

Laboratorium z Krystalografii

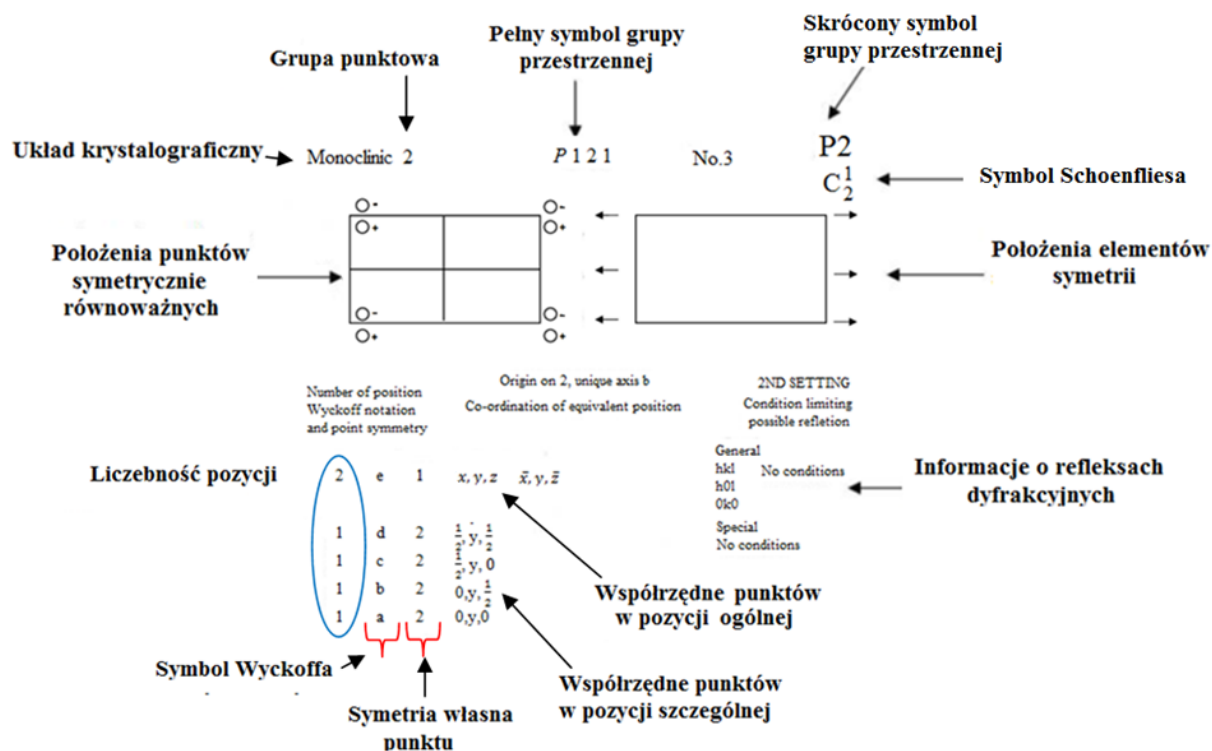
2 godz.

MIĘDZYNARODOWE TABLICE KRYSTALOGRAFICZNE

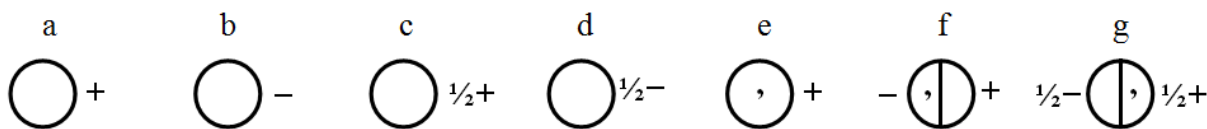
Cel ćwiczenia: Analiza informacji zawartych w Międzynarodowych Tablicach Krystalograficznych, rozwiązywanie problemów krystalograficznych w oparciu o dane zawarte w Międzynarodowych Tablicach Krystalograficznych

Wstęp teoretyczny

Opis 230 grup przestrzennych wraz z ich symbolami międzynarodowymi, numerami porządkowymi i odpowiadającymi im symbolami Schoenfliesa, rzutami określającymi położenie elementów symetrii i ich rodzaj oraz współrzędnymi punktów równoważnych są zawarte w „Międzynarodowych Tablicach Krystalograficznych” (*International Tables for Crystallography*).



Rozmieszczenie elementów symetrii i położenia punktów symetrycznie równoważnych przedstawia się na rzutach komórki elementarnej na płaszczyzny (100), (010) oraz (001). Elementy symetrii na rzutach oznacza się międzynarodowymi symbolami graficznymi, natomiast położenia punktów symetrycznie równoważnych – za pomocą kółek. (Rys.1)



- a) pkt. nad płaszczyzną rzutu, dla którego $z \neq 0$
 b) pkt. pod płaszczyzną rzutu, dla którego $z \neq 0$
 c) pkt. nad płaszczyzną rzutu, dla którego $z = 1/2 + z$
 d) pkt. pod płaszczyzną rzutu, dla którego $z = 1/2 - z$
 e) pkt., który powstał w wyniku odbicia w płaszczyźnie lub środku symetrii
 f i g) dwa punkty znajdujące się jeden nad drugim, z których jeden powstał w wyniku odbicia w płaszczyźnie lub środku symetrii (znaczenia + i – oraz $1/2+$ i $1/2-$ jak wyżej)

W Tablicach Krystalograficznych dla każdej grupy przestrzennej podaje się także współrzędne pozycji ogólnych i szczególnych, liczebność pozycji, oznaczenie literowe Wyckoffa oraz informacje o refleksach dyfrakcyjnych.

Wykonanie ćwiczenia:

1. Siarczek palladu (PdS), należący do układu tetragonalnego, ma grupę przestrzenną $P4_2/m$. Komórka elementarna o wymiarach $a_0 = 6.429 \text{ \AA}$ i $c_0 = 6.608 \text{ \AA}$ zawiera osiem atomów palladu i osiem atomów siarki. Atomy siarki zajmują ogólną pozycję równoważną $8k$ o parametrach $x = 0.19$, $y = 0.32$, $z = 0.23$. Atomy palladu zajmują trzy krystalograficzne różne pozycje palladu:

2 Pd w pozycji $2e$

2 Pd w pozycji $2c$

4 Pd w pozycji $4j$ przy czym $x = 0.48$ i $y = 0.25$.

Korzystając z „Międzynarodowych Tablic Krystalograficznych” oraz powyższych danych:

- wyznacz wartości współrzędnych dla atomów siarki i palladu;
- znając położenia atomów w komórce wykreśl jej rzut na płaszczyznę (001);
- oblicz odległości od atomu siarki do każdego z czterech sąsiednich atomów palladu.

Do sprawdzenia poprawności wykonania zadania wykorzystaj program *Mercury 3.1* i postępuj zgodnie z instrukcją:

- otwórz plik o nazwie PdS.cif
- wybierz odpowiedni kształtu atomów otwierając *Display/Styles/Ball and Stick*, a następnie *Display/Styles/Ball and Stick Settings* i w otwartym okienku (*Ball and Stick Display Options*) ustawiając *Bond Radius* na 0.
- wygeneruj komórkę elementarną otwierając *Calculate/Packing and Slicing* i zaznaczając *Show cell axes*, *Packing* oraz *Include atoms that Fit*.
- ustaw komórkę elementarną zgodnie z osią krystalograficzną Z .
- uzyskany obraz zapisz i dołącz do sprawozdania
- określ odległości pomiędzy atomami Pd i S w komórce elementarnej stosując komendę *Measure Distance*

2. Stały chlor w temperaturze -160°C ma strukturę należącą do grupy przestrzennej $Bmab$. Komórka elementarna o wymiarach: $a_0 = 6.24 \text{ \AA}$, $b_0 = 8.26 \text{ \AA}$, $c_0 = 4.48 \text{ \AA}$ zawiera osiem atomów w pozycji szczególnej $8f$, przy czym $y = 0.100$ i $z = 0.370$.

Korzystając z „Międzynarodowych Tablic Krystalograficznych” oraz powyższych informacji:

- wyznacz wartości współrzędnych dla atomów chloru;
- znając położenia atomów w komórce wykreśl jej rzut na płaszczyznę (100);

- znajdź atomy tworzące cząsteczkę Cl_2 i oblicz długość wiązania w cząsteczce;
- oblicz odległości między atomami chloru w sąsiednich cząsteczkach.

Do sprawdzenia poprawności wykonania zadania wykorzystaj program *Mercury 3.1* i otwórz plik o nazwie *chlor.cif*:

- zgodnie z instrukcją podaną w ćwiczeniu 1 wybierz odpowiedni kształt atomów i wygeneruj komórkę elementarną.
- ustaw komórkę elementarną zgodnie z osią krystalograficzną Z .
- znajdź obliczoną długość wiązania w cząsteczce Cl_2 i zaznacz za rysunku za pomocą komendy *Picking Mode/Measure Distance*
- uzyskany obraz zapisz i dołącz do sprawozdania.

3. Fluorek cyny(IV) SnF_4 , krystalizuje w grupie przestrzennej $I4/mmm$. Komórka elementarna ma wymiary $a_0 = 4.04$, $c_0 = 7.93\text{\AA}$. Atomy zajmują następujące pozycje krystalograficzne:

Sn w pozycji $2a$

F' w pozycji $4c$

F'' w pozycji $4e$ przy czym $z = 0.237$

Korzystając z „Międzynarodowych Tablic Krystalograficznych” oraz powyższych informacji:

- wyznacz wartości współrzędnych dla atomów cyny i fluoru
- znając położenia atomów w komórce wykreśl strukturę SnF_4
- określ grupę punktową dla pozycji szczególnych
- oblicz długość wiązania Sn–F i opisz sferę koordynacji wokół atomu centralnego.

Do sprawdzenia poprawności wykonania zadania wykorzystaj program *Mercury 3.1* i otwórz plik o nazwie *SnF.cif*:

- zgodnie z instrukcją zawartą w ćwiczeniu 1 wybierz odpowiedni kształt atomów i wygeneruj komórkę elementarną.
- ustaw komórkę elementarną, tak aby przedstawić strukturę SnF_4
- znajdź obliczone długości wiązań Sn–F i zaznacz je na rysunku stosując komendy *Picking Mode/Measure Distance*
- uzyskany obraz zapisz i dołącz do sprawozdania

4. HgBr_2 krystalizuje w grupie przestrzennej $\text{Cmc}2_1$. Wymiary komórki elementarnej wynoszą $a_0 = 4.624\text{\AA}$, $b_0 = 6.798\text{\AA}$, $c_0 = 12.445\text{\AA}$ i zawiera 4 atomy rtęci w pozycji $(4a)$ przy czym $y = 0.334$, $z = 0.000$ i 8 atomów bromu zajmujących następujące pozycje: Br(1) $4a$ przy czym $y = 0.056$, $z = 0.132$ oraz Br(2) $4a$ przy czym $y = 0.389$, $z = 0.368$.

Korzystając z „Międzynarodowych Tablic Krystalograficznych” oraz powyższych danych:

- wyznacz wartości współrzędnych dla atomów rtęci i bromu;
- znając położenia atomów w komórce wykreśl jej rzut na płaszczyznę (100) ;
- oblicz odległości od atomu rtęci do każdego z sąsiednich atomów bromu.

Do sprawdzenia poprawności wykonania zadania wykorzystaj program *Mercury 3.1* i otwórz plik o nazwie *HgBr.cif*:

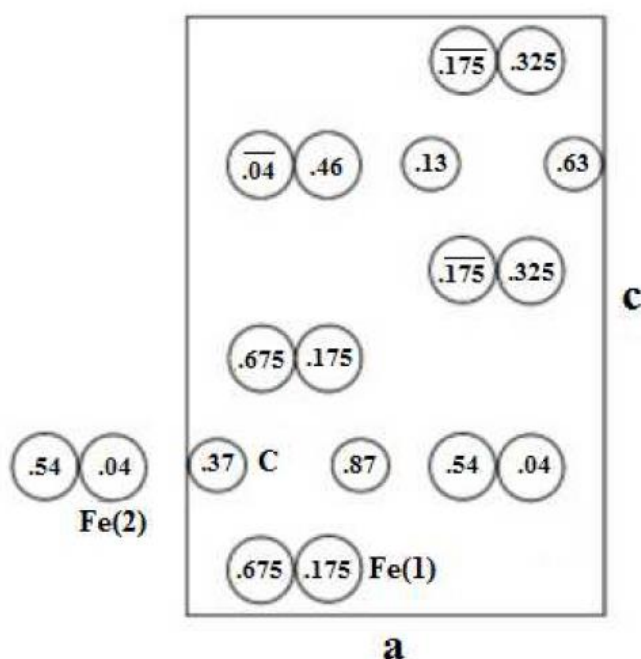
- zgodnie z instrukcją zawartą w ćwiczeniu 1 wybierz odpowiedni kształt atomów i wygeneruj komórkę elementarną.
- ustaw komórkę elementarną zgodnie z osią krystalograficzną X .
- znajdź obliczone długości wiązań Hg–Br(1) oraz Hg–Br(2) i zaznacz na rysunku stosując komendy *Picking Mode/Measure Distance*.
- uzyskany obraz zapisz i dołącz do sprawozdania.

5. Węglík żelaza (cementyt) jest ważnym składnikiem stali i krystalizuje w układzie rombowym z $a_0 = 4.524$, $b_0 = 5.089$, $c_0 = 6.740 \text{ \AA}$.

Korzystając z danych znajdujących się poniżej:

- określ stechiometrię cementytu
- korzystając z tabeli i rzutu komórki elementarnej na płaszczyznę ac , oblicz wszystkie krystalograficznie różne długości wiązań Fe–C

	x	y	z
C	0.07	0.37	0.25
Fe(1)	0.333	0.175	0.065
Fe(2)	-0,167	0.04	0.25



Rzut komórki elementarnej cementytu na płaszczyznę ac

Do rozwiązania zadania wykorzystaj program *Mercury 3.1*:

- otwórz plik o nazwie *FeC.cif*
- zgodnie z instrukcją podaną w ćwiczeniu 1 wygeneruj komórkę elementarną cementytu i ustaw zgodnie z osią krystalograficzną Y .
- uzyskany obraz zapisz i dołącz do sprawozdania.
- przy użyciu komendy *Display/Symmetry Elements* przedstaw wizualizację elementów symetrii i zapisz:
 - ✓ obraz 1 zawierający płaszczyznę symetrii
 - ✓ obraz 2 zawierający osie śrubowe i środki symetrii
- następnie na podstawie otrzymanych obrazów oraz rzutu komórki elementarnej podanego w zadaniu wykonaj rysunek rozmieszczenia elementów symetrii i określ grupę przestrzenną.
- podaj współrzędne pozycji symetrycznie równoważnych dla ogólnej pozycji punktu wyjściowego x, y, z .