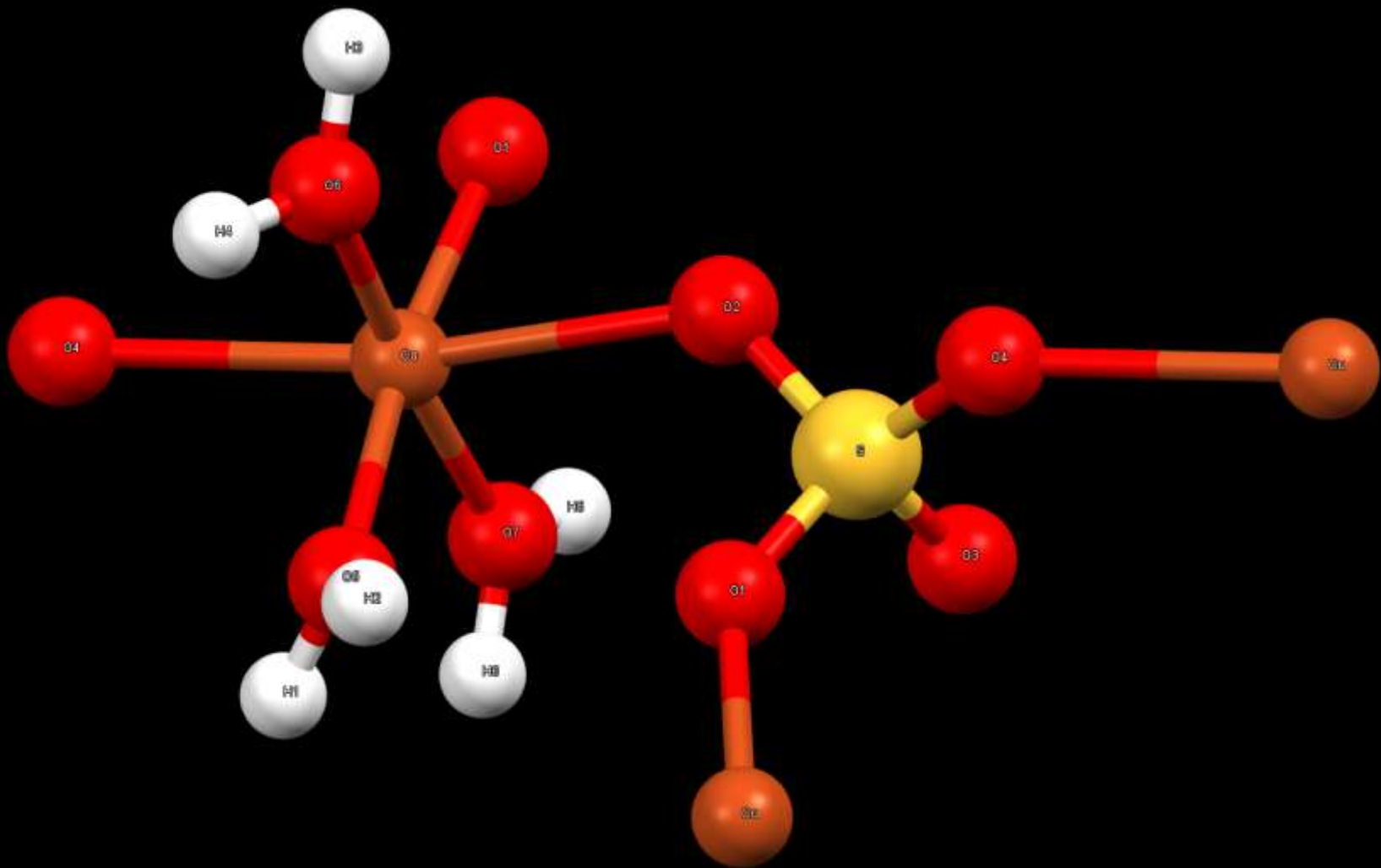


VIZUALIZACE

V programech Mercury a VESTA

Vojtěch Homuta, Nano 2020

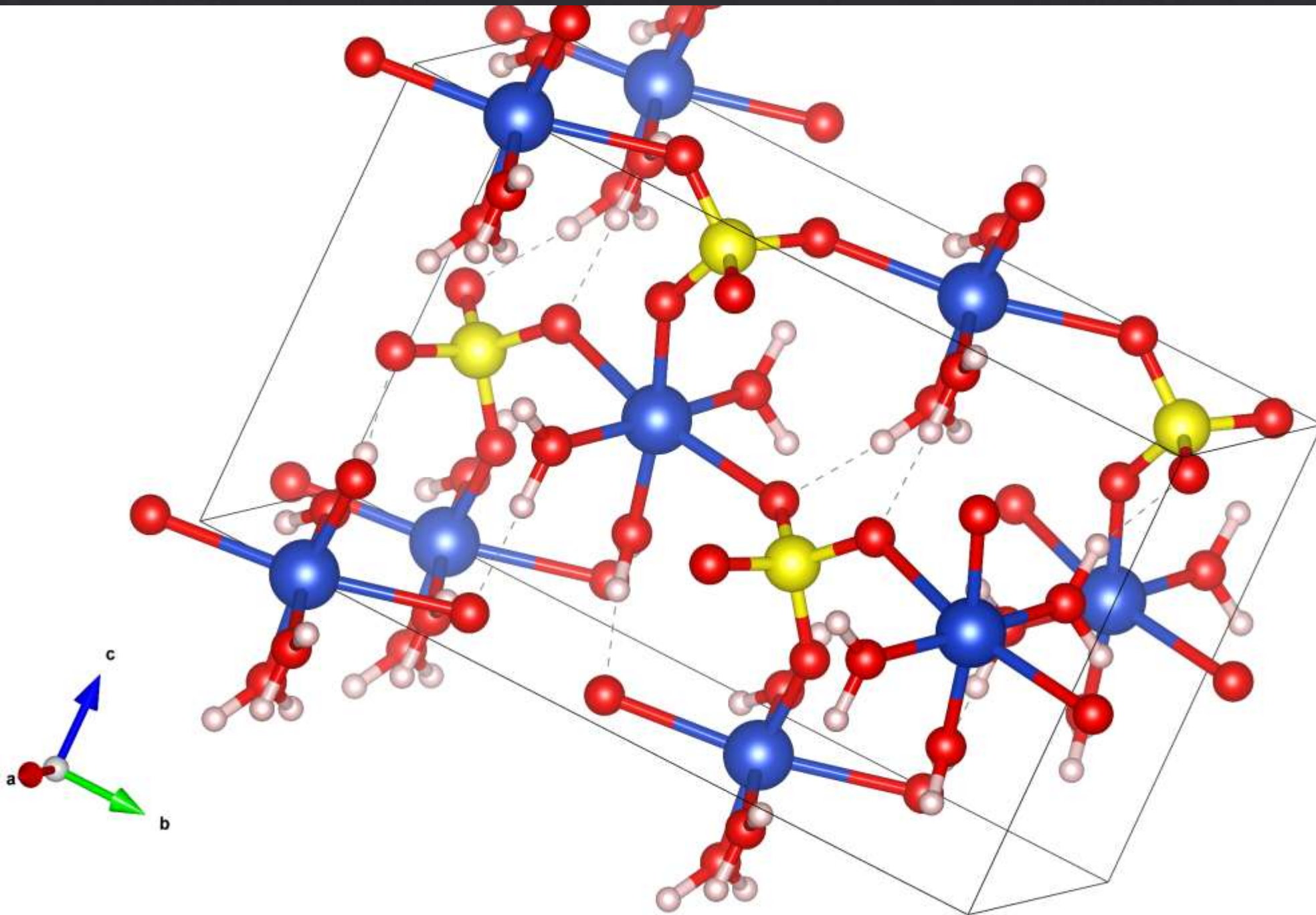
Bonattite - $\text{CuSO}_4 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$



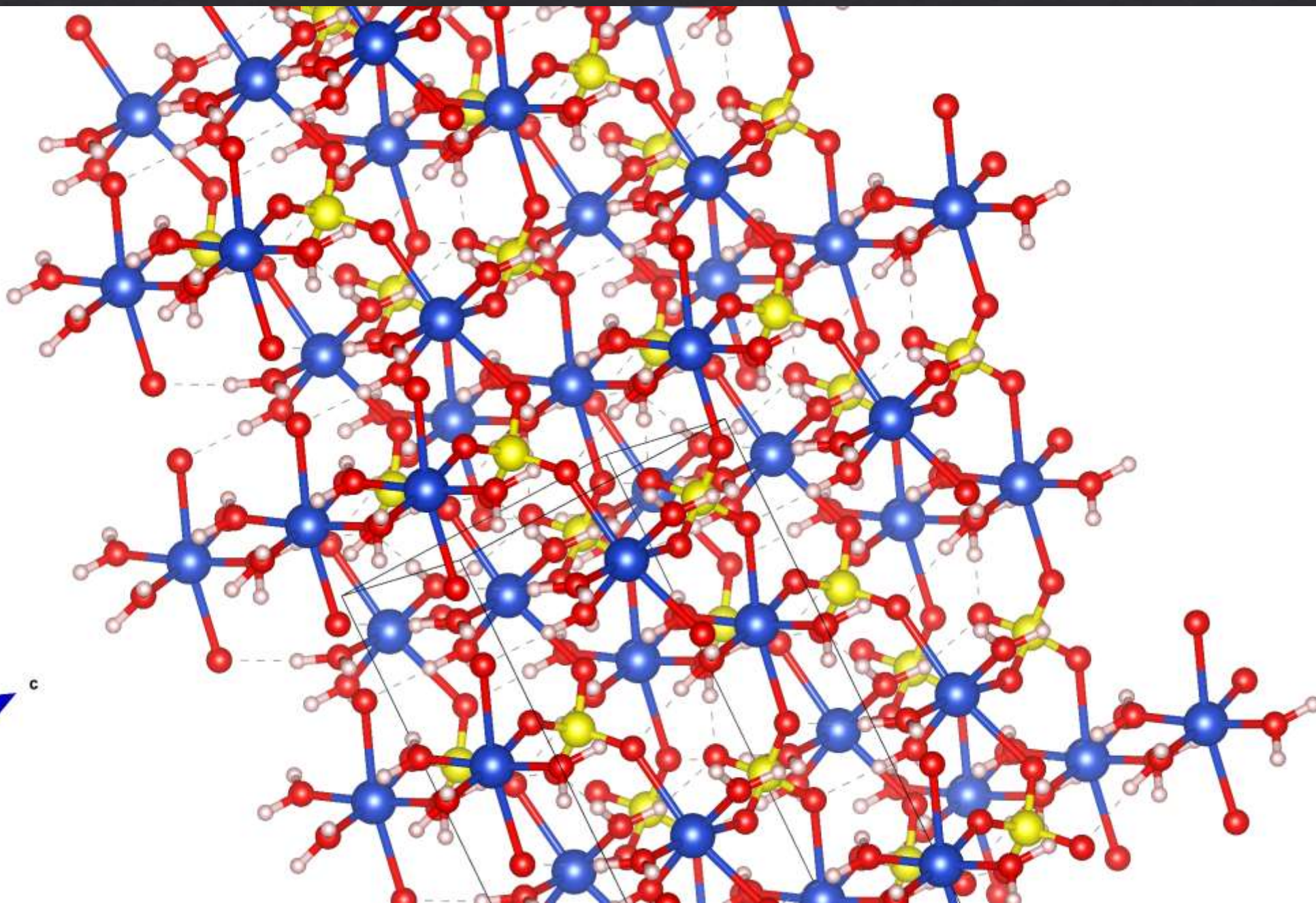
- Oranžově je zobrazena měď
Cu
- Žlutě síra **S**
- Červeně kyslík **O**
- Bíle vodík **H**

Doplňující
obrázek
bonattitu z
programu
VESTA

- Modře je
zobrazena měď **Cu**
- Žlutě síra **S**
- Červeně kyslík **O**
- Běžově vodík **H**

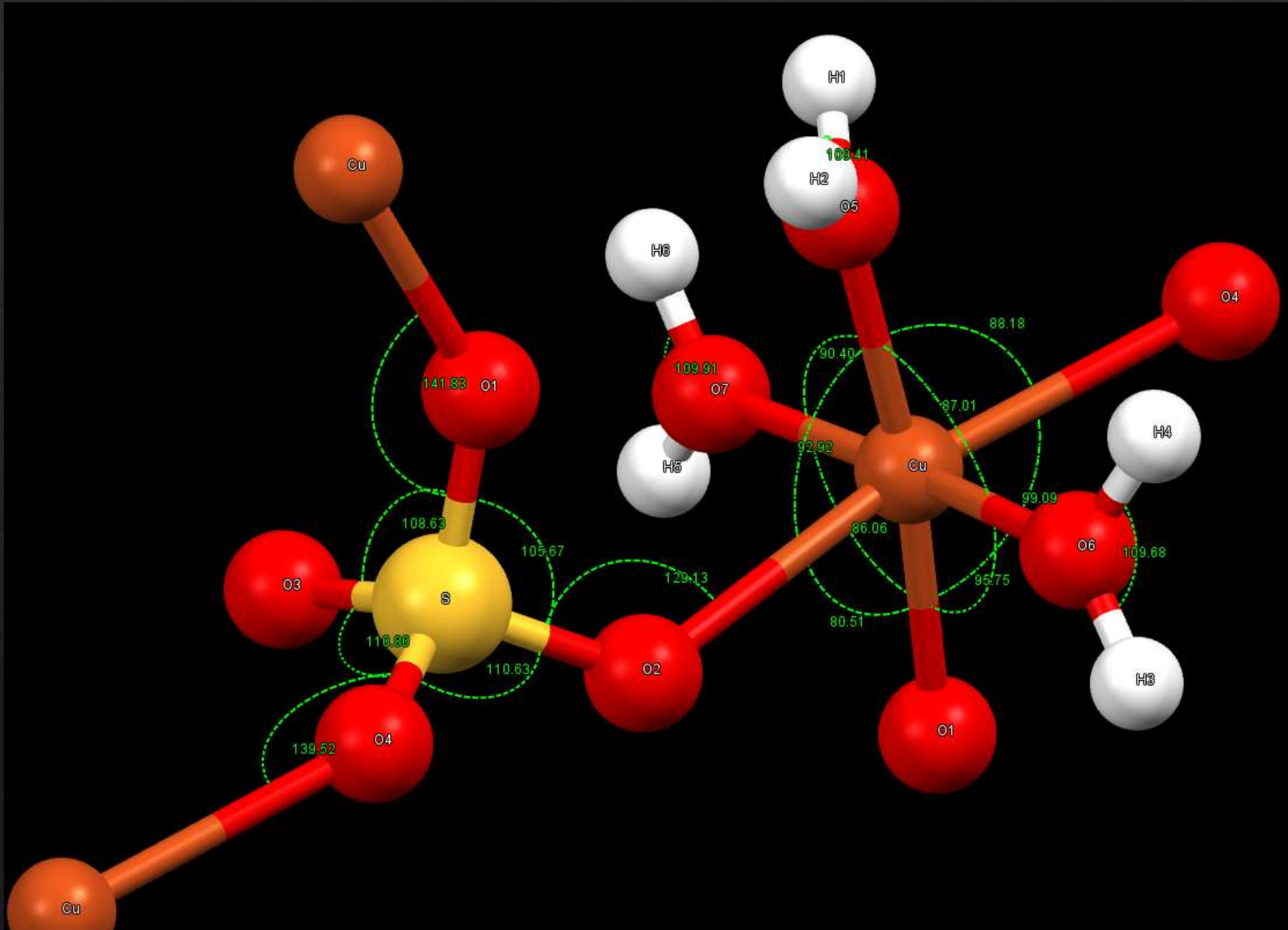


Obrázek
krystalu s 8
elementárními
buňkami



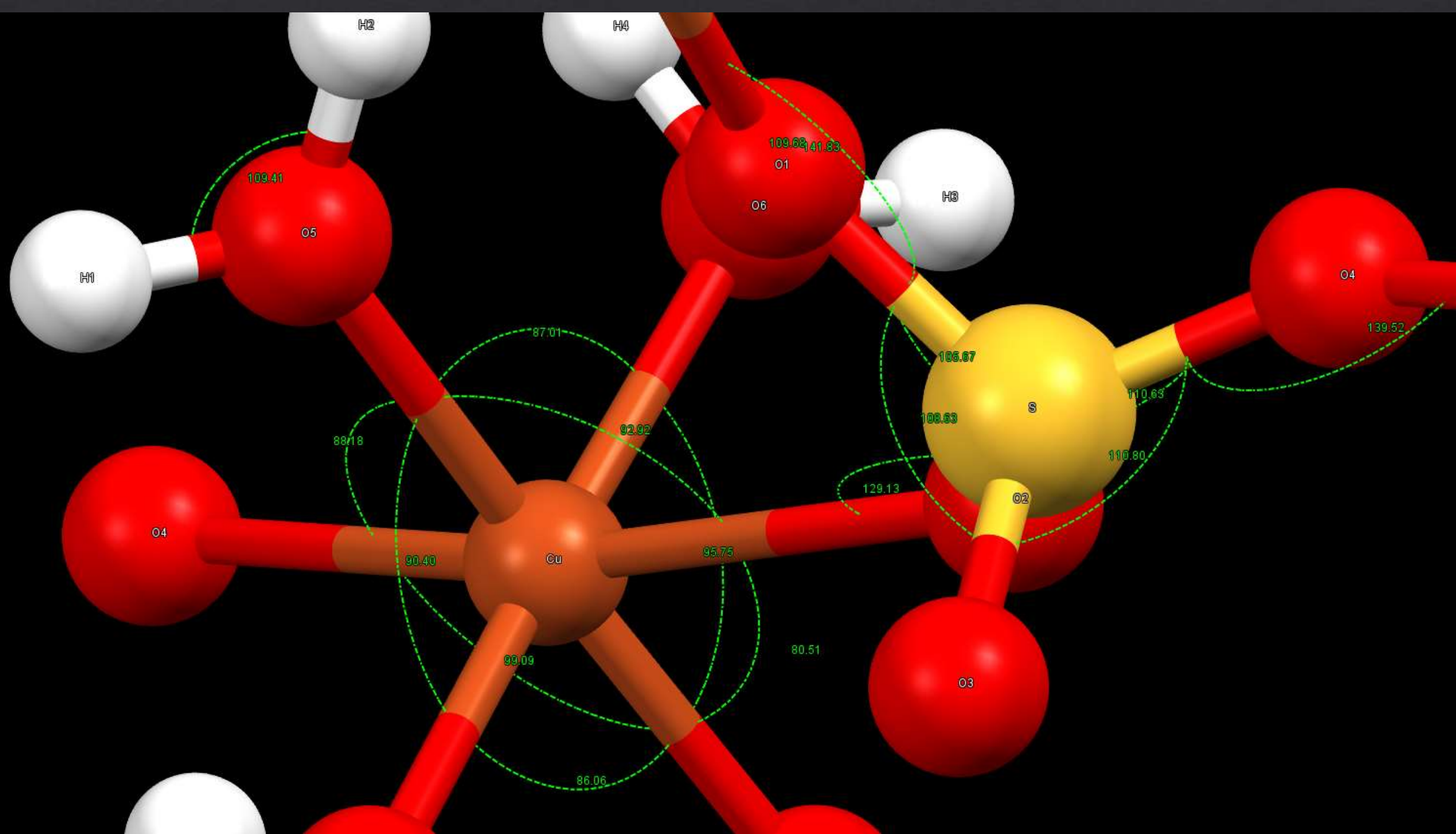
Např. vzdálenost Cu a O (mezi Cu a S) je 2,449 Å, Cu a O (v molekule vody) je 1,98 Å a mezi S a O je vzdálenost 1,48 Å.

Vazebné úhly



Na tomto obrázku jsou vidět vazebné úhly.

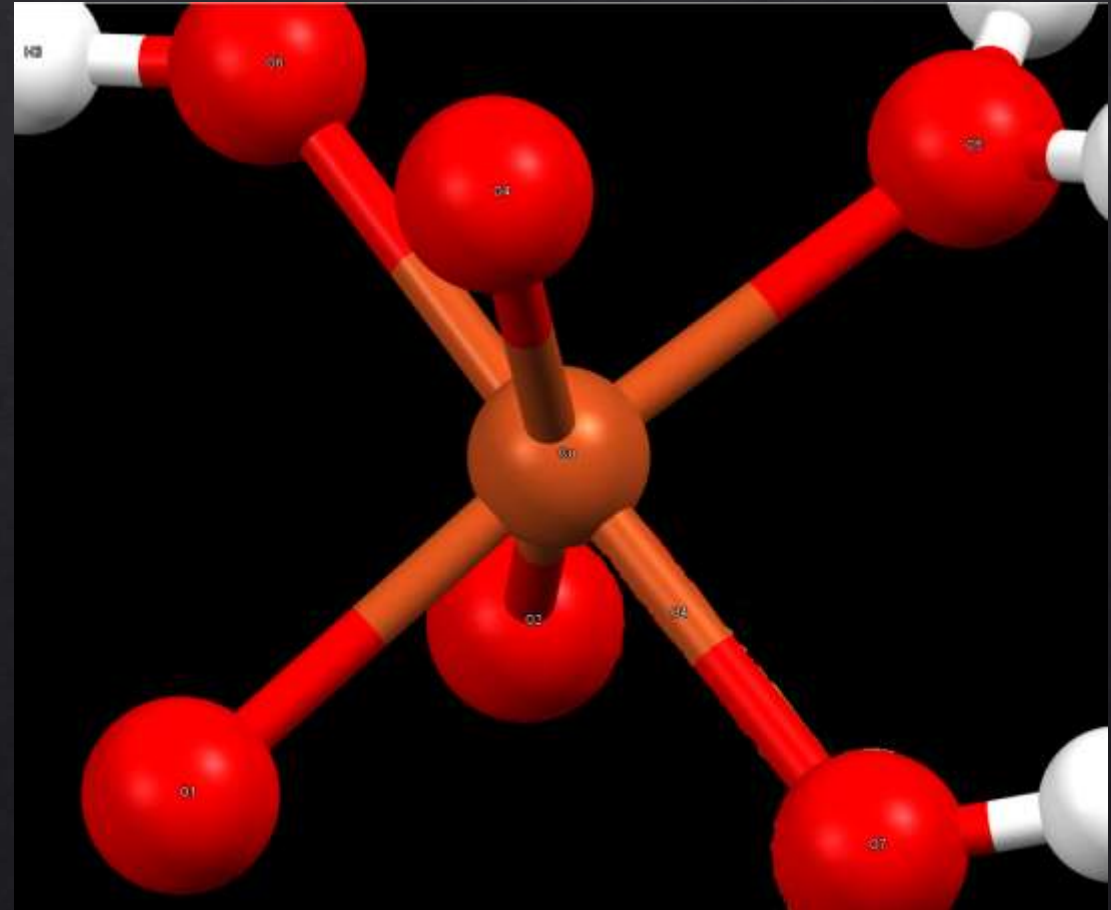
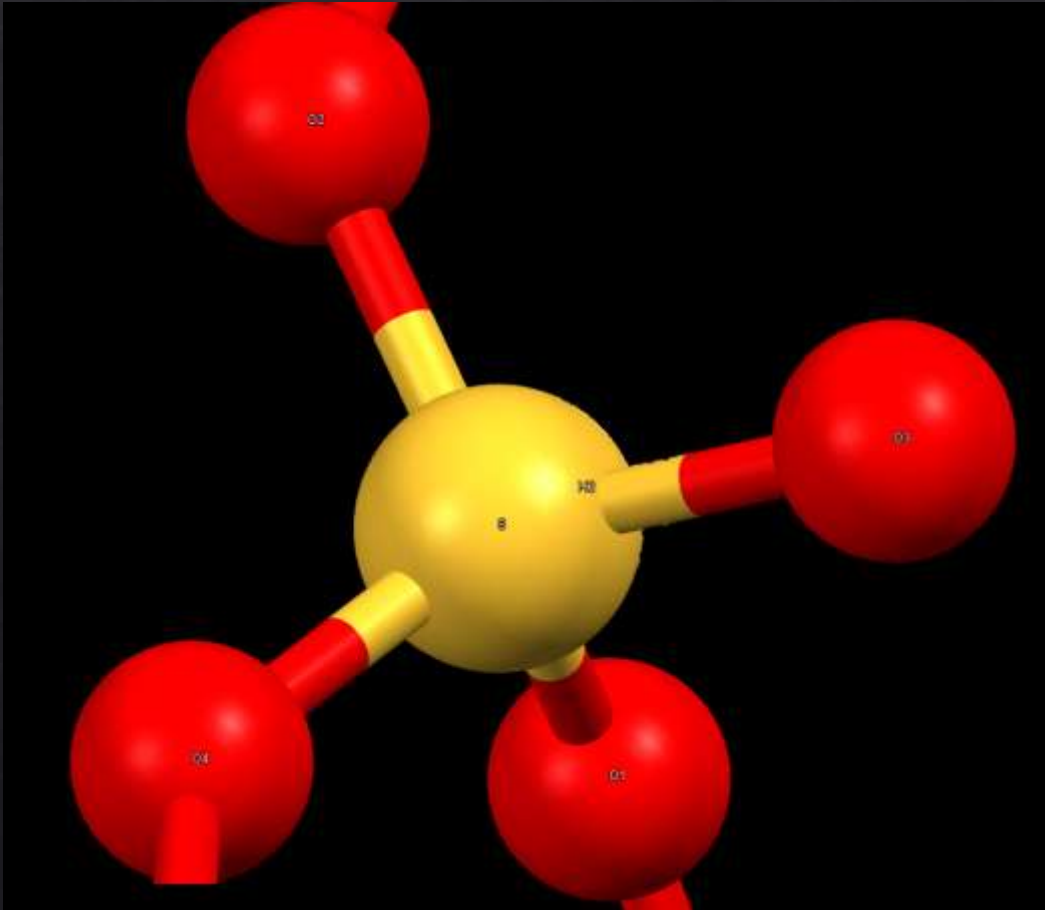
Např. vazebný úhel mezi Cu a O (v molekule vody) je $87,01^\circ$ a nebo $90,4^\circ$.

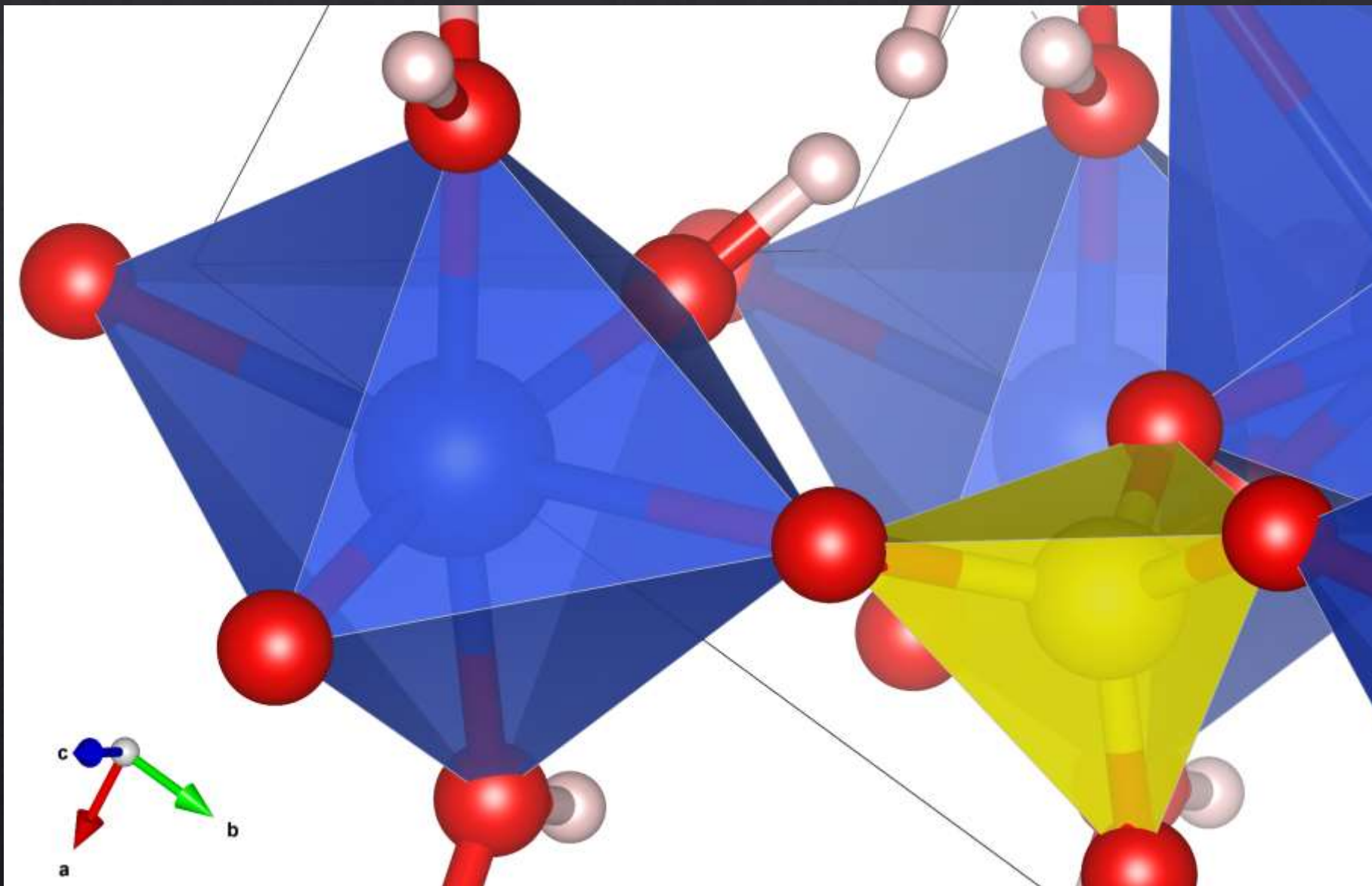


Koordinační čísla

Kolem atomu síry S jsou 4 kyslíky O → koordinační číslo 4

Kolem atomu mědi Cu je 6 kyslíků O → koordinační číslo 6



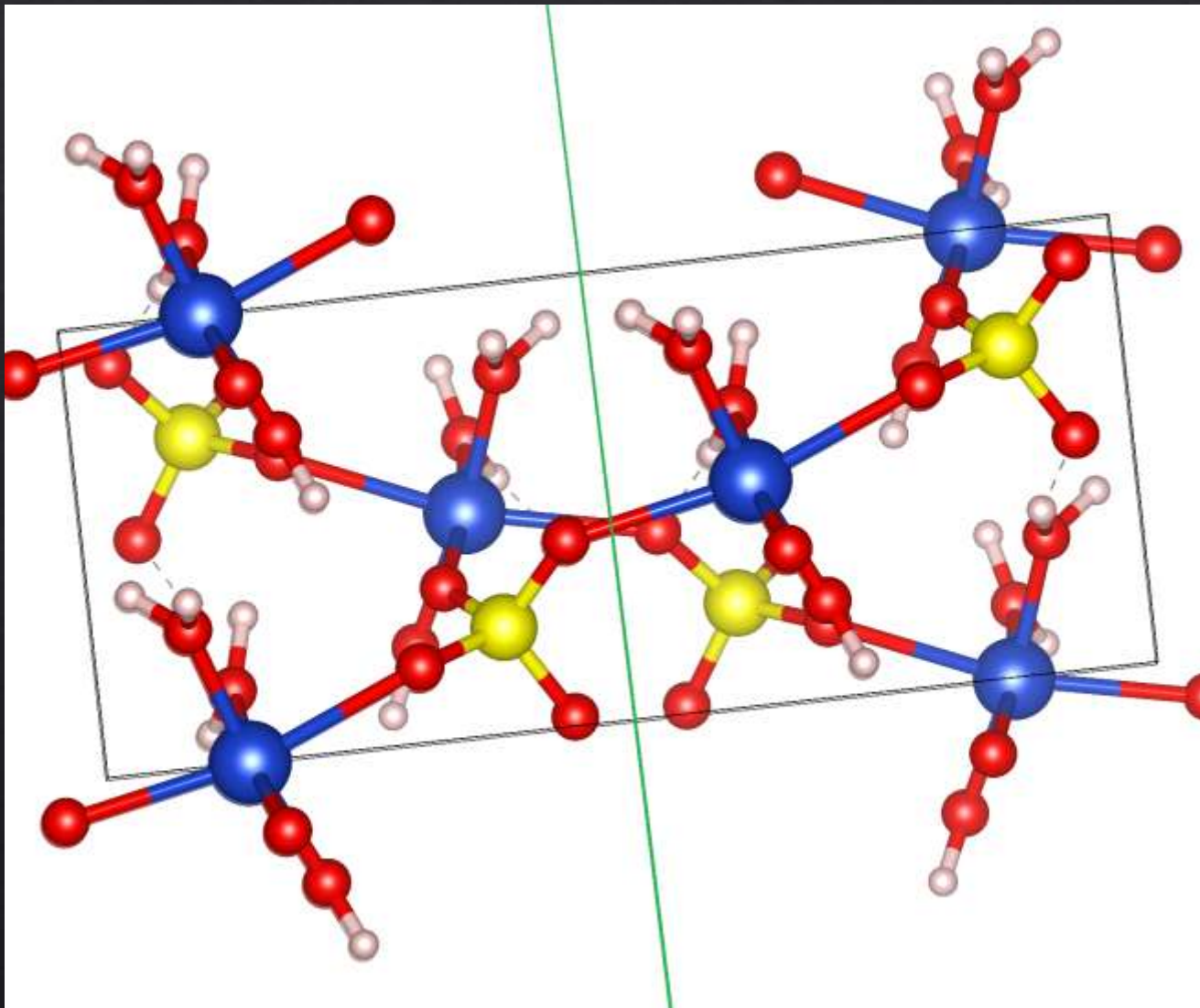


Na tomto obrázku z programu VESTA si můžeme ověřit koordinační čísla atomů mědi a síry.

Koordinační číslo 4 odpovídá tvaru molekuly **tetraedr** a k. číslo 6 odpovídá tvaru **oktaedr**.

Síra žlutě a měď modře.

Prvky symetrie

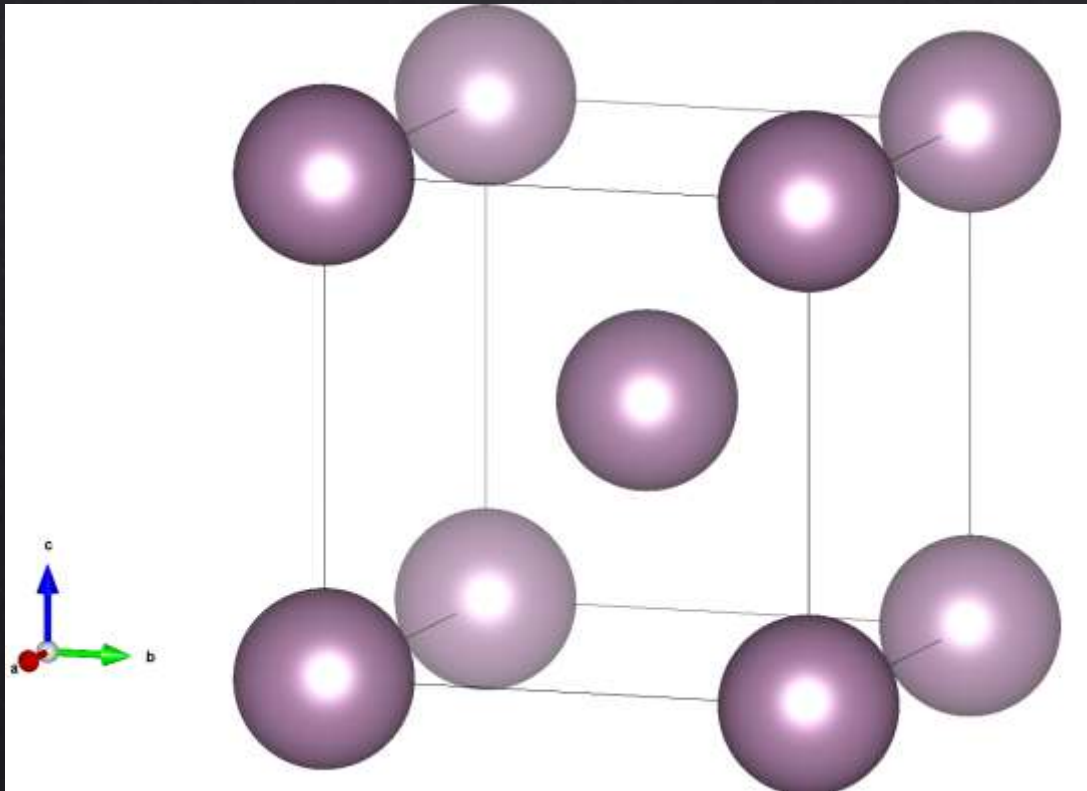


Zelenou přímkou je rozdělena buňka na 2 symetrické celky.

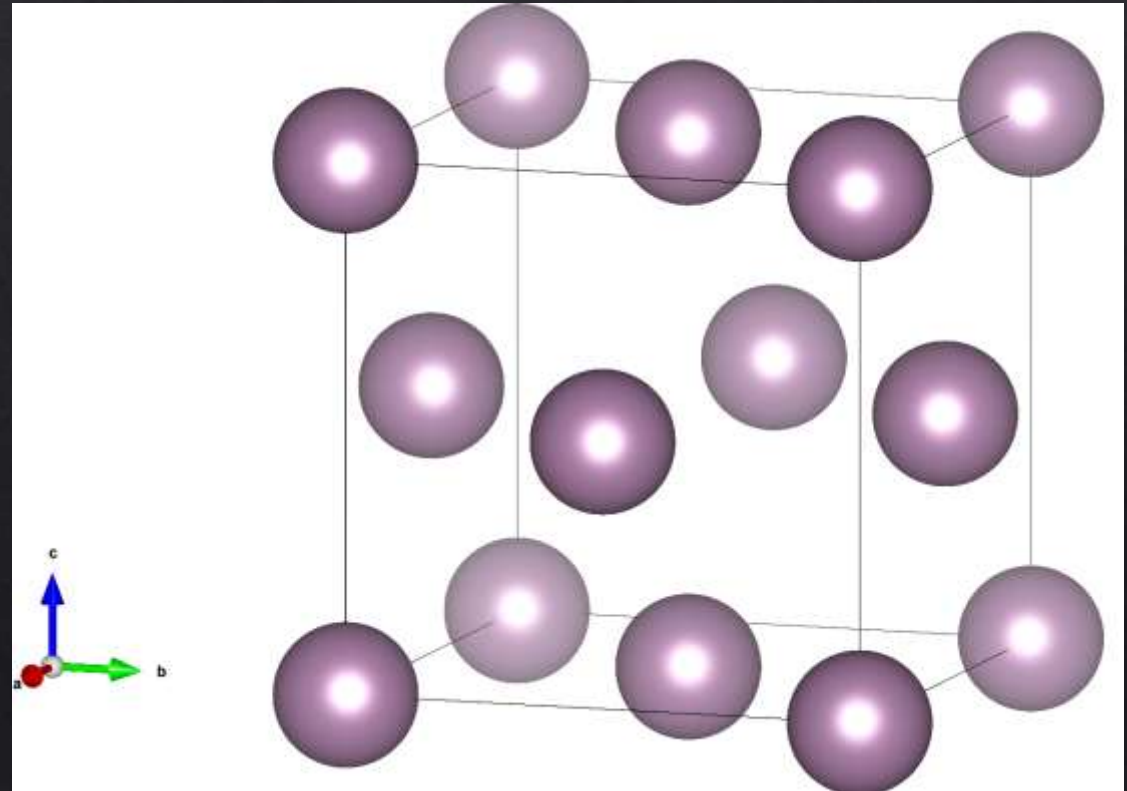
Kov – molybden Mo

Pro molybden jsem našel na „Wiki crystallography database“ 2 kubické struktury, měření bude provedeno na prostorově centrované el. buňce.

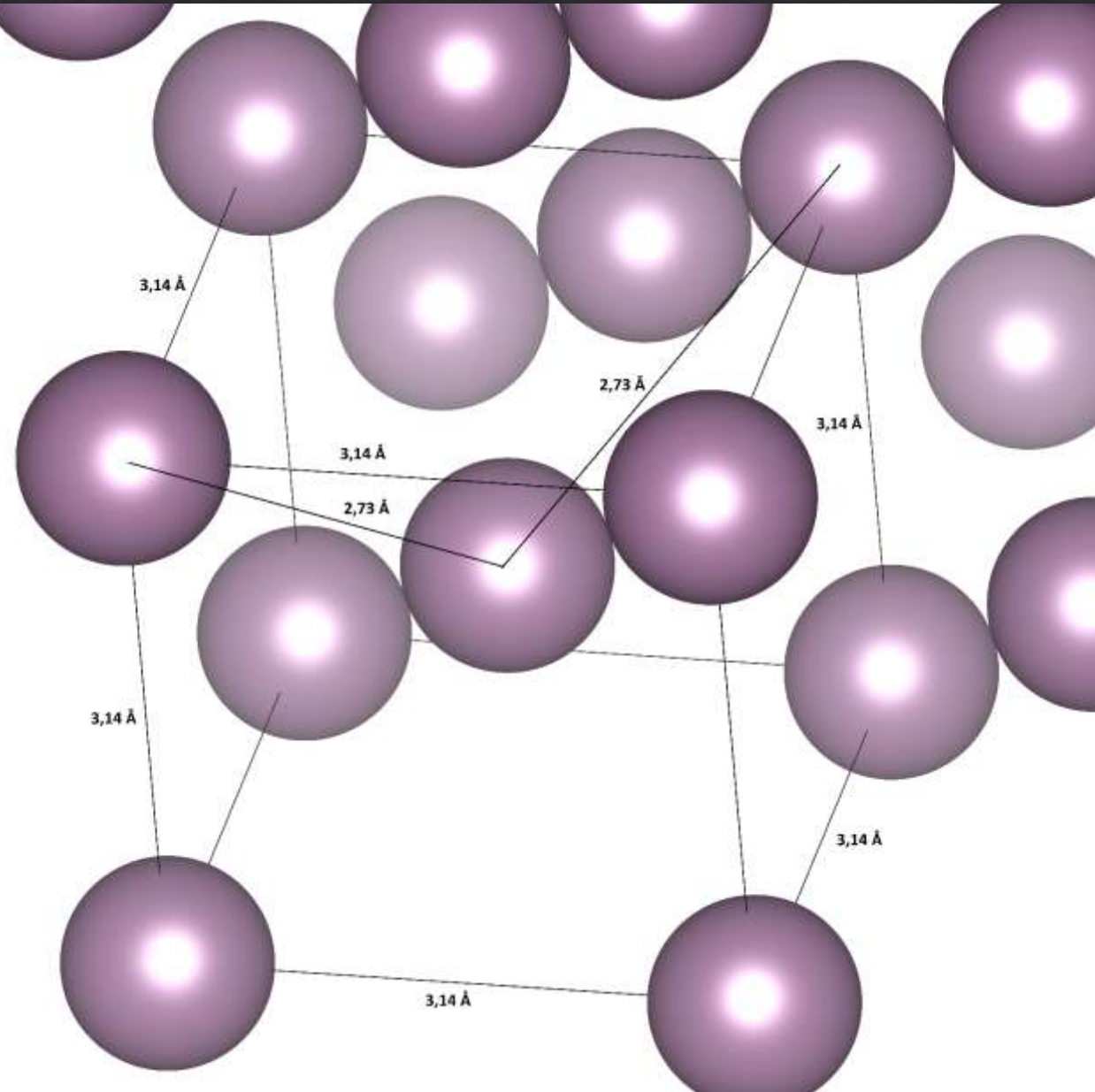
1. Prostorově centrovaná elem. buňka



2. Plošně centrovaná elem. buňka



Vzdálenosti mezi atomy

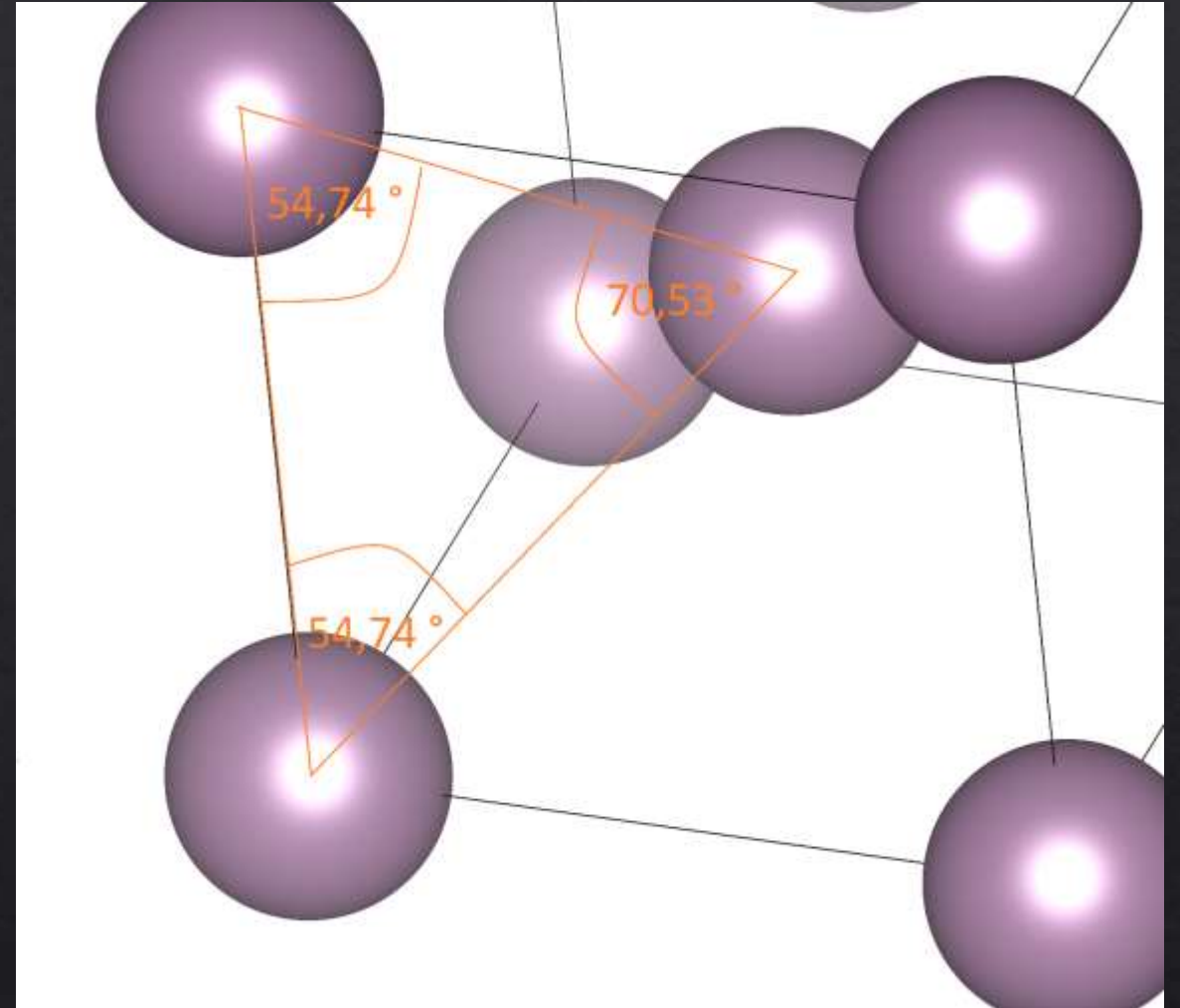
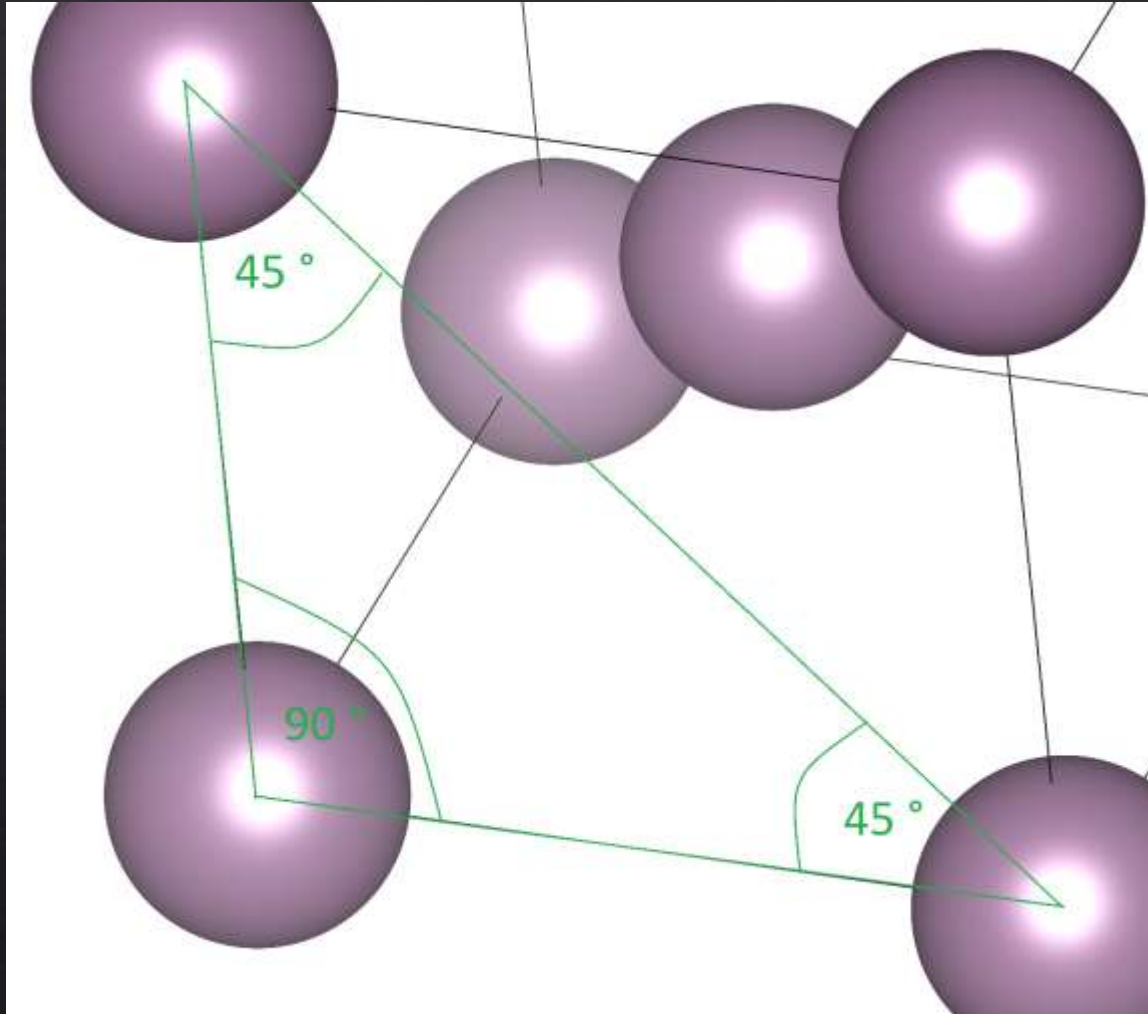


Vzdálenost mezi atomy ve vrcholech je 3,14 Å a mezi atomy ve vrcholech a atomem ve středu je 2,73 Å.

$$l(\text{Mo-Mo}) = 3.14730(0) \text{ Å}$$

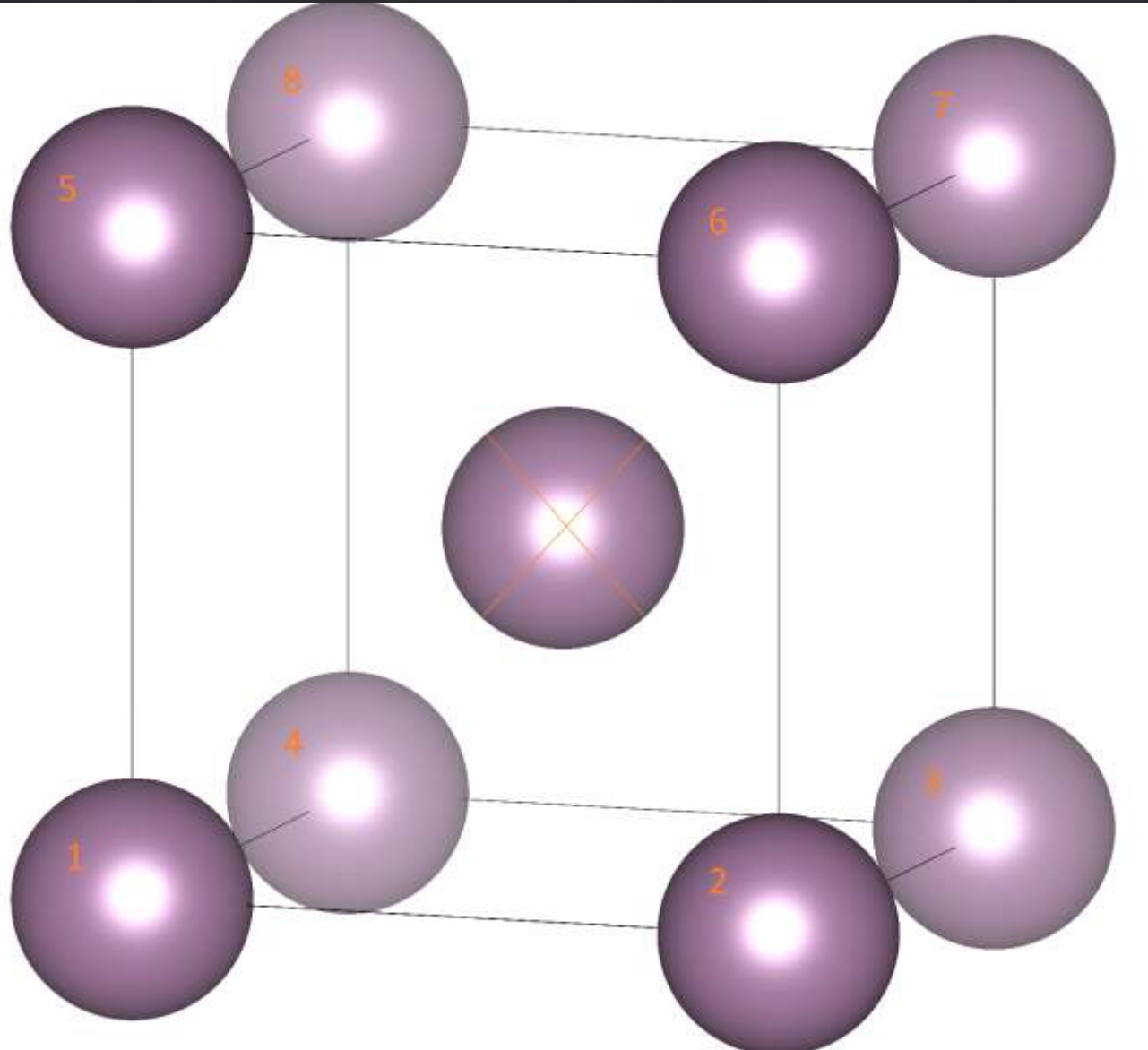
$$l(\text{Mo-Mo}) = 2.72564(0) \text{ Å}$$

Úhly mezi spojnicemi atomů



Úhel mezi spojnicemi atomů ve vrcholech je 90° a 45° a mezi spojnicemi atomů ve vrcholech a atomem ve středu buňky jsou úhly $70,53^\circ$ a $54,74^\circ$.

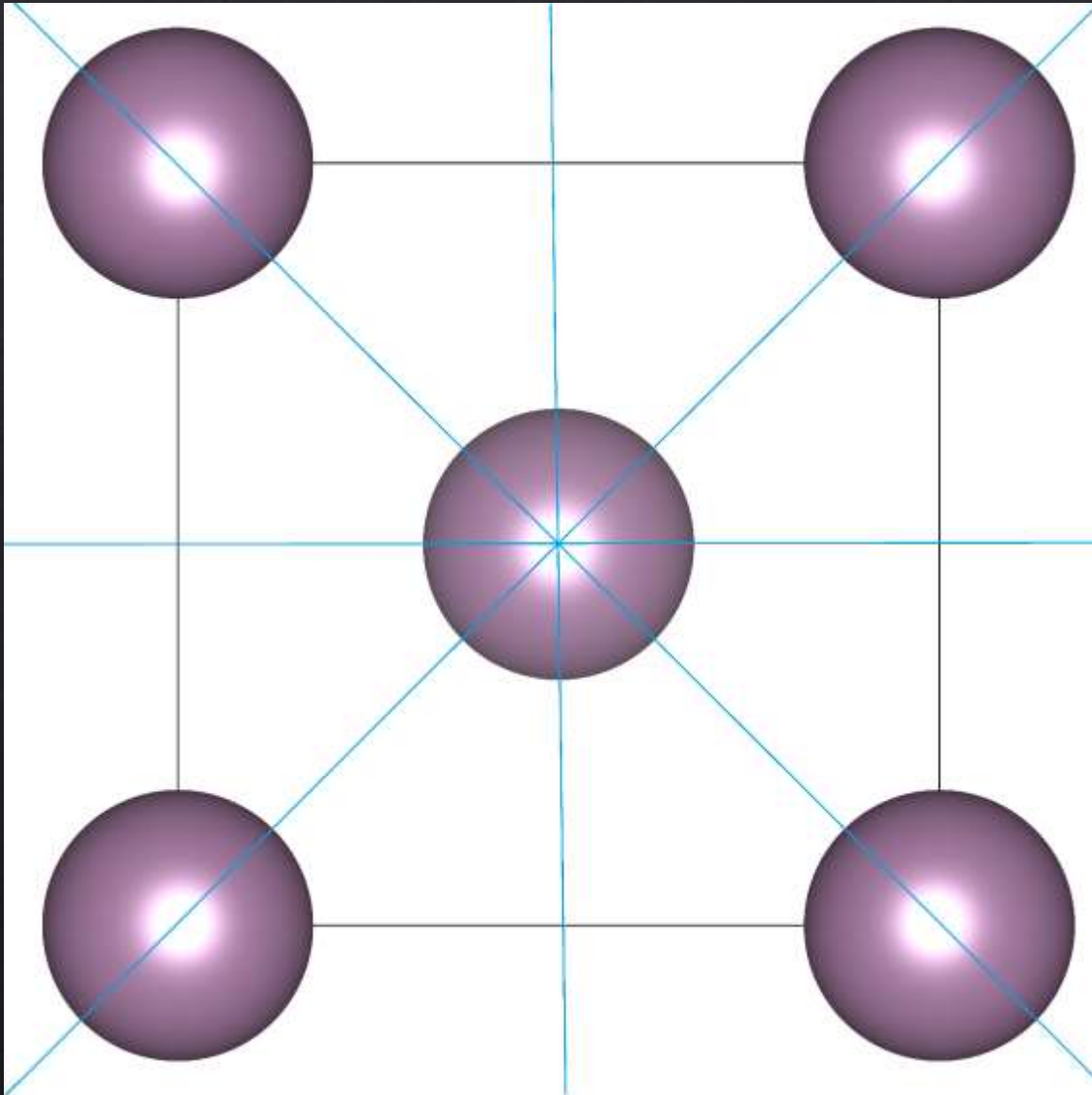
Koordinační číslo



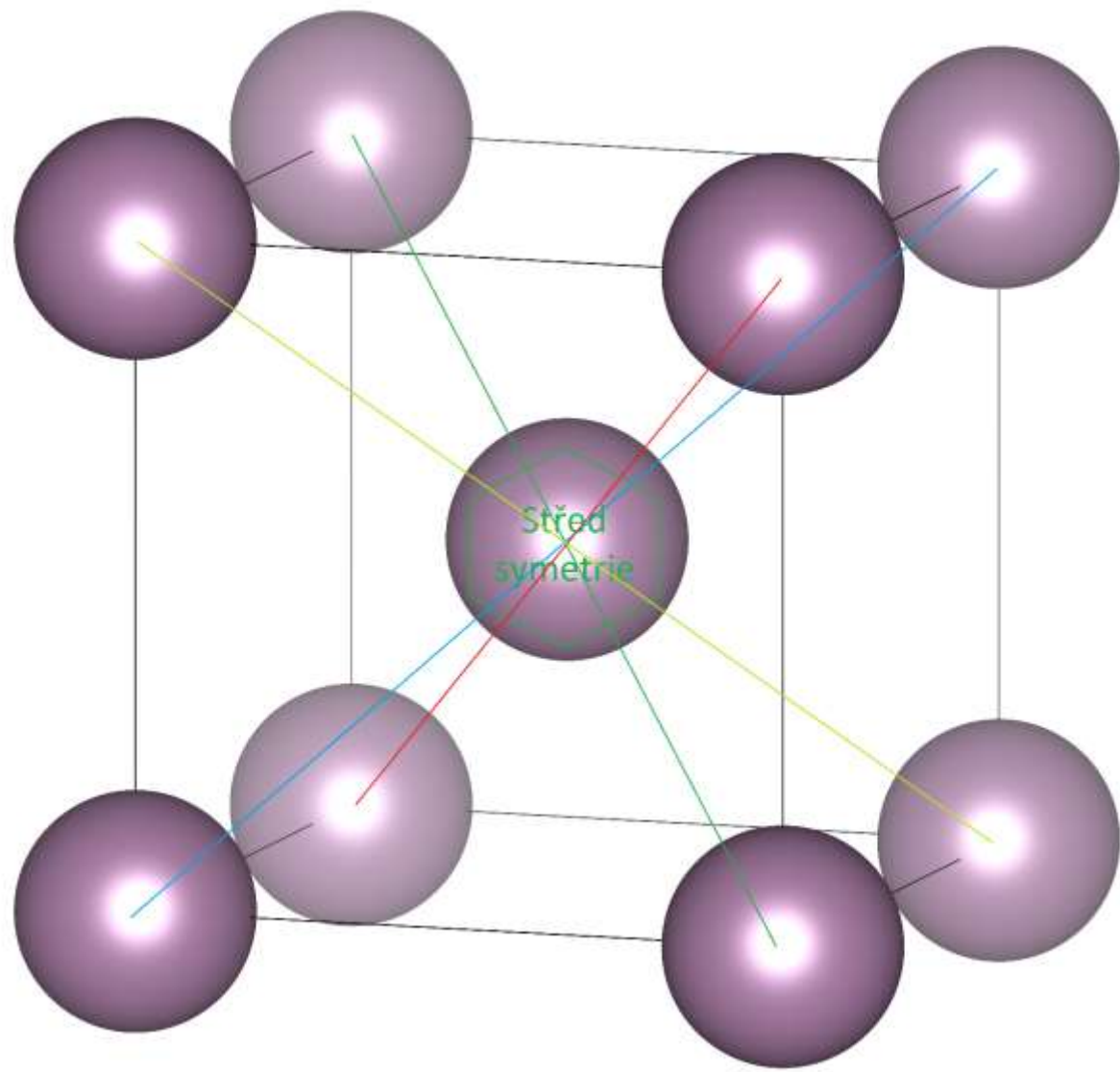
Kolem každého atomu se nachází 8 nejbližších sousedních atomů se vzdáleností 2,73 Å.

Z toho vychází **koordinační číslo 8.**

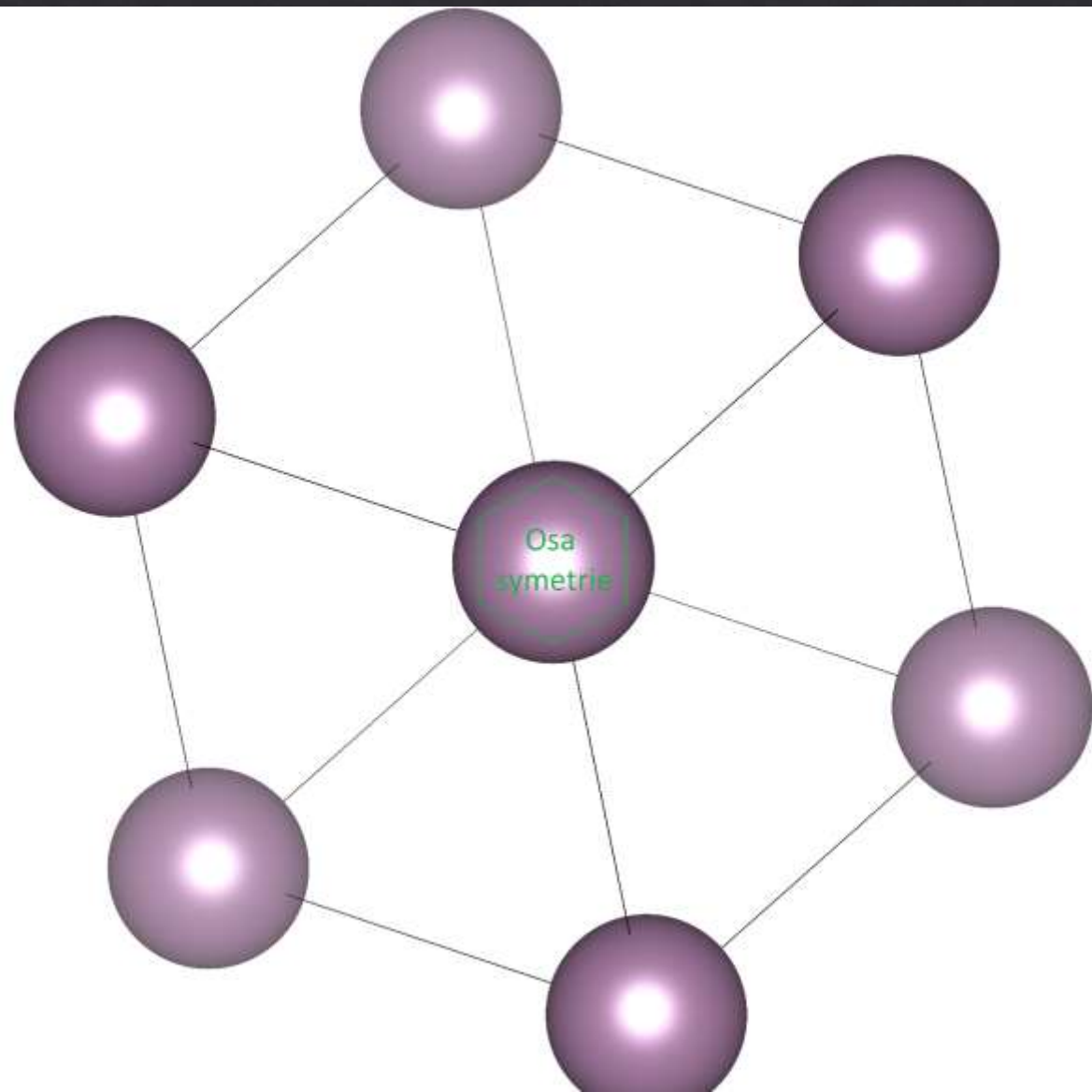
Prvky symetrie



Roviny symetrie
při pohledu z vrchu
/ zespoda / ze
stran.



Střed symetrie



Osa symetrie

Závěr

K měření byly použity 2 bezplatné programy – Mercury a VESTA. Každý má svoje výhody a nevýhody.

Mercury lépe ukazuje vzdálenosti a úhly vazeb a také dokáže ukázat roviny symetrie. Nevýhodou je méně kvalitní výstupní obrázek a absence některých důležitých funkcí v bezplatné verzi.

VESTA má intuitivnější ovládání, kvalitní výstupní obrázky a dle mého názoru hezčí grafické zpracování.

Nedokáže ale ukázat vzdálenosti a úhly vazeb přímo v obrázku, proto jsem je dodělával v jiném grafickém programu a nebo využil právě program Mercury.