

Technická univerzita v Liberci

Fakulta přírodovědně-humanitní a pedagogická

VIZUALIZACE KRYSTALOVÝCH STRUKTUR

Seminární práce z předmětu: Anorganická chemie

Vyučující: Ing. Jan Grégr

Autor: Eliška Suchardová (1. ročník)

Rok: 2020

Zadání:

1. Nalezněte cif data a zobrazte struktury následujících solí a měřením porovnejte vzdálenosti mezi atomy (ionty) a úhly mezi vazbami (spojnicemi částic), určete koordinační číslo atomů tvořících strukturu (kolik obráceně nabitých částic je okolo kationtu, respektive aniontu ve stejných vzdálenostech nejbližší), najděte prvky symetrie modelů (rovina symetrie, osa symetrie, bod symetrie).

NaCl – KCl

NaNO₃ – KNO₃

kyselina boritá – borax

stolzit – raspit

rutil – anatas

2. Nalezněte cif data a zobrazte struktury **kieseritu** a měřením porovnejte vzdálenosti mezi atomy (ionty) a úhly mezi vazbami (spojnicemi částic) Určete strukturální uspořádání kieseritu (vzdálenosti, úhly, koordinační čísla).
3. Nalezněte data pro strukturu a zobrazte struktury **titanu** a měřením porovnejte vzdálenosti mezi atomy (kationty) a úhly mezi vazbami (spojnicemi kationtů), určete koordinační číslo atomů tvořících strukturu (kolik kationtů je okolo jednoho kationtu ve stejných vzdálenostech nejbližší), najděte prvky symetrie modelů (rovina symetrie, osa symetrie, bod symetrie). Určete strukturální uspořádání titanu.

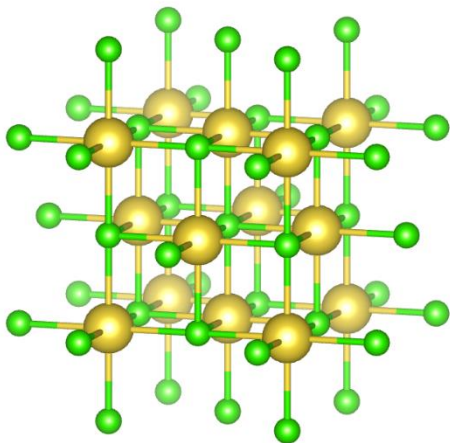
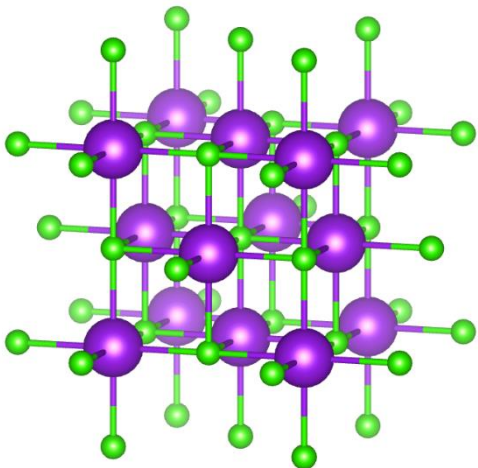
Komentář:

Pokud to bylo možné, byly vzdálenosti a úhly mezi atomy (ionty) zaznamenávány co nejpřesněji (např. NaCl). U složitějších a rozmanitějších krystalů jsem se musela uchýlit ke stanovení průměrů, neboť se délky (resp. úhly) nepatrně lišily a jejich výčet by byl nejenže příliš dlouhý, ale ani nijak neobohacující. U krystalů s vícero patrně odlišnými úhly jsem zaznamenávala všechny možnosti. U složitějších krystalů jsem určovala primárně nějakým způsobem důležité vlastnosti krystalů.

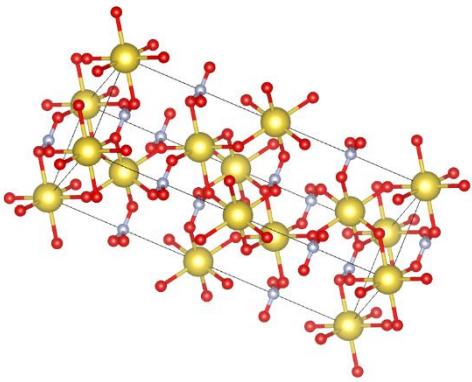
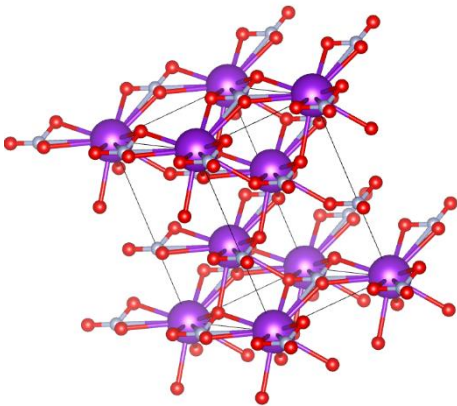
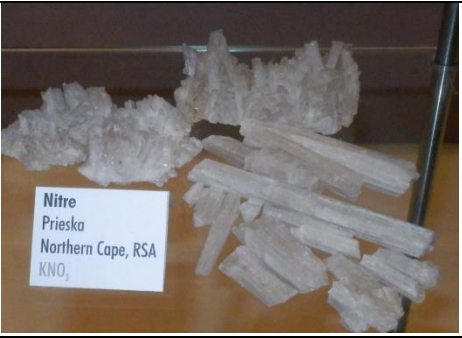
Čerpáno ze zdrojů:

1. *Mineralogy Database* [online]. [cit. 2020-05-03]. Dostupné z: <http://webmineral.com/>
2. *Mindat.org* [online]. [cit. 2020-05-03]. Dostupné z: <https://www.mindat.org/>
3. *RRUFF* [online]. [cit. 2020-05-03]. Dostupné z: <https://rruff.info/>

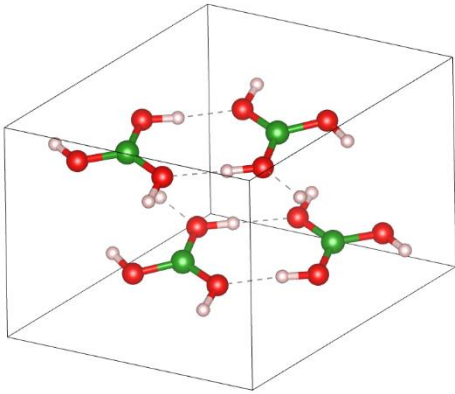
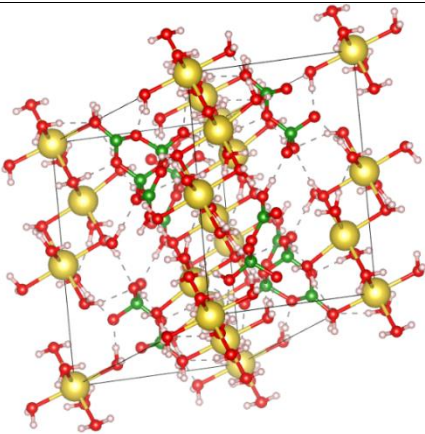
NaCl – KCl

Na K Cl		
		
Vzorec	NaCl	KCl
Název	chlorid sodný	chlorid draselný
Triviální název	halit	sylvín
Vzdálenost mezi atomy	Na–Cl: 0,282005 nm	K–Cl: 0,314395 nm
Úhly mezi vazbami	Cl–Na–Cl: 90 °	Cl–K–Cl: 90 °
Koordinační číslo	Na: 6 Cl: 6	K: 6 Cl: 6
Krystalická soustava	kubická	kubická
Bod symetrie	1	1
Osa symetrie	3x čtyřčetná 4x trojčetná 6x dvojčetná	3x čtyřčetná 4x trojčetná 6x dvojčetná
Rovina symetrie	9	9
Porovnání	Krystaly jsou téměř totožné s pevně danými úhly striktně odpovídajícími dané krystalické soustavě. Jediný rozdíl je délka vazby, která je zřejmě způsobená rozdílným atomovým poloměrem sodíku (186 pm) a draslíku (227 pm).	

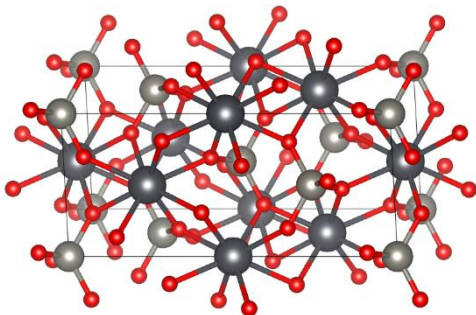
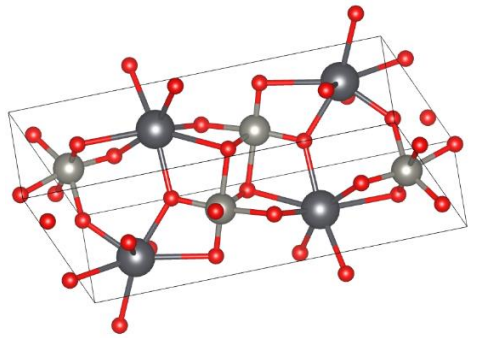
NaNO₃ – KNO₃

Na N O K		
		
Vzorec	NaNO ₃	KNO ₃
Název	dusičnan sodný	dusičnan draselný
Triviálny názov	chilský ledek	draselný ledek
Vzdálenosť medzi atómami	Na–O: 0,240379 nm N–O: 0,124215 nm	K–O: 0,291397 nm, (0,286981 nm) N–O: 0,127299 nm K–K: 0,54
Úhly medzi väzbami	O–Na–O: 90 ° O–N–O: 120 ° Na–O–Na: 114,94 ° N–O–Na: 112,54 °	O–N–O: 120 ° K–O–K: 99,024 ° N–O–K: 144,11 °
Koordináčny číslo	Na: 6 NO ₃ : 6	K: 9 NO ₃ : 6
Krystalická sústava	klencová	kosočtverečná
Bod symetrie	1	1
Osa symetrie	3x dvojčetná 1x trojčetná	3x dvojčetná
Rovina symetrie	3	3
Porovnaní	Na rozdiel od chloridů, krystalizujú dusičnany sodné a draselné navzájom v jiných sústavách, a teda se jejich krystaly liší.	

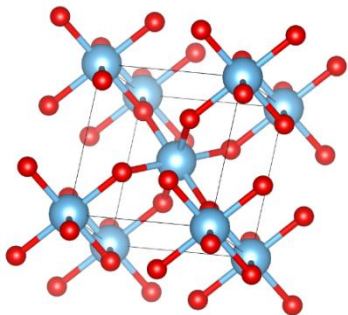
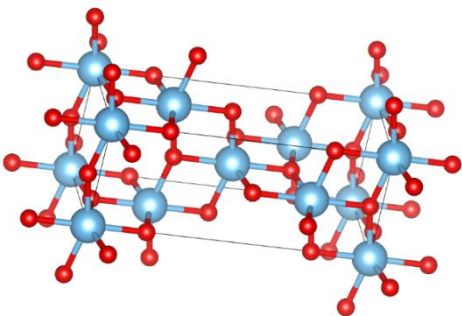
kyselina boritá – borax

H B O Na		
		
Vzorec	H_3BO_3	$\text{Na}_2[\text{B}_4\text{O}_5(\text{OH})_4] \cdot 8\text{H}_2\text{O}$
Název	kyselina trihydrogenboritá	oktahydrát tetraoxotetraboritanu sodného
Triviální název	sassolin	borax
Vzdálenost mezi atomy	$\text{B}-\text{O}$: 0,13694 nm $\text{O}-\text{H}$: 0,0964 nm	$\text{Na}-\text{O}$: 0,2417 nm $\text{B}-\text{O}$: 0,1425 nm $\text{O}-\text{H}$: 0,0965 nm
Úhly mezi vazbami	$\text{B}-\text{O}-\text{H}$: 113 ° $\text{O}-\text{B}-\text{O}$: 120 °	$\text{O}-\text{Na}-\text{O}$: 90 ° $\text{O}-\text{B}-\text{O}$: 109 ° $\text{H}-\text{O}-\text{H}$: 106 ° $\text{B}-\text{O}-\text{H}$: 112 °
Koordinační číslo	OH : 1 B : 3	Na : 6 O : 2-4 H : 1 B : 3-4
Krystalická soustava	trojklonná	jednoklonná
Bod symetrie	1	1
Osa symetrie	-	1x dvojitá
Rovina symetrie	-	1
Porovnání	Krystaly potvrzují rozmanitost sloučenin boru. Krystaly kyseliny borité jsou složeny z jednotlivých molekul $\text{B}(\text{OH})_3$, které jsou navzájem propojeny vodíkovými můstky a tvoří jednotlivé vrstvy krystalu. Struktura boraxu je již poměrně složitější s mnoha vodíkovými můstky.	

stolzit – raspit

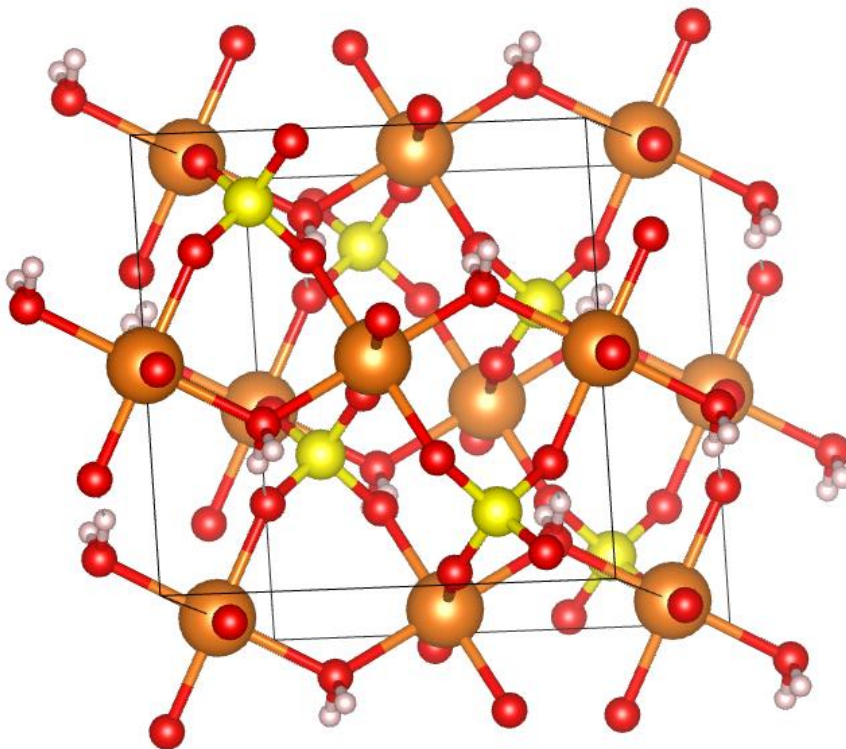
Pb W O		
		
Vzorec	PbWO ₄	PbWO ₄
Název	wolframan olovnatý	wolframan olovnatý
Triviální název	stolzit	raspit
Vzdálenost mezi atomy	O–W: 0,178007 nm Pb–O: 0,2599 nm	Pb–O: velmi rozdílné (0,2314-0,2864 nm) W–O: velmi rozdílné (0,1746-0,2173 nm)
Úhly mezi vazbami	O–W–O: 103,202 ° (O–W–O: 122,9035 °) W–O–Pb: 135,7465 ° (W–O–Pb: 121,502 °) Pb–O–Pb: 102,701 °	O–Pb–O: velmi rozdílné O–W–O: velmi rozdílné W–O–Pb: velmi rozdílné
Koordinační číslo	WO ₄ : 8 Pb: 8	WO ₄ : 8 Pb: 7
Krystalická soustava	čtverečná	jednoklonná
Bod symetrie	1	1
Osa symetrie	1x čtyřčetná	1x dvojčetná
Rovina symetrie	1	1
Porovnání	Oba krystaly se se svými parametry vychylují od přesně daných parametrů krystalických soustav. U raspitu nebylo možné zobecnit úhly vazeb, neboť byly velmi rozdílné.	

rutil – anatas

Ti O		
	TiO₂	
Vzorec	TiO₂	TiO₂
Název	oxid titaničitý	oxid titaničitý
Triviální název	rutil	anatas
Vzdálenost mezi atomy	Ti–O: 0,194-0,0198 nm	Ti–O: 0,194 nm
Úhly mezi vazbami	O–Ti–O: 81,07-98,03 ° Ti–O–Ti: 98,894 ° (Ti–O–Ti: 130,553 °)	Ti–O–Ti: 101,908 ° (Ti–O–Ti: 156,184 °) O Ti–O–Ti: 101,908 ° (O Ti–O–Ti: 78,09 °) (O Ti–O–Ti: 92,44 °)
Koordinační číslo	Ti: 6 O: 3	Ti: 6 O: 3
Krystalická soustava	čtverečná	čtverečná
Bod symetrie	1	1
Osa symetrie	4x dvojčetná 1x čtyřčetná	4x dvojčetná 1x čtyřčetná
Rovina symetrie	5	5
Porovnání:	I přes stejnou krystalickou soustavu se uvedené krystaly oxidu titaničitého liší. Anatas má svým uspořádáním více protažené krystaly, čímž se odlišuje nejen od rutilu, ale i od většiny krystalů čtverečné soustavy.	

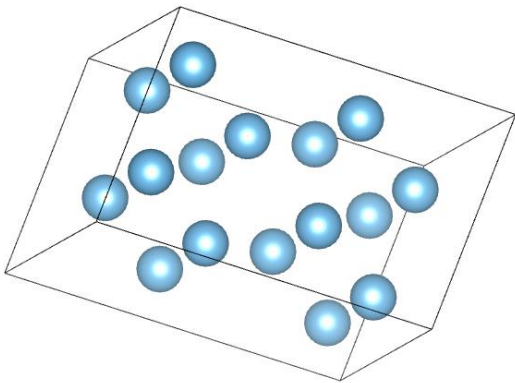
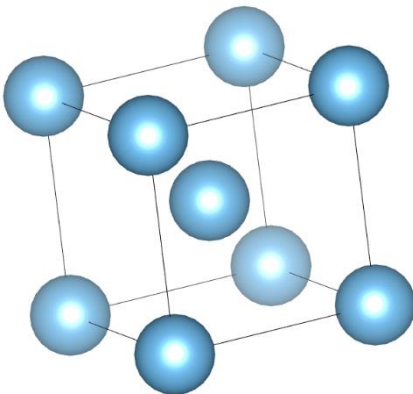
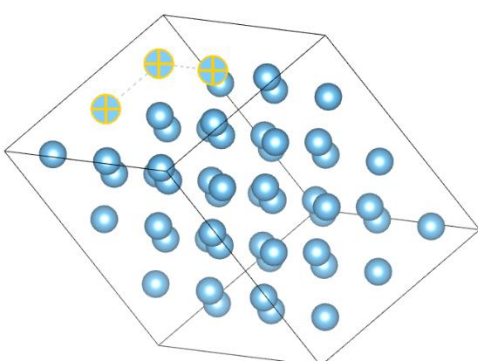
kieserite

Mg
S
O
H



Vzorec	$\text{MgSO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$
Název	hydrát síranu hořečnatého
Triviální název	kieserite
Vzdálenost mezi atomy	Mg–O: 0,2022-0,2177 nm S–O: 0,1466 nm H–O: 0,9377 nm
Úhly mezi vazbami	O–Mg–O: 86,079-93,921 °
Koordinální číslo	Mg: 6 SO ₄ : 4 O: 2-4 H: 1
Krystalická soustava	jednoklonná
Bod symetrie	1
Osa symetrie	1x dvojčetná
Rovina symetrie	1

titan

Ti		
Název	titan (α)	titan (β)
Vzdálenost mezi atomy	0,289663 nm	strana krychle: 0,33065 nm polovina úhlopříčky: 0,28635nm
Úhly mezi vazbami	120 ° (respektive 60 ° a 90 °) 	základní úhel: 90 °
Koordinační číslo	12	8
Krystalická soustava	hexagonální	kubická
Bod symetrie	1	1
Osa symetrie	6x dvojčetná 1x šesterečná	6x čtyřčetná
Rovina symetrie	7	3