfrakcyjne metody badania ciał stałych
- ✓ Synteza mezoporowatych materiałów o uporządkowanej budowie

DYFRAKCJA MONOKRYSTAŁÓW

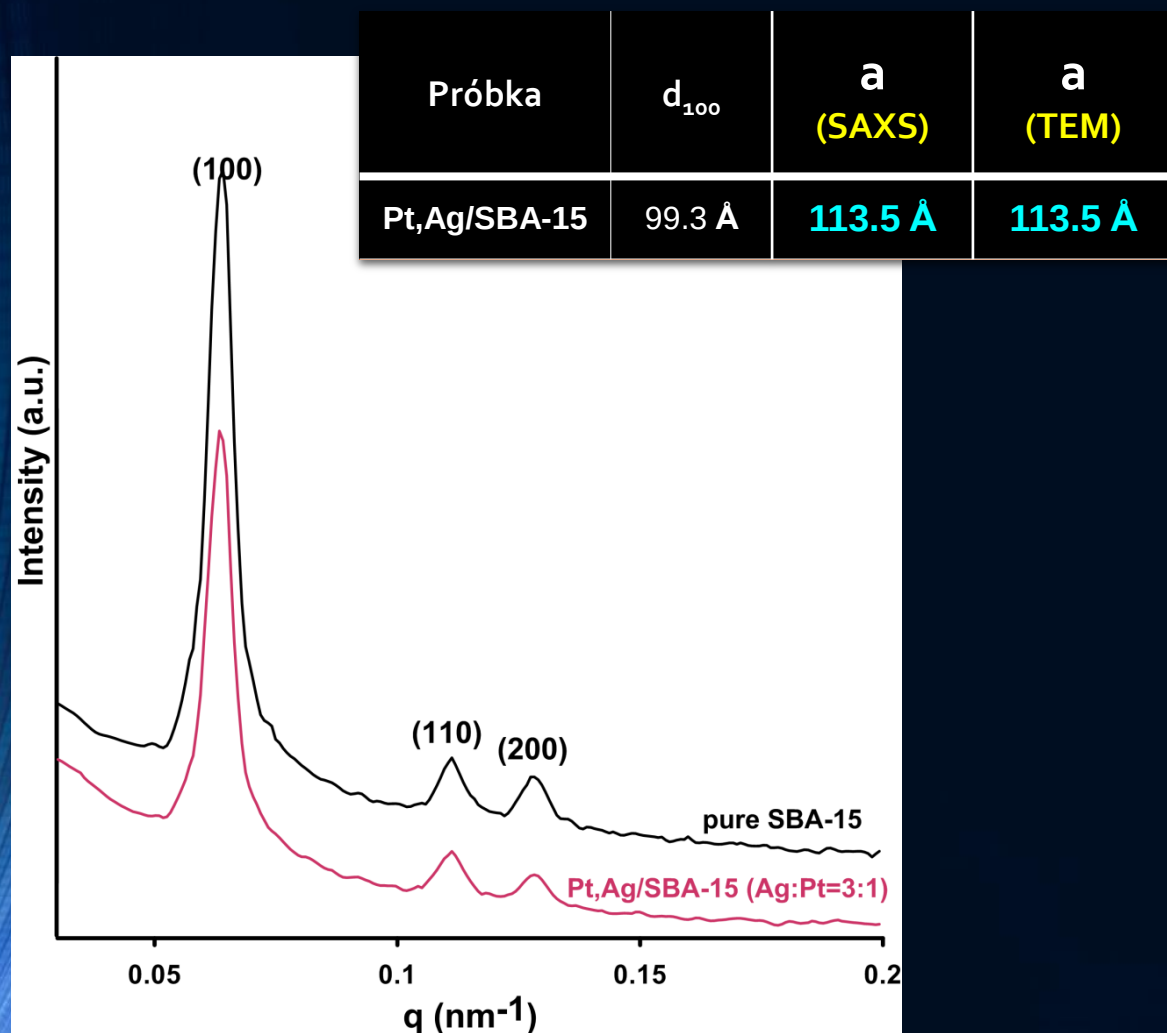
- ✓ Krystalochemia organiczna
- ✓ Synteza i badania strukturalne stereochemii kompleksów metali z ligandami heterocyklicznymi.
- ✓ Stereochemia związków heterocyklicznych, wykazujących aktywność biologiczną.
- ✓ Badanie strukturalne stereochemii związków heterocyklicznych, pochodnych triazoli i ich asocjacji w fazie krystalicznej.



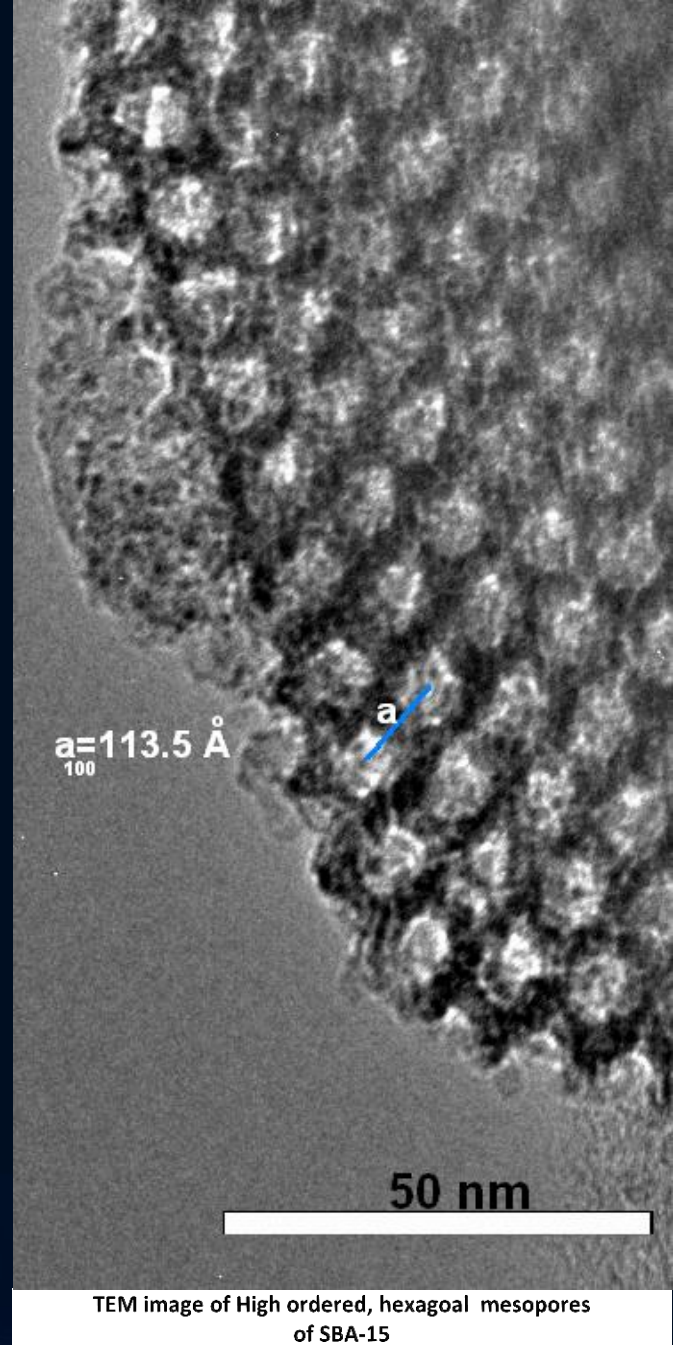
Nowoczesne dyfrakcyjne metody badania ciał stałych

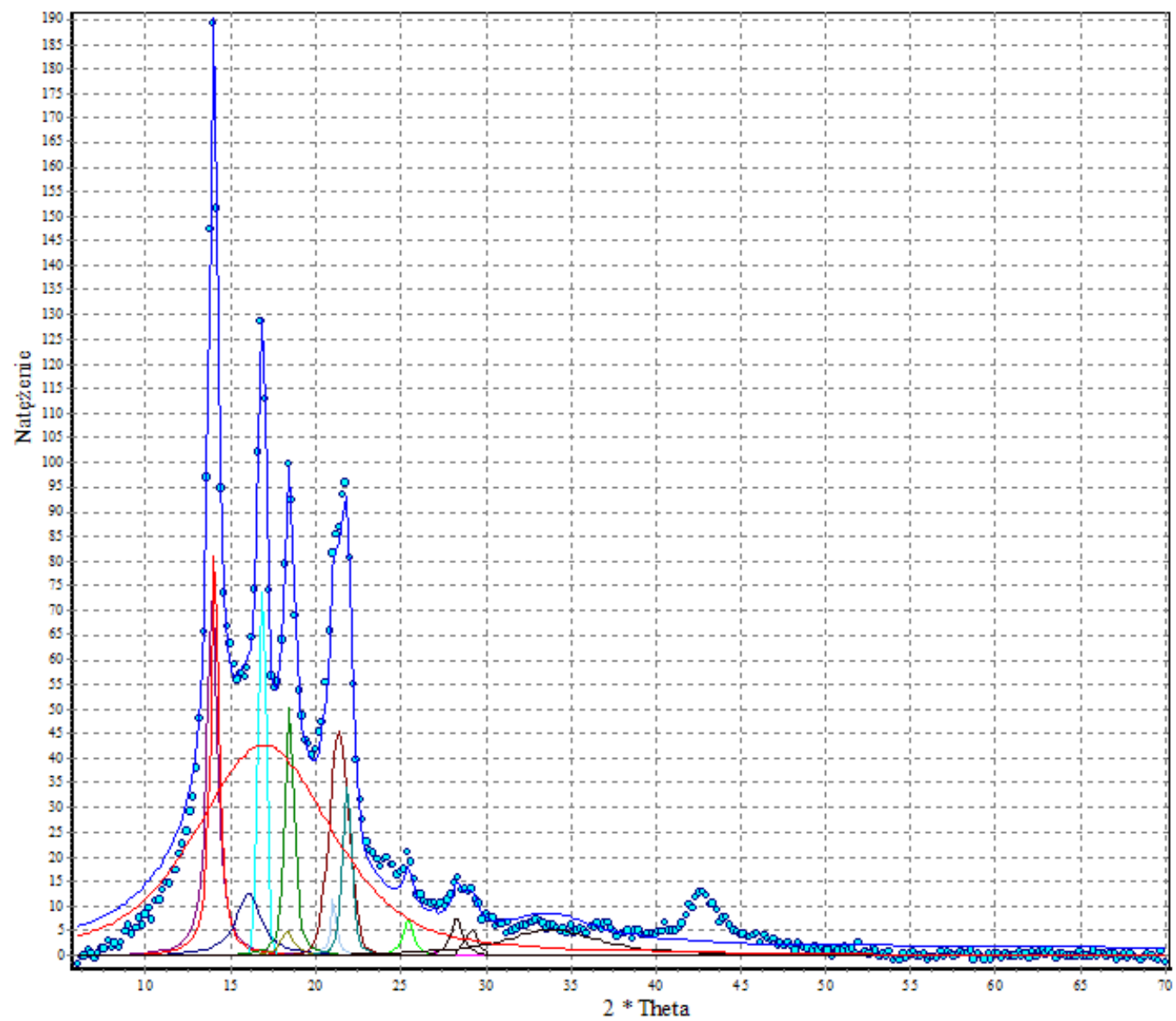
	Rentgenowska analiza fazowa – możliwości wykorzystania programu XRAYAN, obróbka komputerowa dyfraktogramu.
	Rentgenowska analiza fazowa – analiza jakościowa dyfraktogramu nieznanej próbki (układy jedno i wielofazowe).
	Analiza ilościowa – obróbka danych, wyznaczanie krzywej kalibracyjnej
	Analiza ilościowa – oznaczanie ilości składnika na podstawie metody wzorca wewnętrznego.
	Metoda Rietvelda – tworzenie zestawu wejściowych danych strukturalnych.
	Metoda Rietvelda – analiza układów dwufazowych.
	Wyznaczanie stopnia krystaliczności wybranych próbek polimerów – program WAXSFIT.
	Precyzyjny pomiar stałych sieciowych – wyznaczanie dokładnych stałych sieciowych dla wzorca SRM-76.

Małokątowe rozpraszanie promieniowania X (SAXS)



SAXS dla SBA-15 i Pt,Ag/SBA-15.





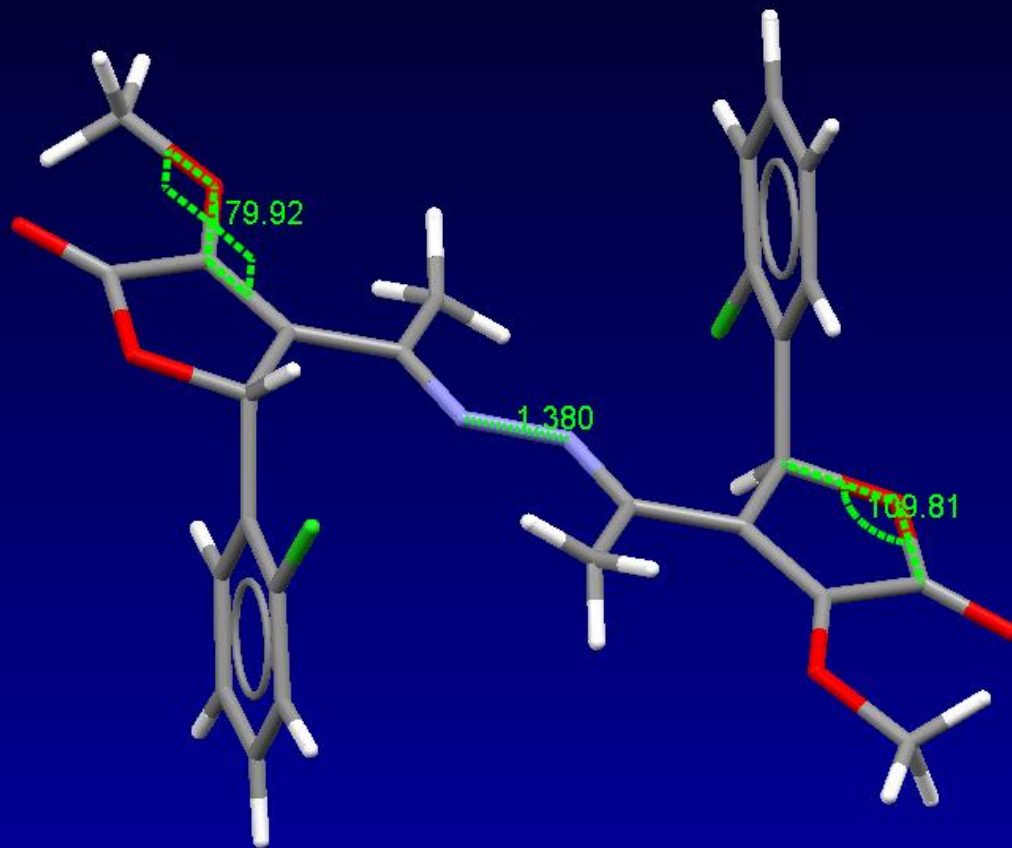
Stereochemia cząsteczek

Długości wiązań

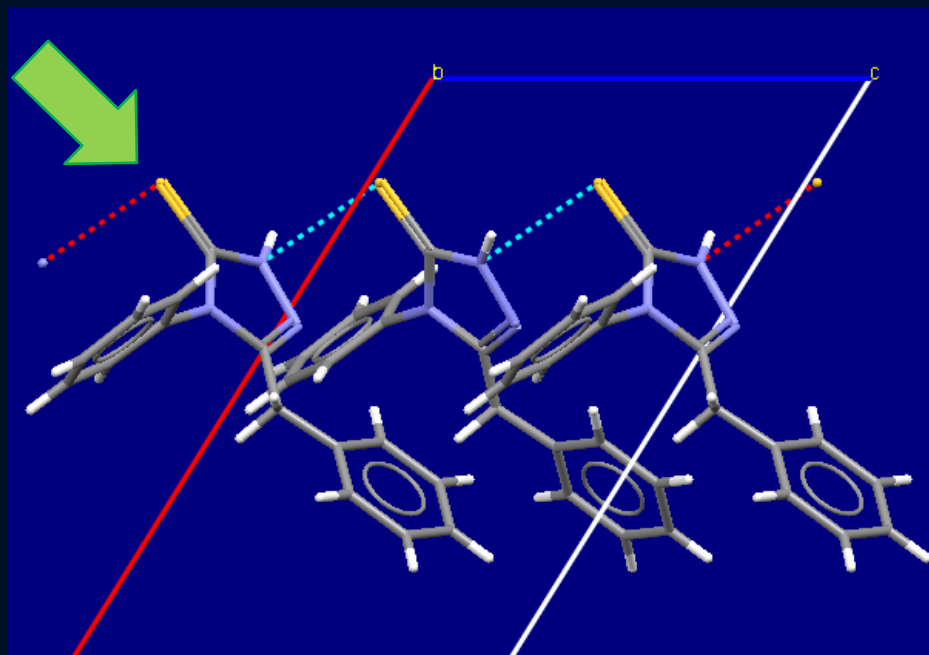
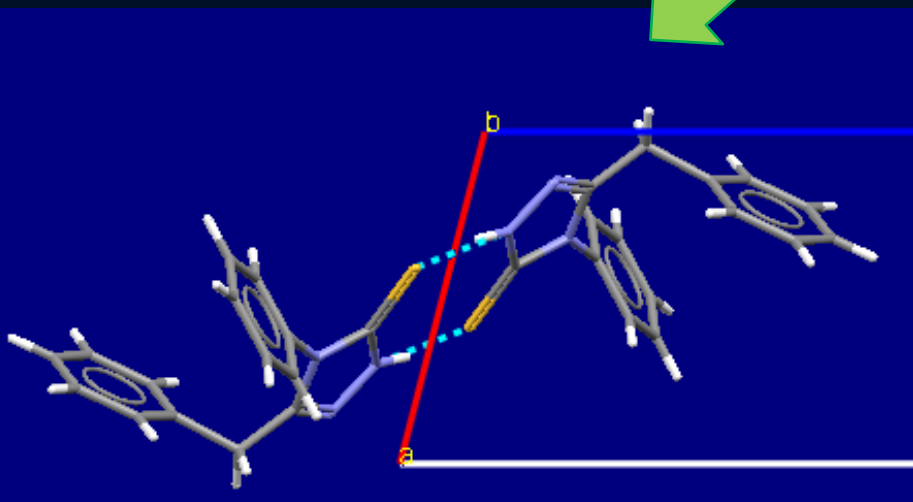
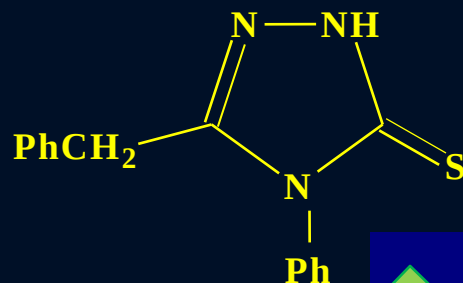
Kąty walencyjne

Kąty torsyjne

Absolutna
konfiguracja



Polimorfizm kryształów molekularnych związków organicznych



grupa przestrzenna:

P21/n

Cc

gęstość [g/cm³]:

1.305

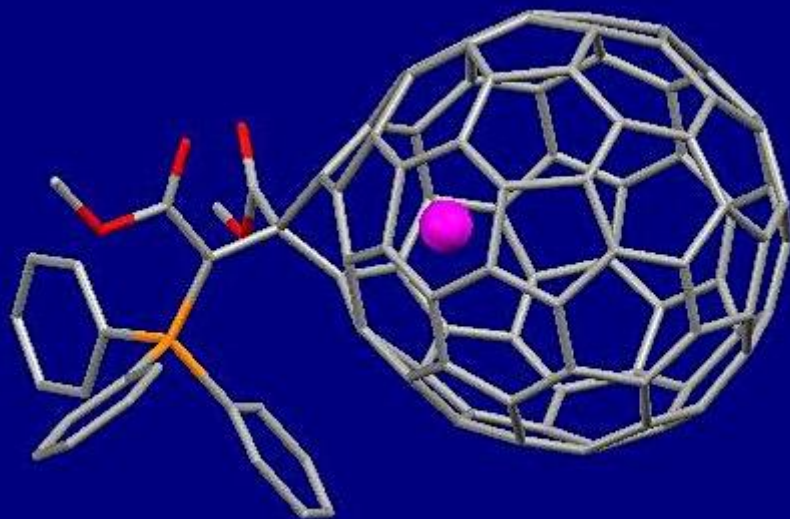
1.341

kolor kryształów:

bezbarwne

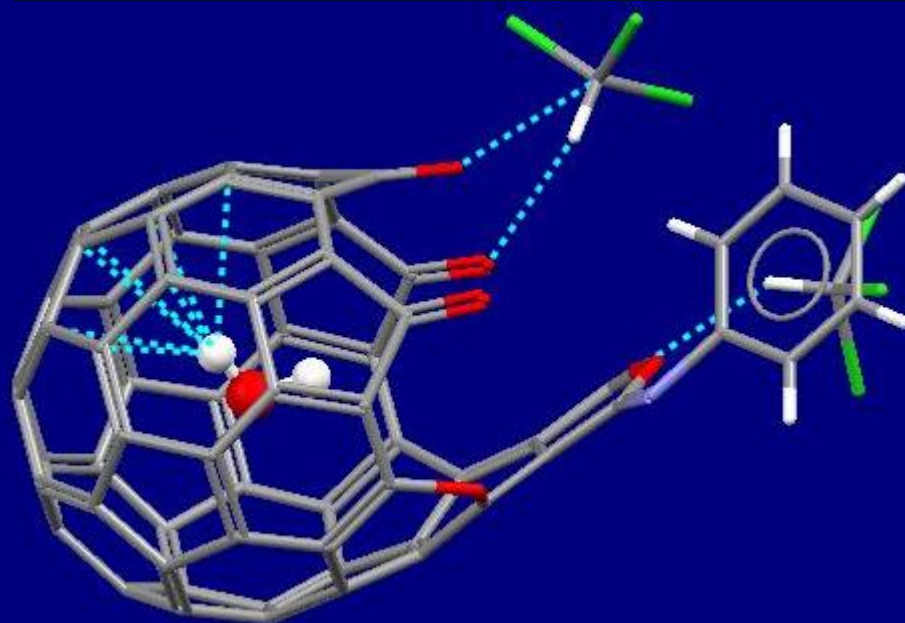
żółte

Elementy chemii supramolekularnej

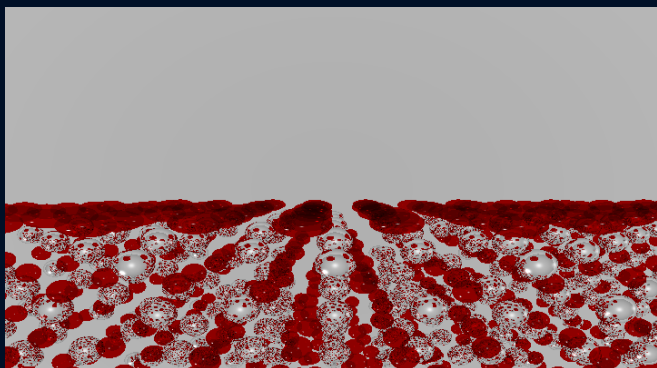


kompleksy typu gość-gospodarz

związki inkluzyjne, solwaty

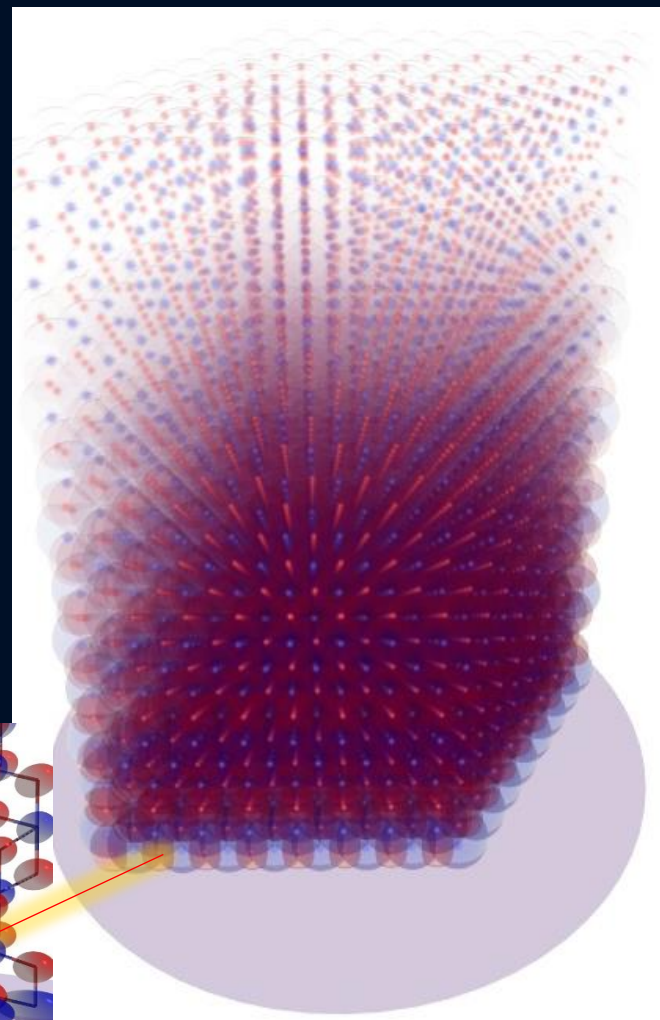
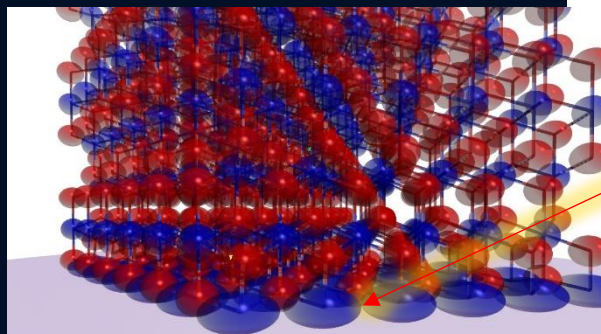


Rentgenowska dyfrakcja powierzchniowa

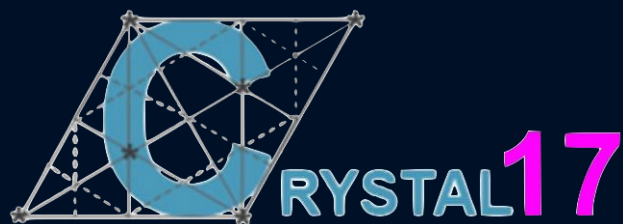


Powierzchnia szafiru $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ (0001).

Cieńka warstwa tlenku bizmutu o strukturze $\alpha\text{-Bi}_2\text{O}_3$ (111) na powierzchni szafiru

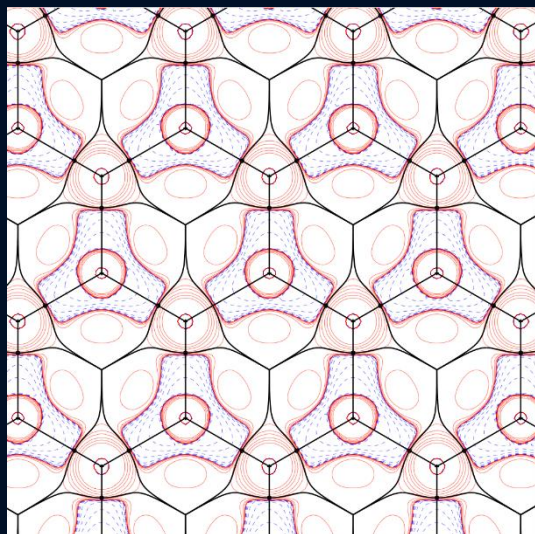


Obliczenia teoretyczne dla układów periodycznych



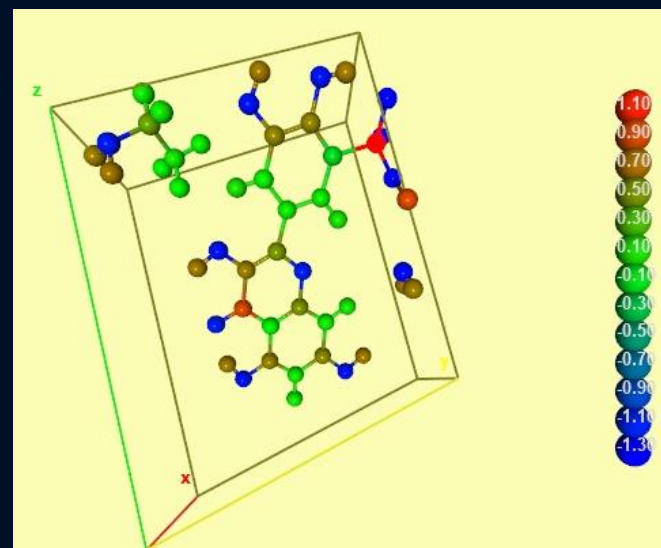
Obliczenia teoretyczne:

- energii kryształów
- topologii wiązań
- rozkładu ładunków nadmiarowych
- właściwości fizycznych
- widm teoretycznych



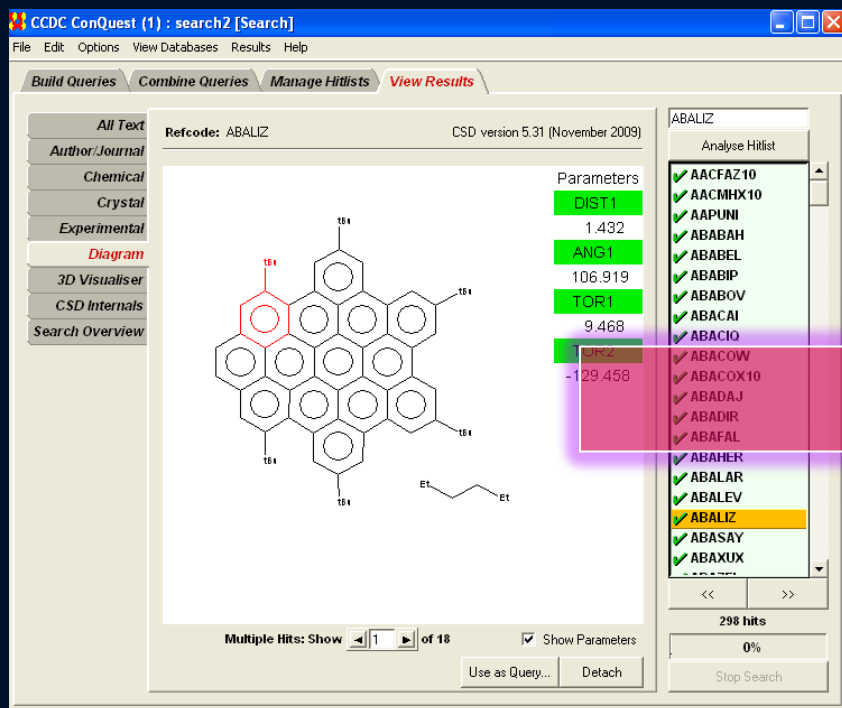
Laplacian punktów krytycznych

Ładunki cząstkowe



Bazy danych strukturalnych

Cambridge Structural Database (CSD)



Geometria cząsteczek

Preferencje asocjacyjne

Analiza polimorfizmu

Analiza izostrukturalności

Bazy danych strukturalnych

Protein Database (PDB)

RCB **PDB**
PROTEIN DATA BANK

MyPDB Login A MEMBER OF THE PDB

An Information Portal to Biological Macromolecular Structures

As of Tuesday Feb 02, 2010 at 4 PM PST there are 63093 Structures | PDB Statistics

WHAT'S NEW | HELP | PRINT

PDB ID or keyword Search Advanced Search

77 Structure Hits 46 Citations 45 Ligand Hits 49 Web Page Hits GO Hits SCOP Hits CATH Hits

Advanced Keyword Query for: 1E1 Query Options:

Display/Download: Generate Reports: Sort by: Results per Page:

Displaying results 1 - 10 of 77 total | Page 1 of 8

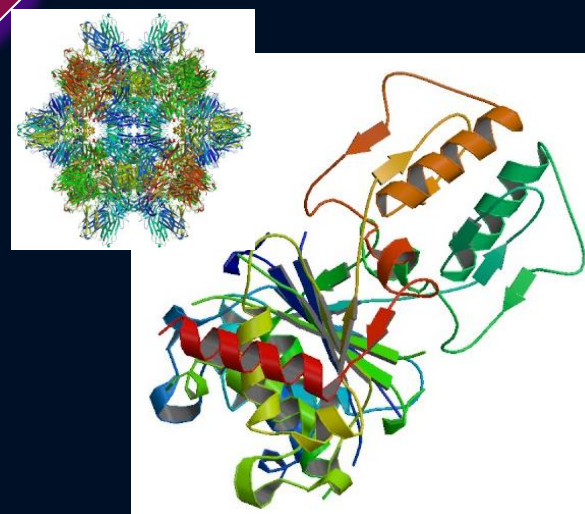
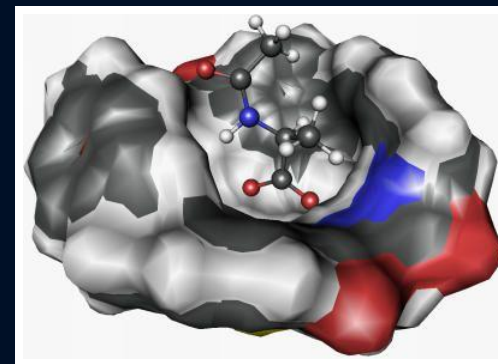
3GRO Human palmitoyl-protein thioesterase 1

Characteristics Release Date: 07-Apr-2009 Exp. Method: X-RAY DIFFRACTION
Resolution: 2.53 Å

Classification **Hydrolase**

Compound Molecule: Palmitoyl-protein thioesterase 1 Length: 298
Polymer: 1 Type: polypeptide(L)
Chains: A, B
EC#: 3.1.2.22

Authors Dobrovetsky, E., Seitova, A., Tong, Y., Tempel, W., Dong, A., Arrowsmith, C.H., Edwards, A.M., Bountra, C., Weigelt, J., Bochkarev, A., Cossar, D., Park, H., Structural Genomics Consortium (SGC)



Zakład Krystalografii

Serdecznie zapraszamy

