

Uniwersytet Śląski - Instytut Chemii –Zakład Krystalografii
Laboratorium z Krystalografii

2 godz.

Najważniejsze zadania i problemy krystalograficzne
– powtórka przed egzaminem

1. Przykładowe zadania z działu „Podstawowe prawa i pojęcia krystalograficzne”

Zadanie 1

W komórce elementarnej kryształu rombowego (tetragonalnego, regularnego):

- wykreśl kierunki: $[110]$, $[111]$, $[101]$, $[\bar{1}01]$, $[11\bar{1}]$, $[121]$
- wyznacz symbole kierunków przeprowadzonych przez punkty A i B o współrzędnych dla węzła A: $\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}$; dla węzła B: 1, 0, $\frac{1}{2}$
- zaznacz ścianę jednostkową
- nakreśl płaszczyzny o symbolach: (210) , (213) , $(2\bar{2}1)$, $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$, (110) , $(\bar{1}\bar{1}0)$

Zadanie 2

Ściana jednostkowa kryształu odcina na osiach krystalograficznych X, Y, Z odcinki równe odpowiednio: $a = 16 \text{ \AA}$ $b = 24 \text{ \AA}$ $c = 16,5 \text{ \AA}$

Oblicz wskaźniki Millera ścian A i B kryształu. Parametry ścian A i B wynoszą:

- A $a = 8 \text{ \AA}$ $b = 18 \text{ \AA}$ $c = 24,75 \text{ \AA}$
- B $a = 6,4 \text{ \AA}$ $b = 16 \text{ \AA}$ $c = 33 \text{ \AA}$

Zadanie 3

Ściany A i B kryształu odcinają na osiach krystalograficznych odcinki a, b, c, wyrażone za pomocą jednostek osiowych a_0 , b_0 i c_0 , które wynoszą odpowiednio:

dla ściany A: $a = 3a_0$ $b = \infty b_0$ $c = 2c_0$

dla ściany B: $a = \frac{3}{4} a_0$, $b = \frac{1}{8} b_0$, $c = \infty c_0$

Oblicz wskaźniki Millera tych ścian, rozwiązanie przedstaw na rysunku.

Zadanie 4

Określ symbol Millera płaszczyzny przechodzącej przez prostą sieciową $[\bar{1}20]$ i prostą sieciową, w której przecinają się płaszczyzny $[(231)/(010)]$. Przeprowadź odpowiednie obliczenia i przedstaw rozwiązanie graficznie.

Zadanie 5

Co to jest rodzina płaszczyzn. Podaj równania kwadratowe dla układu regularnego, tetragonalnego i rombowego. Następnie, wyznacz odległość międzypłaszczyznową d_{hkl} dla rodziny płaszczyzn sieciowych (110) w kryształach chromu krystalizującym w układzie regularnym ($a = 2,885 \text{ \AA}$). Oblicz objętość komórki elementarnej.

Zadanie 6

Krystaliczna komórka elementarna wanadu należy do układu regularnego i jest to komórka typu I. Wiedząc, że parametr sieciowy jest równy $3,0282 \text{ \AA}$ wyznacz:

- bazę komórki elementarnej
- odległość między najbliższymi atomami leżącymi wzdłuż kierunku $[110]$ oraz $[111]$
- promień atomowy wanadu
- odległość międzypłaszczyznową d_{110}
- gęstość kryształu.

Zadanie 7

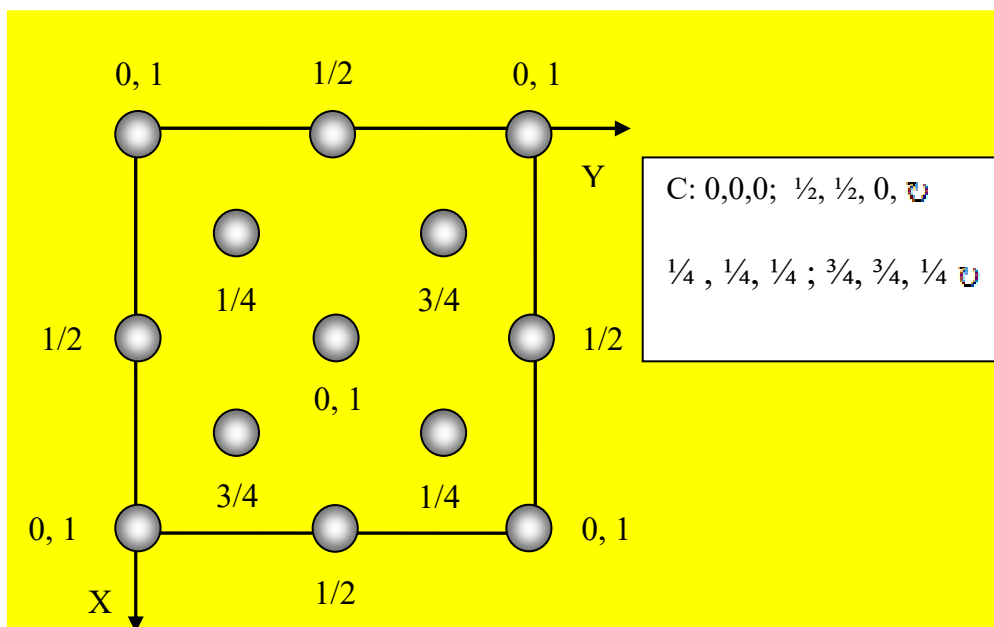
Podaj typy komórek Bravais'go, które mogą występować w poszczególnych układach krystalograficznych oraz określ liczbę węzłów i bazę w tych komórkach. Wykaż na rysunku dlaczego w sieci przestrzennej tetragonalnej nie występują komórki typu F i C, natomiast w układzie regularnym nie może występować komórka typu C.

2. Przykładowe zadania z działu „Klasyfikacja ciał krystalicznych oparta na składzie chemicznym i stosunkach stechiometrycznych”

Zadanie 1

Wykorzystując rzut komórki elementarnej diamentu (struktura A4) na płaszczyznę XY, podaj typ komórki Bravais'go. Wiedząc, że krystalizuje w układzie regularnym i gęstość kryształu wynosi $3,515 \text{ g/cm}^3$, oblicz:

- parametr sieciowy komórki elementarnej
- objętość komórki elementarnej
- odległość między najbliższymi atomami węgla.



Zadanie 2

Molibden wykazuje typ struktury A2 (typu wolframu α). Gęstość metalu wynosi 10222 kg/m^3 a parametr komórki $a_0 = 3.147 \text{ \AA}$. Wyznacz na tej podstawie masę molową Mo.

Zadanie 3

Fluorek metalu MF_2 posiada strukturę typu rutylu (struktura C4) a parametry tetragonalnej komórki elementarnej wynoszą $a = 4,621 \text{ \AA}$ i $c = 3,052 \text{ \AA}$. Gęstość związku jest równa 3148 kg/m^3 . Dokonaj identyfikacji związku.

Zadanie 4

Chlorek cezu krystalizuje w strukturze typu B2 w grupie przestrzennej $P4/m\bar{3}2/m$ (stała sieciowa $a = 4,121 \text{ \AA}$). Sieć krystaliczna chlorku cezu jest to sieć złożona z dwóch sieci jonowych. Jony Cs^+ i Cl^- tworzą sieci regularne typu P przesunięte względem siebie o wektor $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$. Na podstawie przedstawionych danych:

- Narysować rzut komórki elementarnej na płaszczyznę XY i podać współrzędne jonów
- Podać liczby koordynacyjne i wielościany koordynacyjne dla jonów Cs^+ i Cl^-
- Obliczyć gęstość kryształu CsCl i najmniejszą odległość Cs - Cl

Zadanie 5

Chlorek sodu krystalizuje w strukturze typu B1 w grupie przestrzennej $F4/m\bar{3}2/m$. Sieć krystaliczna NaCl jest to sieć złożona z dwóch sieci jonowych. Jony Na^+ tworzą sieć regularną typu F i w tę sieć wbudowana jest sieć regularna typu F jonów Cl^- . Obie sieci są przesunięte względem siebie o wektor $(0, 0, \frac{1}{2})$. Gęstość kryształu $d = 2,16 \text{ g/cm}^3$. Na podstawie przedstawionych danych:

- Narysować rzut komórki elementarnej na płaszczyznę XY i podać współrzędne jonów
- Podać liczby koordynacyjne i wielościany koordynacyjne dla jonów Na^+ i Cl^-
- Obliczyć stałą sieci i najmniejszą odległość Na - Cl
- Opisać znaczenie symbolu grupy przestrzennej

3. Przykładowe zadania z działu „Symetria w morfologii kryształów. Grupy punktowe”

Zadanie 1

W kryształach występuje oś trójrotna inwersyjna. Czy może tam być:

- płaszczyzna symetrii prostopadła do tej osi?
- środek symetrii?

Odpowiedź uzasadnij.

Zadanie 2

Wymienić oraz omówić znaczenie poszczególnych pozycji, wraz z określeniem ilości i położenia poszczególnych elementów symetrii holoedrycznych grup punktowych układu rombowego, heksagonalnego i regularnego. Narysować projekcje tych grup punktowych (za wyjątkiem układu regularnego) wraz z punktami symetrycznie równoważnymi.

Zadanie 3

Jakie grupy punktowe powstają w wyniku:

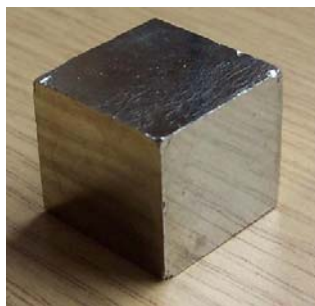
- kombinacji osi właściwych i środka symetrii dla układu tetragonalnego i trygonalnego
 - kombinacji osi właściwych i osi inwersyjnych dla układu rombowego i heksagonalnego
- Narysuj projekcje tych grup oraz zaznacz punkty symetrycznie równoważne.

Zadanie 4

Określ kierunki symetrycznie równoważne z kierunkiem $[uvw]$ w klasach $2/m$, 222 i $\bar{4}$.

Zadanie 5

Proszę opisać symetrię kryształu pirytu (rysunek poniżej) i podać odpowiadający mu symbol grupy punktowej.



4. Przykładowe zadania z działu „Symetria w budowie wewnętrznej ciał krystalicznych. Grupy przestrzenne”.

Zadanie 1

Co rozumie się pod pojęciem prostych grup przestrzennych. Wymień proste grupy przestrzenne układu regularnego, rombowego i jednoskośnego.

Zadanie 2

Wymień rodzaje płaszczyzn ślizgowych i omów ich działanie w rzucie ortogonalnym na płaszczyznę rysunku. Przedstaw symbole graficzne płaszczyzn ślizgowych.

Zadanie 3

Podaj:

- co oznaczają poszczególne pozycje w poniższych symbolach grup przestrzennych, (z uwzględnieniem liczby i rozmieszczenia w przestrzeni poszczególnych elementów symetrii)
- grupę punktową (określ liczbę i orientację tych elementów w grupie punktowej oraz układ krystalograficzny).

Cc ; $P2_12_12_1$; $I4_1/a$; $P6_3/mcm$; $R3c$; $Ia\bar{3}$; $Fd\bar{3}c$

Zadanie 4

Dla poniższych grup przestrzennych wykonaj rysunek rozmieszczenia elementów symetrii oraz przedstaw zespół ogólnych pozycji równoważnych. Podaj współrzędne pozycji symetrycznie równoważnych dla ogólnej pozycji punktu wyjściowego x,y,z .

$P\bar{4}$; $P\bar{6}$; $P12_11$, $P1c1$

Zadanie 5

Dla grupy przestrzennej $Pmc2_1$ wykreśl rysunek rozmieszczenia elementów symetrii oraz przedstaw zespół ogólnych pozycji równoważnych, a następnie uzupełnij poniższą tabelę.

Liczebność punktów	Oznaczenie Wyckoffa	Symetria własna punktu	Współrzędne punktów równoważnych
			x,y,z ;
			$\frac{1}{2},y,z$;
			$0,y,z$;