

Vizualizace krystalů

Ema Chudobová

Užitý software:

- Vesta, MS Word 2016, MS Malování

Zadání:

Nalezněte data pro strukturu a zobrazte struktury vylosovaných dvou krystalů a měřením porovnejte vzdálenosti mezi atomy a úhly mezi vazbami, určete koordinační číslo atomů tvořících strukturu, nejlépe najděte prvky symetrie modelů.

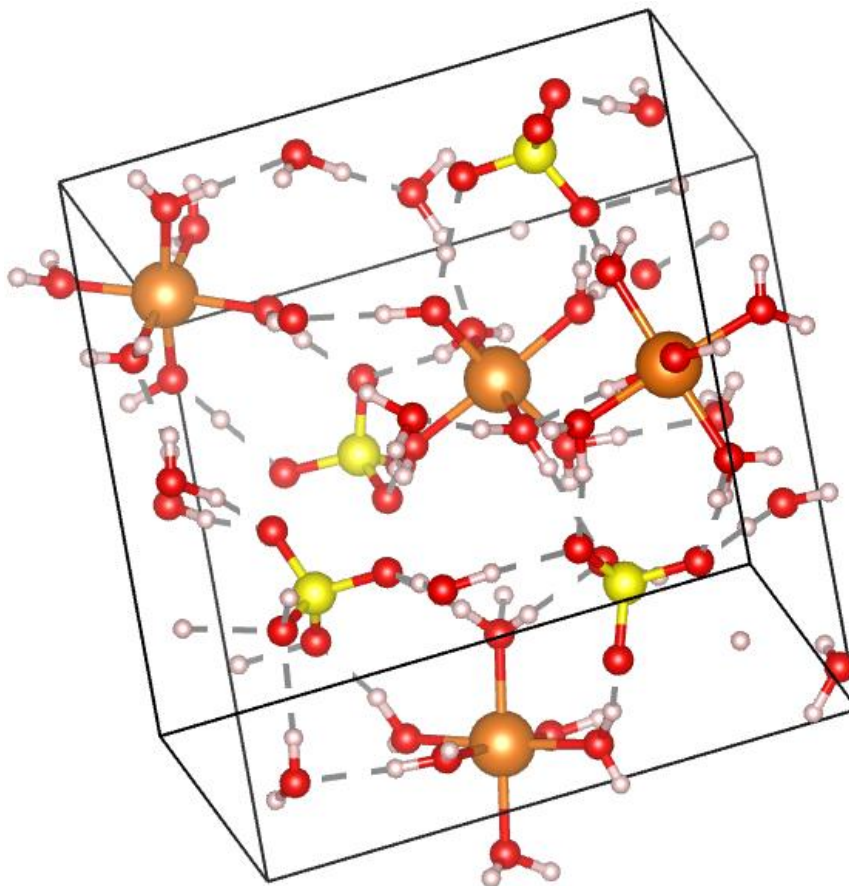
Vylosované krystaly:

- epsomit, krystal neodymu

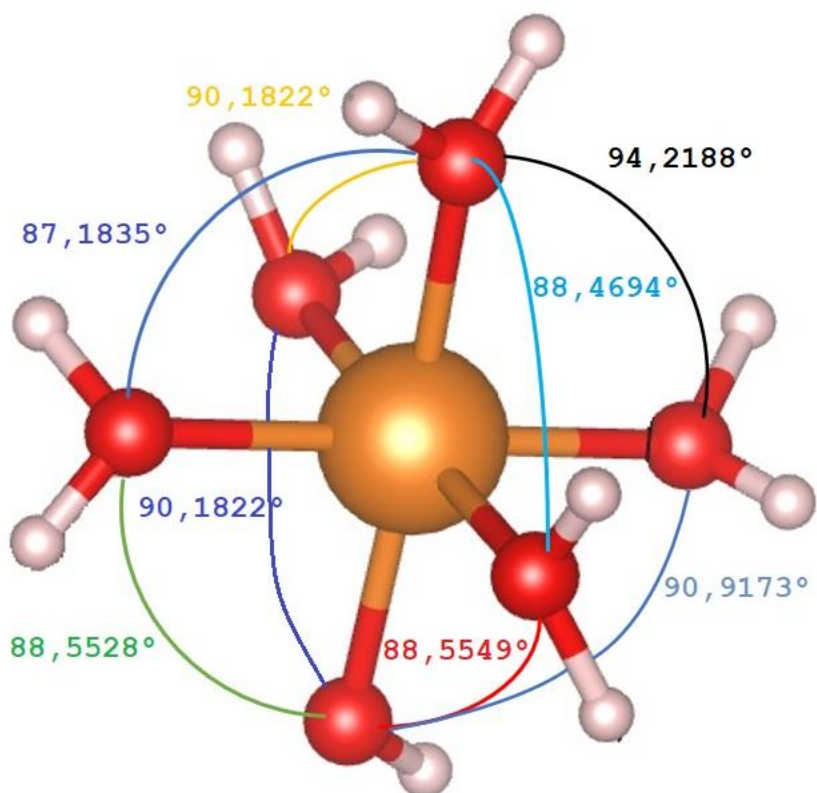
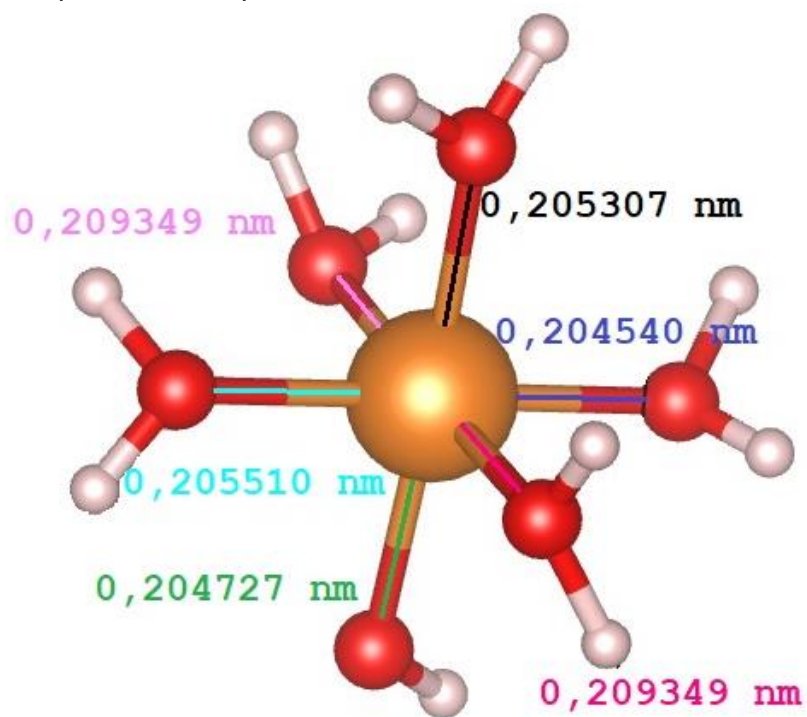
Epsomit ($\text{MgSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$)

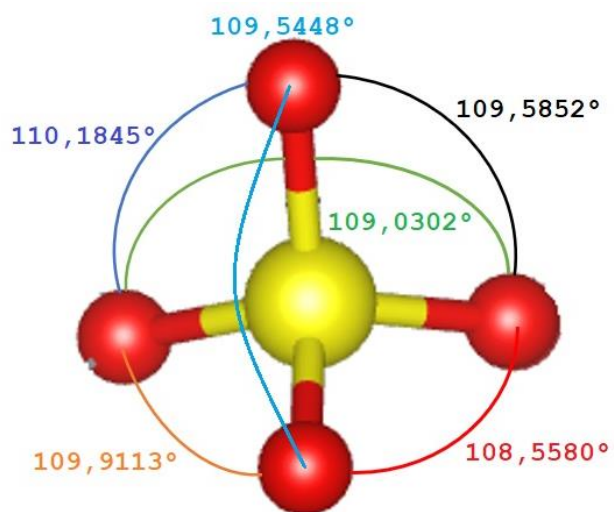
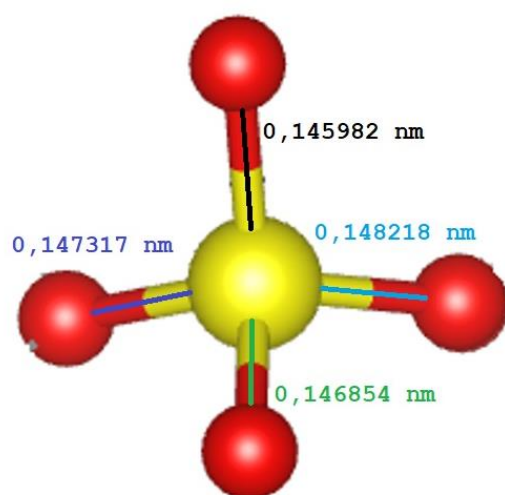
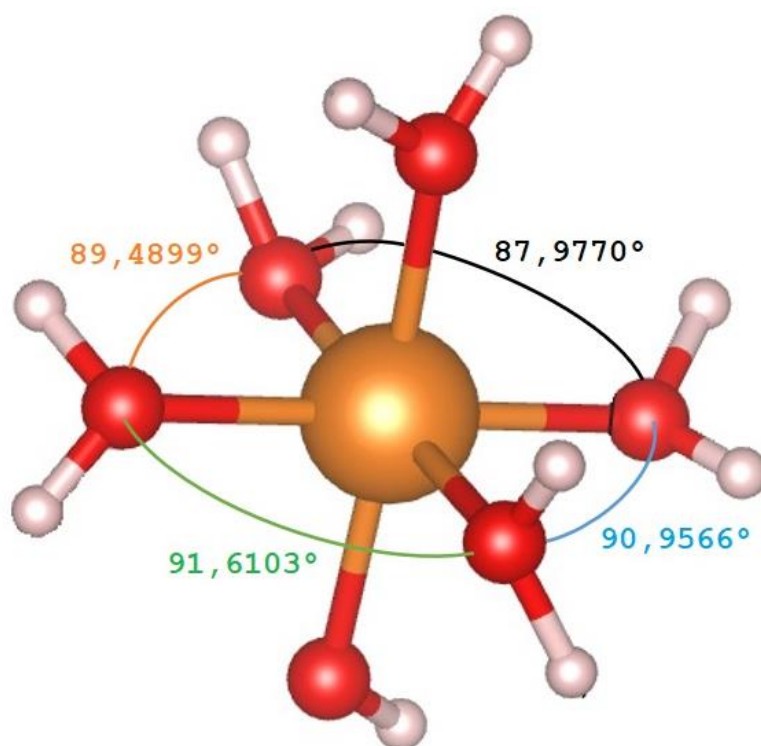
Seznam atomů:

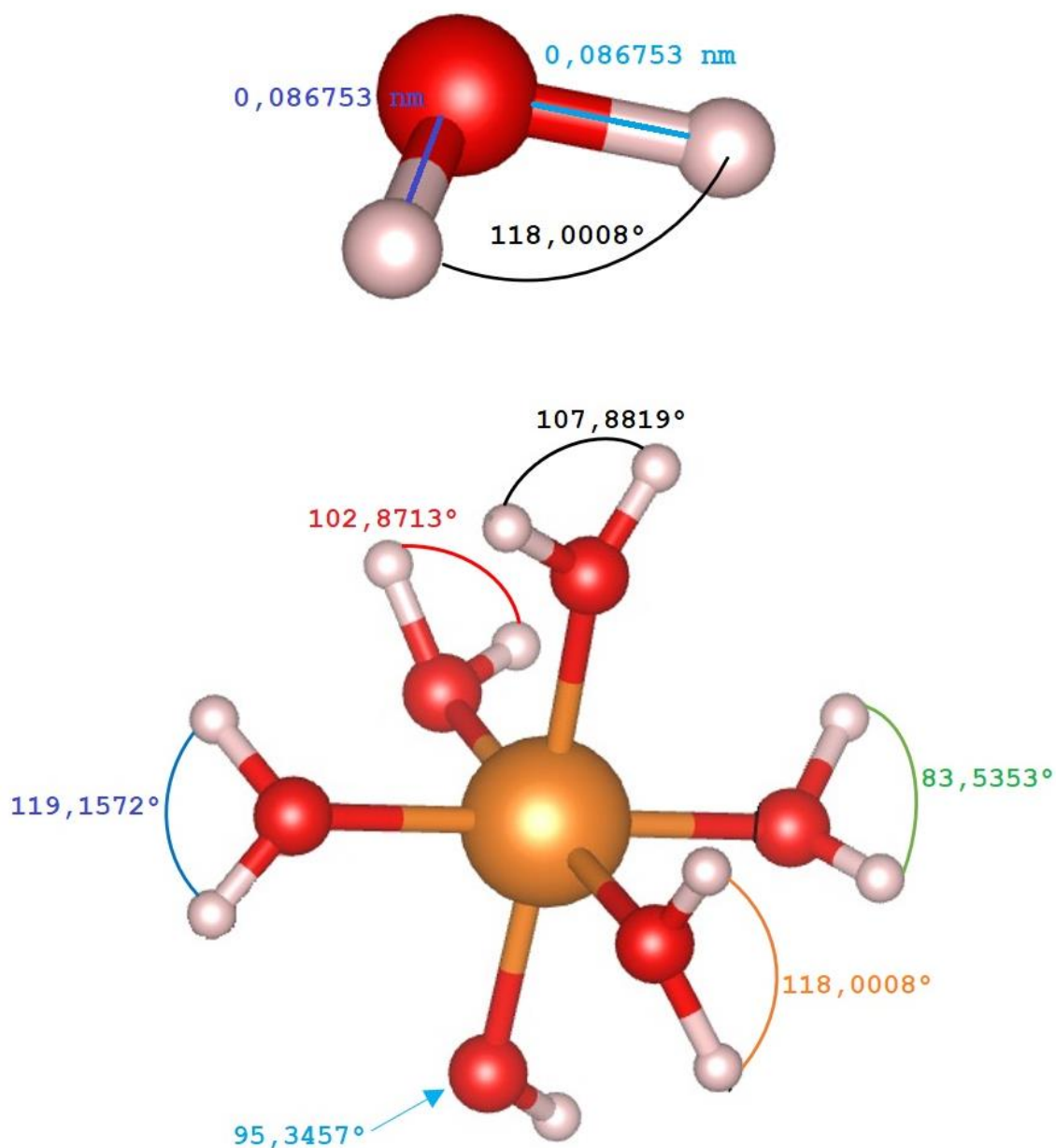
- hořčík (Mg), síra (S), kyslík (O), vodík (H)



Délka vazeb a úhly mezi atomy:





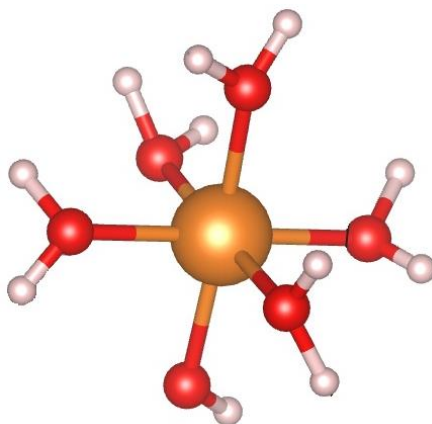


Deformace molekul je způsobena Jahn-Tellerovým efektem. Každá nelineární molekula, která má elektrony v degenerovaném stavu, bude nestálá a bude se deformovat tak, aby vznikl systém o nižší energii, v němž bude degenerace odstraněna.¹

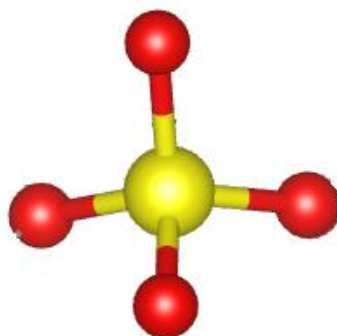
¹ GRIFFITH, J. S. a L. E. ORGEL. Ligand-field theory. *Quarterly Reviews, Chemical Society* [online]. 1957, roč. 11, č. 4. DOI: 10.1039/qr9571100381

Koordinální číslo:

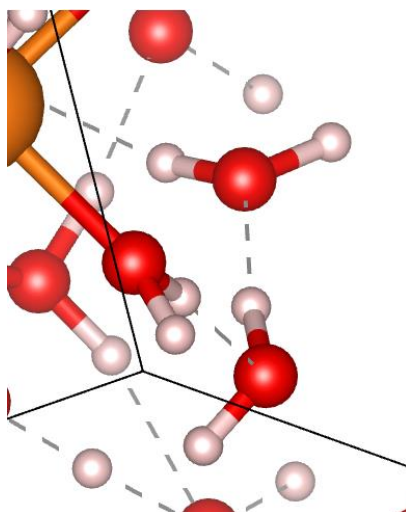
Hořčík obklopuje šest atomů kyslíku. Jeho koordinální číslo je tedy 6.



Kolem atomu síry jsou čtyři kyslíky. Její koordinální číslo je 4.



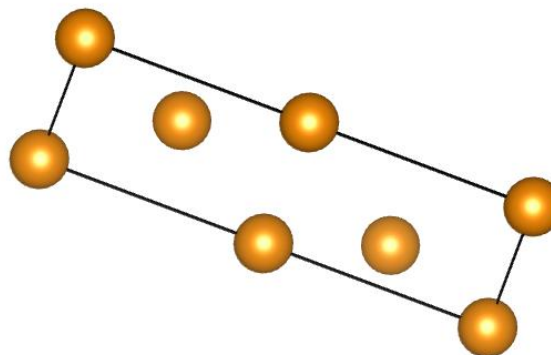
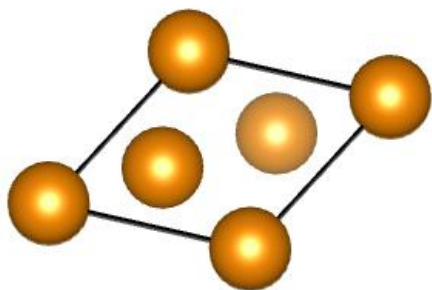
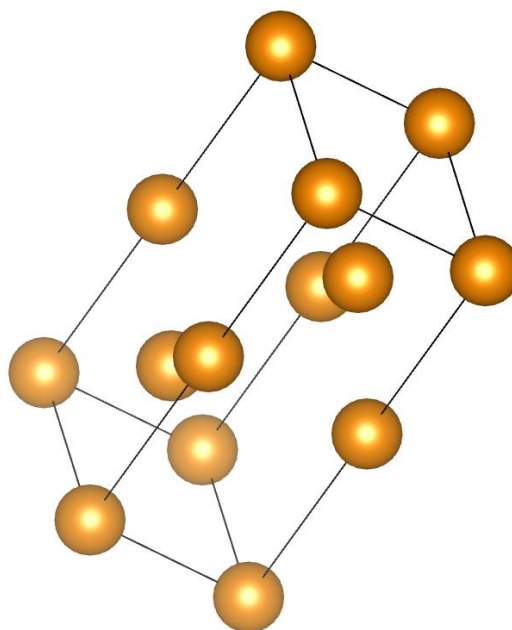
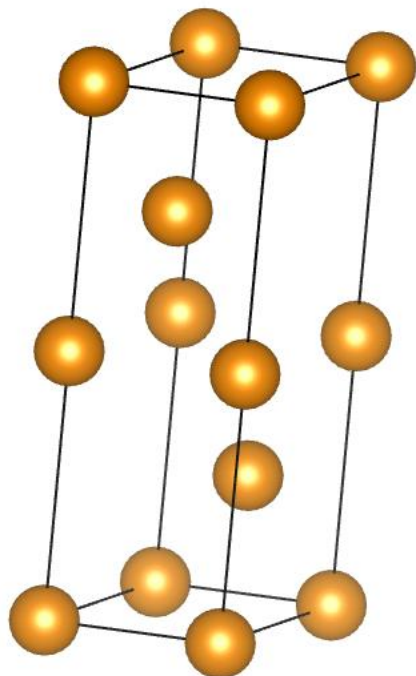
Sedmá voda je v krystalu držena vodíkovým můstkem. Díky této interakci má kyslík koordinální číslo 3 a koordinální číslo vodíku je 2.



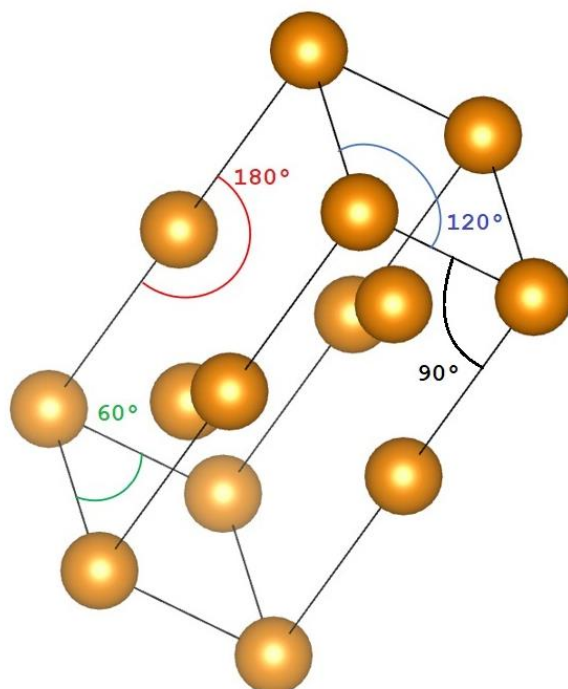
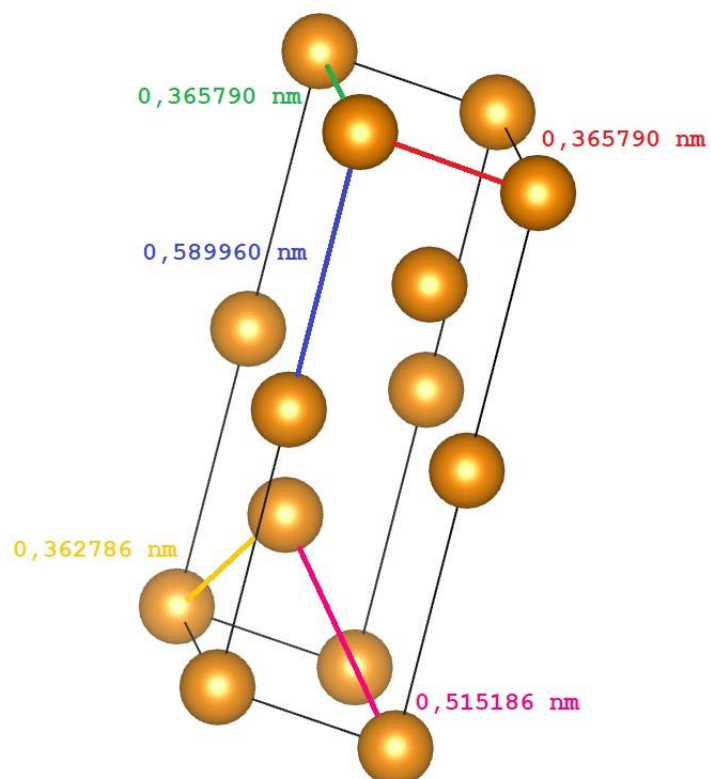
Neodym (Nd)

Seznam atomů:

- Neodym (Nd)

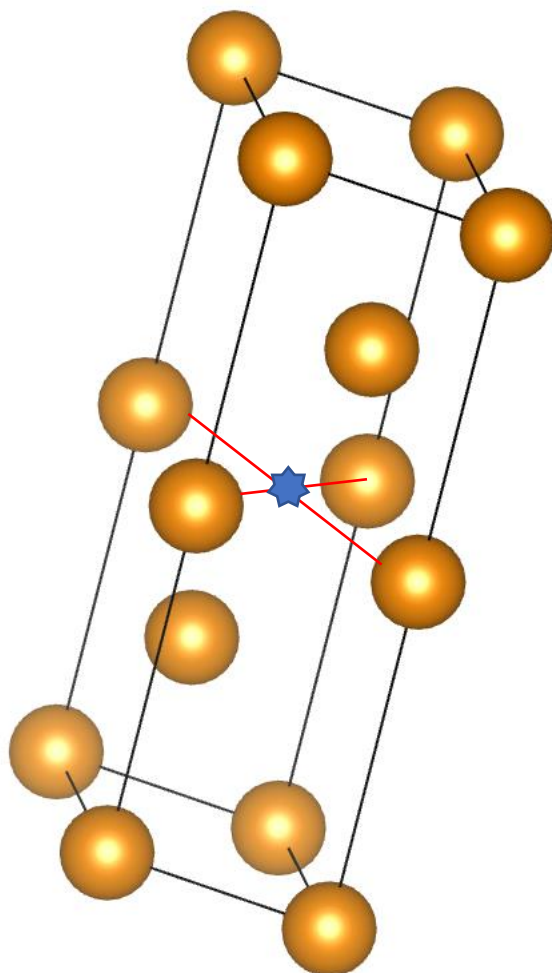


Délka vazby a úhly mezi atomy:



Prvky symetrie:

Krystal neodymu má jeden prvek symetrie, a to střed symetrie znázorněn na obrázku modrou hvězdičkou.



Koordinální číslo:

Koordinální číslo neodymu je **12**.

