|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Laboratorium z krystalografii | | Ćwiczenie nr: |
| Kierunek: | Grupa: | Data: |
| Nazwisko i imię: | | Ocena: |
| Temat ćwiczenia: | |  |

SPRAWOZDANIE NR 1

**Ćwiczenie 1**

*Siarczek palladu(II)*

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| Wartości współrzędnych dla atomów siarki i palladu | |  |  |  |  | | --- | --- | --- | --- | | Pierwiastek | Współrzędne | | | | x | y | z | | Pallad |  |  |  | |  |  |  | |  |  |  | |  |  |  | |  |  |  | |  |  |  | |  |  |  | |  |  |  | | Siarka |  |  |  | |  |  |  | |  |  |  | |  |  |  | |  |  |  | |  |  |  | |  |  |  | |  |  |  | |
| Rzut komórki elementarnej na płaszczyznę (100), wykonany przy zastosowaniu programu Mercury 3.1 |  |
| Odległości atomu siarki do czterech sąsiednich atomów palladu  (pełne obliczenia dołączyć na osobnej kartce) |  |
| Na papierze milimetrowym wykonać rzut komórki elementarnej siarczku palladu(II) na płaszczyznę (001) i dołączyć do sprawozdania | |

\* program ***Mercury 3.1*** jest dostępny bezpłatnie na stronie internetowej <http://www.ccdc.cam.ac.uk/solutions/csd-system/components/mercury/>

**Ćwiczenie 2**

*Chlor*

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| Wartości współrzędnych dla atomów chloru | |  |  |  |  | | --- | --- | --- | --- | | Pierwiastek | Współrzędne | | | | x | y | z | | Chlor |  |  |  | |  |  |  | |  |  |  | |  |  |  | |  |  |  | |  |  |  | |  |  |  | |  |  |  | |
| Rzut na płaszczyznę (001) wykonany przy zastosowaniu programu Mercury 3.1 |  |
| Długość wiązania w cząsteczce Cl2 |  |
| Odległości między atomami chloru w sąsiednich cząsteczkach  (pełne obliczenia dołączyć na osobnej kartce) |  |
| Na papierze milimetrowym wykonać rzut komórki elementarnej chloru na płaszczyznę (100) i dołączyć do sprawozdania | |

**Ćwiczenie 3**

*Fluorek cyny(IV)*

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| Wartości współrzędnych dla atomów cyny i fluoru | |  |  |  |  | | --- | --- | --- | --- | | Pierwiastek | Współrzędne | | | | x | y | z | | Cyna |  |  |  | |  |  |  | | Fluor |  |  |  | |  |  |  | |  |  |  | |  |  |  | |  |  |  | |  |  |  | |  |  |  | |  |  |  | |
| Perspektywiczny rysunek komórki elementarnej SnF4 wraz z zaznaczonym wielościanem koordynacyjnym dla atomu cyny (Mercury 3.1) |  |
| Symetria własna punktów o współrzędnych | |  |  | | --- | --- | | **Współrzędne punktu** | **Symetria własna punktu** | | 0,0,0 |  | | 0, ½, 0 |  | | ½,½, z |  | | 0, ½, ½ |  | | ½,½,½ |  | |
| Długości wiązań Sn‒F |  |

**Ćwiczenie 4**

*Bromek rtęci(II)*

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| Wartości współrzędnych dla atomów rtęci i bromu | |  |  |  |  | | --- | --- | --- | --- | | Pierwiastki | Współrzędne | | | | x | y | z | | Rtęć |  |  |  | |  |  |  | |  |  |  | |  |  |  | |  |  |  | |  |  |  | |  |  |  | |  |  |  | | Brom |  |  |  | |  |  |  | |  |  |  | |  |  |  | |  |  |  | |  |  |  | |  |  |  | |  |  |  | |
| Perspektywiczny rysunek komórki elementarnej HgBr2, wykonany przy zastosowaniu programu Mercury 3.1 |  |
| Odległości atomu rtęci do sąsiednich atomów bromu  (pełne obliczenia dołączyć na osobnej kartce) |  |
| Na papierze milimetrowym wykonać rzut komórki elementarnej bromku rtęci(II) na płaszczyznę (100) i dołączyć do sprawozdania | |

**Ćwiczenie 5**

*Cementyt*

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| |  |  |  | | --- | --- | --- | |  | **Fe** | **C** | | Liczba atomów pierwiastków |  |  | | Sumaryczny wzór |  | | | |
| Perspektywiczny rysunek komórki elementarnej cementytu |  |
| Rzut komórki elementarnej cementytu na płaszczyznę (010) |  |
| Perspektywiczny rysunek komórki elementarnej cementytu wraz elementami symetrii |  |
| Symbol grupy przestrzennej określny na podstawie rysunku komórki elementarnej cementytu z elementami symetrii |  |
| Współrzędne pozycji symetrycznie równoważnych dla ogólnej pozycji punktu wyjściowego x,y,z |  |
| Długości wiązań Fe‒C  (obliczenia dołączyć na osobnej kartce) |  |