

	Vizualizace krystalových struktur	
	Technická univerzita v Liberci	
	Fakulta mechatroniky, informatiky a mezioborových studií	
	Anorganická chemie	
	Vypracoval: Pavel Šimon	Studijní obor: Nanomateriály Ročník: 1.

Informace k práci:

Úkol:

Naším úkolem bylo sehnat si CIF soubor obsahující strukturu dané látky a otevřít ho pomocí vhodného vizualizačního programu. Následně jsme měli pomocí tohoto programu o struktuře zjistit zadané informace (vzdálenosti, úhly, koordinační čísla)

Použité programy:

- **Matlab** - využit pro vizualizaci struktur, měření vzdáleností a úhlů, a exportování do formy obrázku (dále také zakreslení roviny symetrie)
- **Náhled**- úpravy obrázků struktur

Jednotky:

- Vzdálenost je měřena v **Å** (Ångström) - jednotka vzdálenosti odpovídající 0,1 nm (10^{-10} m)
- Úhly jsou uváděny ve **stupních**
- Objem je uveden v **Å³**

Picromerite

$K_2Mg(SO_4)_2 \cdot 6H_2O$

Základní vlastnosti

Typ soustavy: jednoklonná monoklinická (90°, 90°, 104.9°)

Objem elementární buňky: 9.095 X 12.248 X 6.134 Å³=683.3 Å³

Koordinační čísla:

Mg^{II} 6

K^I 8

S^{VI} 4

Barvy odpovídají prvkům tímto způsobem:

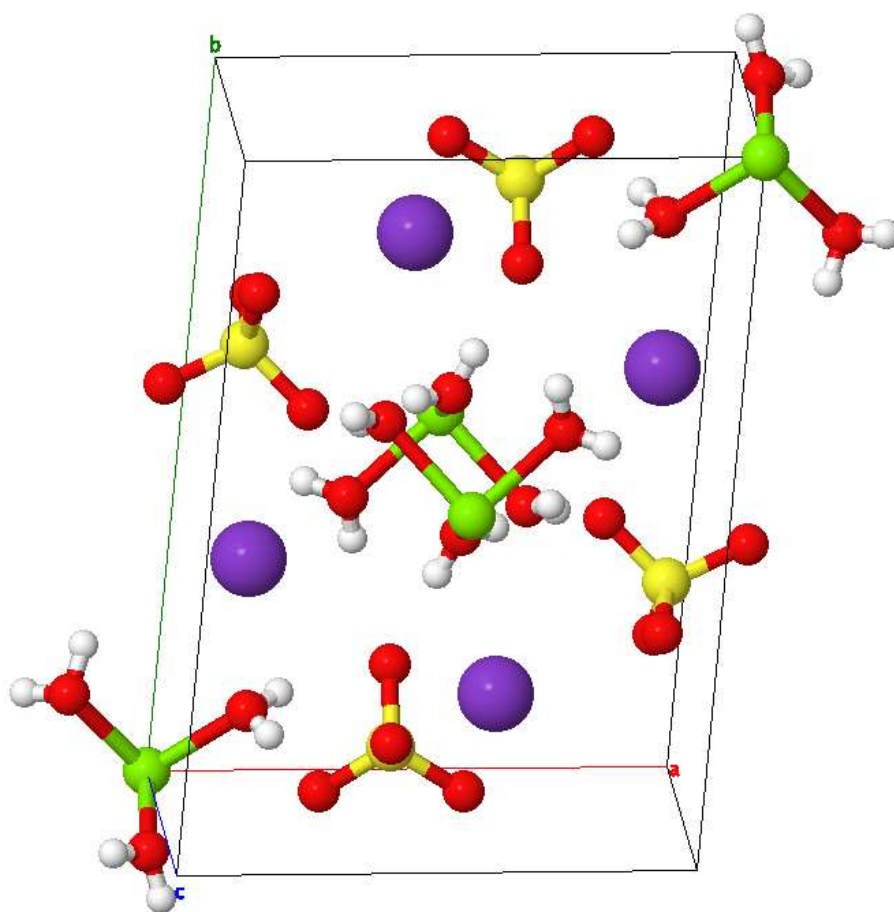
vodík - bílá

kyslík - červená

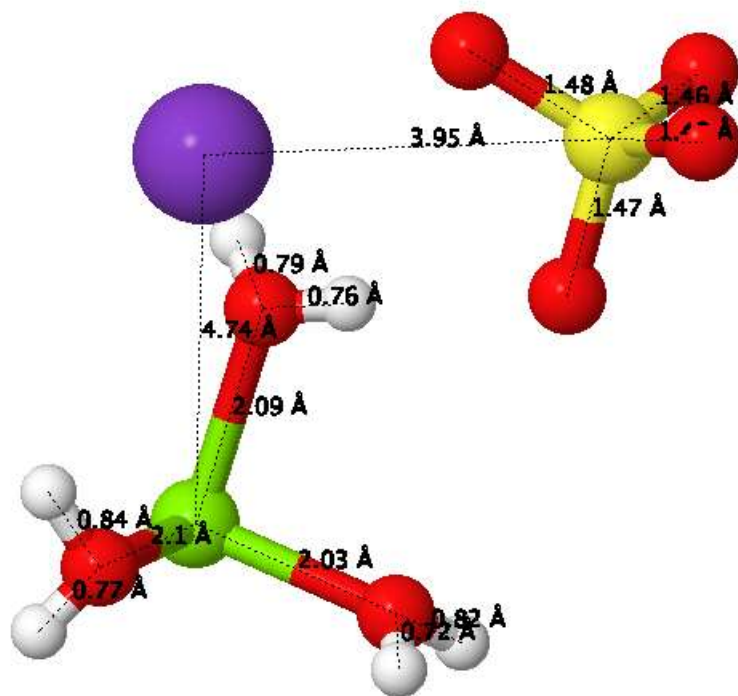
draslík - fialová

hořčík – zelená

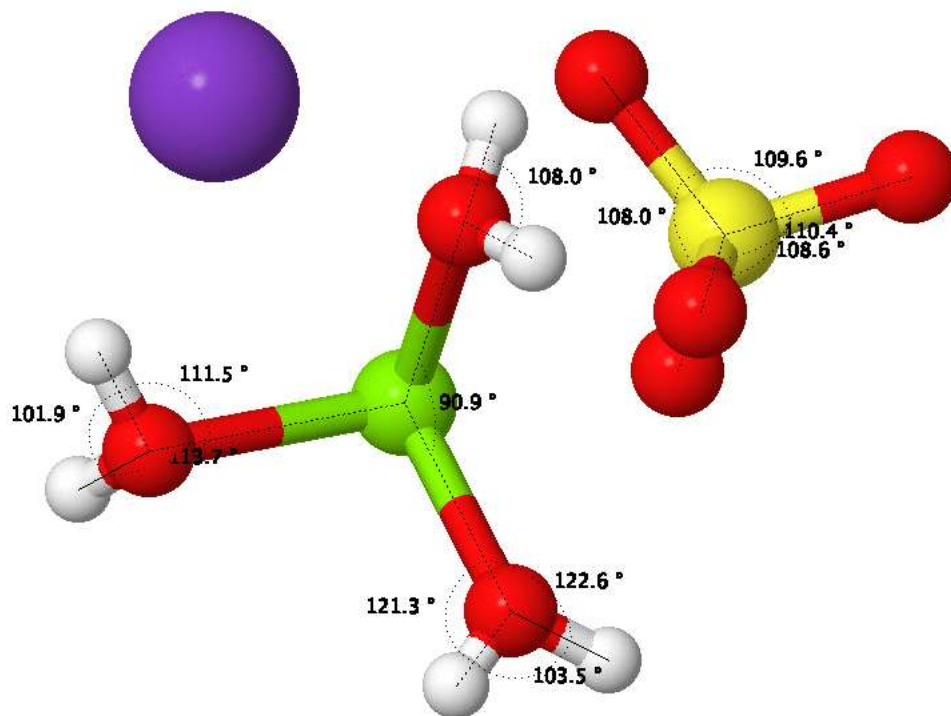
síra – žlutá



Vzdálenosti mezi atomy

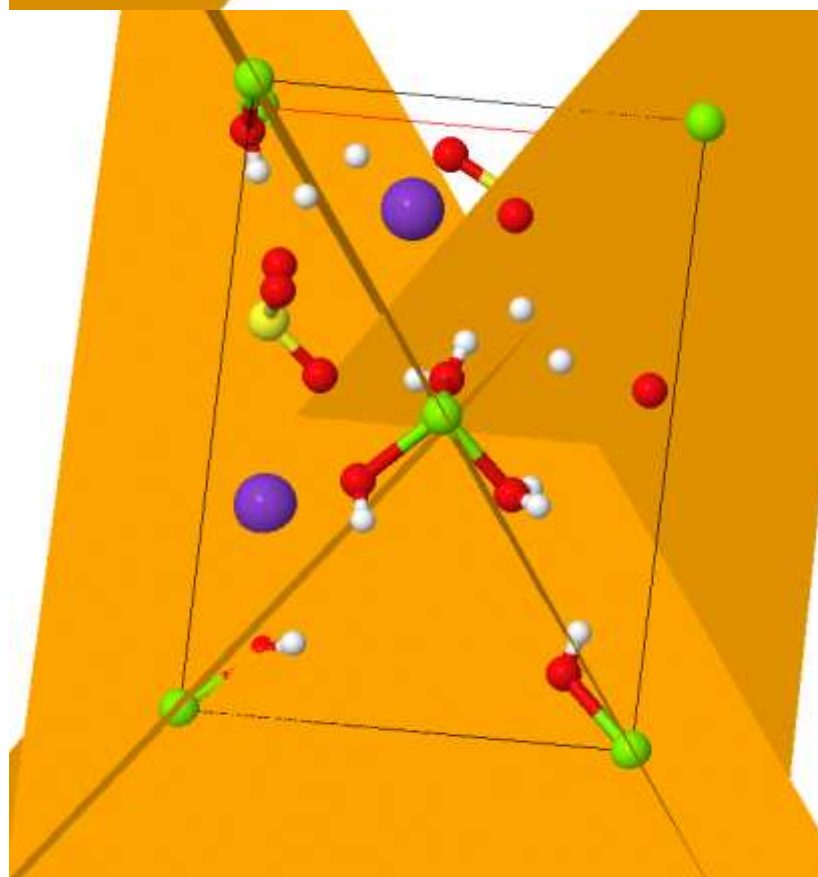
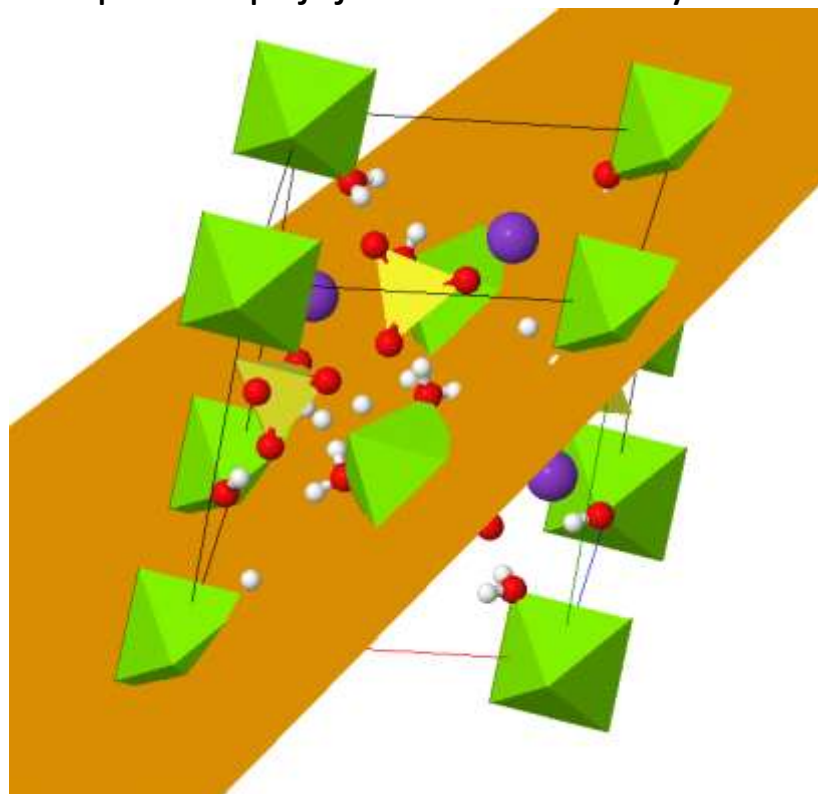


Úhly mezi atomy

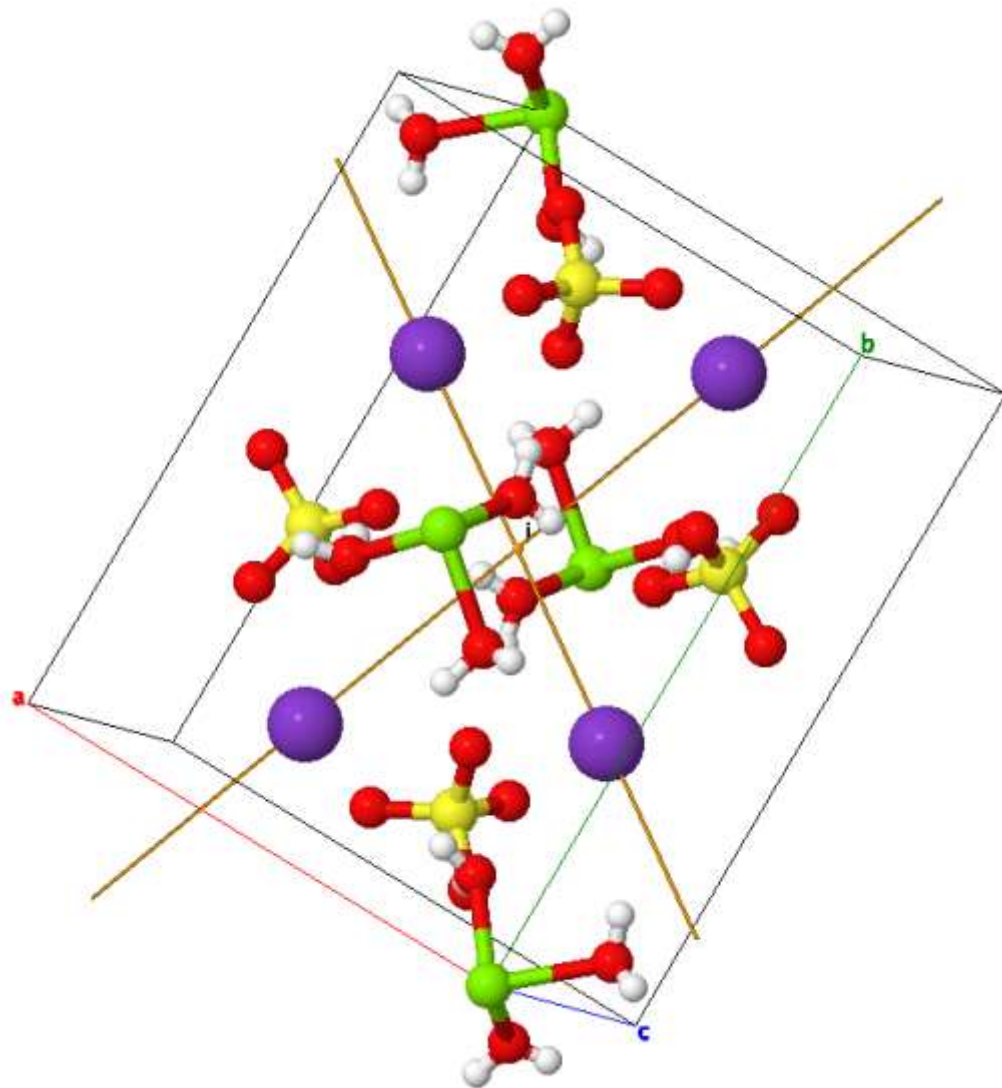


Prvky symetrie:

Rovina procházející úhlopříčně elementární buňkou, vždy úhlopříčně spojuje dvě rovnoběžky



Střed symetrie v průsečíku přímek



Nikl (Ni)

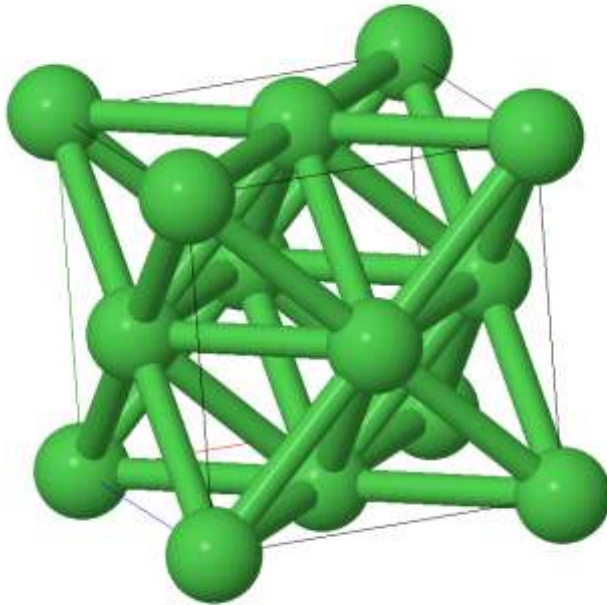
Základní vlastnosti

Typ soustavy: krychlová

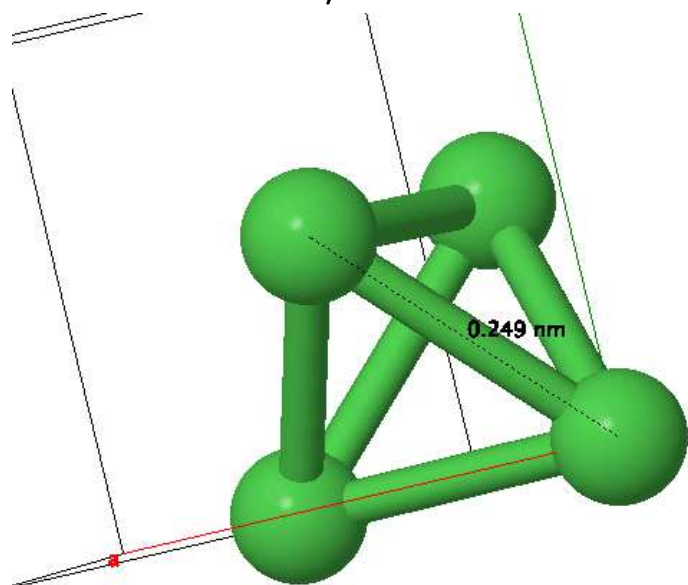
Objem elementární buňky: $3.524^3 \text{ \AA}^3 = 47.76 \text{ \AA}^3$

Koordináční čísla:

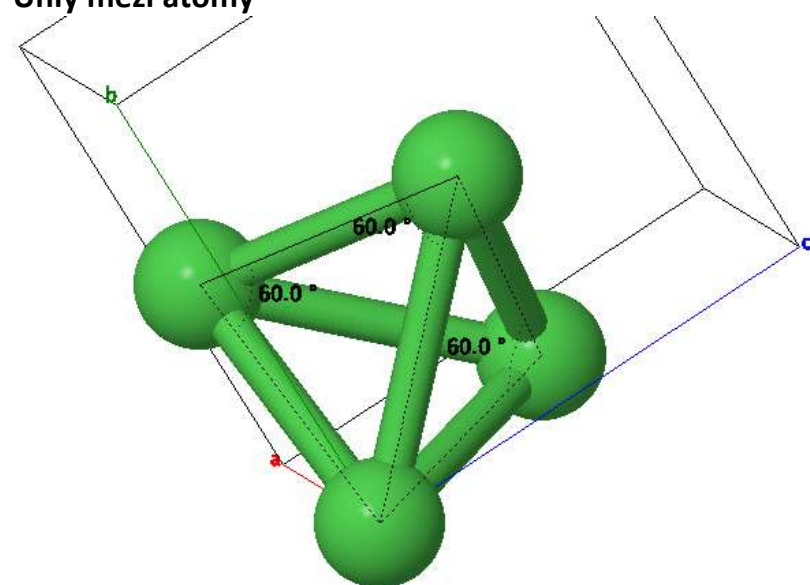
Ni 8



Vzdálenosti mezi atomy



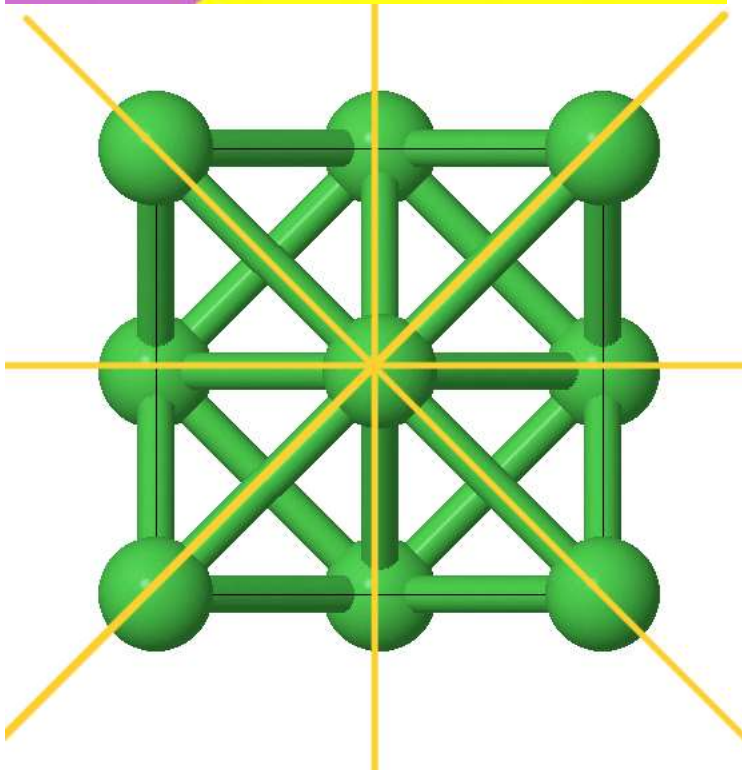
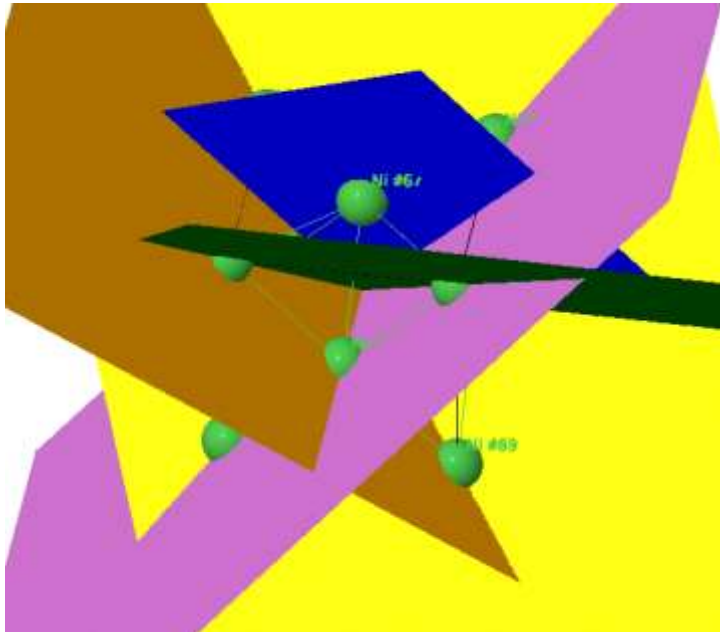
Úhly mezi atomy



Prvky symetrie:

1) Roviny

Roviny procházejí vždy středem pod úhly (45,90,135)

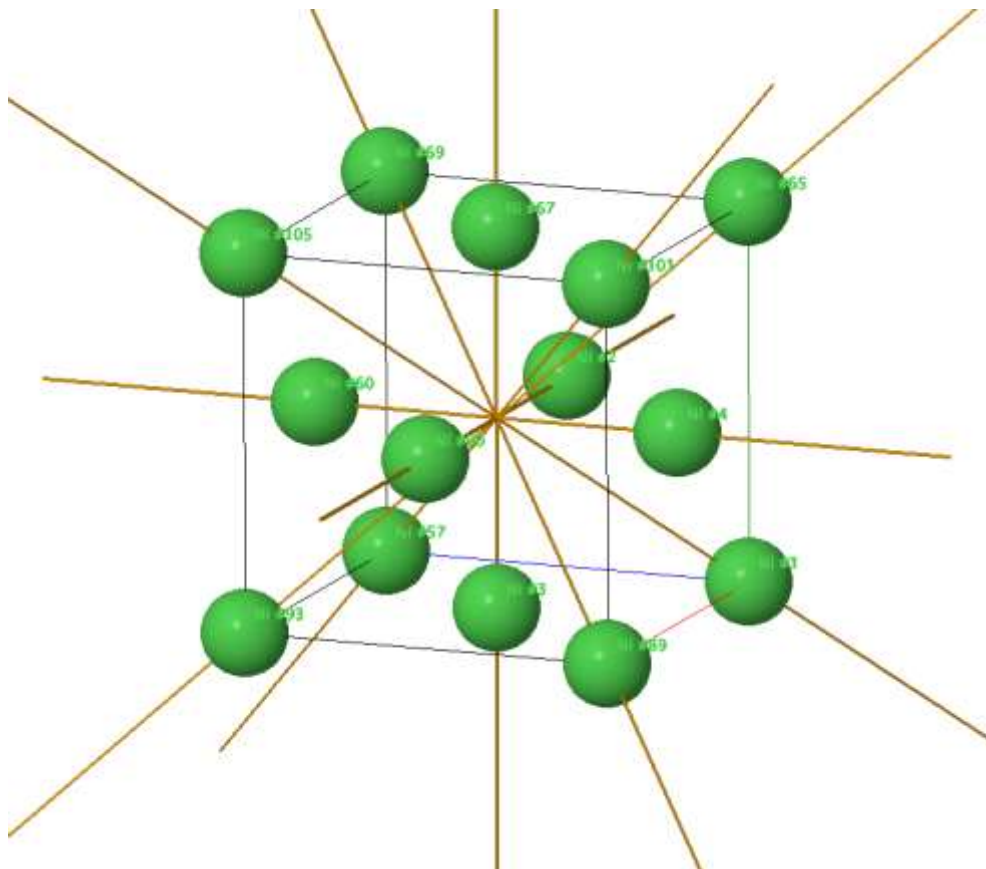


pohled zepředu = pohled shora = pohled ze strany

2) Osy

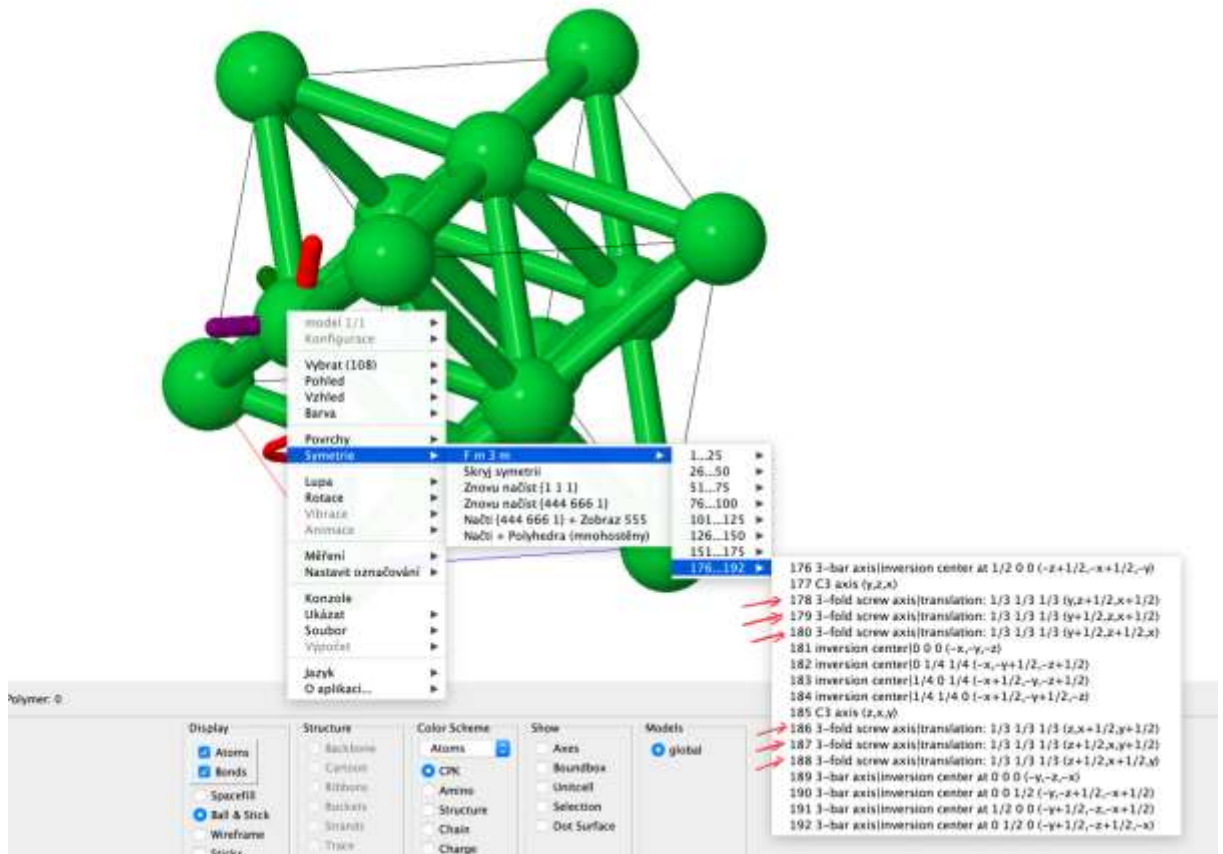
3 čtyřčlené (4-fold) (67,3);(60,4);(90,2)

4 trojčlené (3-fold) procházejí úhlopříčkami čísla spojnic atomů: (65,93);(69,89);(1,105);(57,65)



3) Střed symetrie

Střed symetrie leží na průsečíku os symetrie (viz obrázek nad)



Trojčtých os matlab nabízí více než 4, většinou jsou posunuté i mimo elementární buňku nejspíše vzhledem k opakování struktury. 4 trojčlenné osy, které jsem považoval za elementární, procházejí úhlopříčkami elementární buňky a jsou vyznačeny na obrázku o stránku výše.