

BIOKRYSALOGRAFIA MAKROMOLEKULARNA – ĆWICZENIE NR 6		
Temat ćwiczenia: Obliczenia krystalograficzne		
Wydział: Informatyka i telekomunikacja Kierunek: Bioinformatyka	Stopień: I	Sem.: V
Prowadzący ćwiczenie:	Data wykonania:	
Wykonujący ćwiczenie:		
Zwrot:	Zaliczenie:	Uwagi:

1. Cel ćwiczenia

teoretyczny – zapoznanie się z podstawowymi pojęciami i równaniami stosowanymi w krystalografii makromolekularnej

praktyczny – rozwiązanie typowych zadań obliczeniowych z obszaru krystalografii

2. Zagadnienia teoretyczne

rodzaje kryształów; typy oddziaływań międzycząsteczkowych; proces krystalizacji; elektryczność; komórka elementarna; rodzaje układów krystalograficznych

3. Literatura

1. J. Dereń, J. Haber, R. Pampuch, Chemia ciała stałego, PWN 1975.
2. Z. Bojarski, M. Gigla, K. Stróż, M. Surowiec, Krystalografia, PWN 2014.

4. Wykonanie ćwiczenia

1. Zgodnie z zaleceniami Prowadzącego wykonać obliczenia.

5. Załączniki

1. Równanie na gęstość kryształu (1):

$$\rho = \frac{Z \cdot M}{V \cdot N_A} \quad (1)$$

ρ – gęstość kryształu

Z – liczba atomów w komórce elementarnej

M – masa atomowa

V – objętość komórki elementarnej

N_A – stała Avogadra ($6,023 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$)

2. Skala elektryczności wg Görlicha (rys. 1) oraz równanie (2):

$$\%I = \frac{X_{2G} - X_{1G}}{X_{2G}} \cdot 100\%, \text{ gdzie } X_{2G} > X_{1G} \quad (2)$$

 X_{1G} – miara elektryczności pierwszego pierwiastka

X_{2G} – miara elektroujemności drugiego pierwiastka

	+1	+2	+3	+4	+5	+6	+7
H	1.00						
He							
Li	0.63						
Be	0.83	1.16					
B	0.78	1.36	1.67				
C	0.91	1.34	1.88	2.18			
N	1.03	1.48	1.87	2.39	2.68		
O	1.00	1.61	2.01	2.39	2.89	3.19	
F	1.13	1.60	2.15	2.53	2.90	3.40	3.69
Ne							
Na	0.61						
Mg	0.75	1.05					
Al	0.66	1.18	1.45				
Si	0.77	1.10	1.57	1.82			
P	0.88	1.21	1.49	1.95	2.19		
S	0.87	1.31	1.60	1.86	2.31	2.54	
Cl	0.98	1.32	1.71	1.98	2.23	2.67	2.90
Ar							
K	0.56						
Ca	0.67	0.93					
Sc	0.69	0.97	1.35				
Ti	0.71	1.00	1.42	1.78			
V	0.70	1.04	1.47	1.85	2.19		
Cr	0.71	1.10	1.51	1.90	2.26	2.58	
Mn	0.74	1.07	1.57	1.94	2.31	2.65	2.96
Fe	0.76	1.09	1.50	2.01	2.35	2.70	3.03
Co	0.76	1.12	1.57	1.94	2.42	2.74	3.08
Ni	0.75	1.16	1.61	2.01	2.37	2.82	3.13
Cu	0.75	1.22	1.65	2.05	2.42	2.75	3.20
Zn	0.83	1.15	1.71	2.09	2.46	2.82	3.14
Ga	0.66	1.23	1.50	2.17			
Ge	0.76	1.08	1.59	1.83	2.62		
As	0.85	1.17	1.44	1.92	2.15	3.06	
Se	0.85	1.25	1.51	1.78	2.24	2.45	3.38
Br	0.93	1.27	1.63	1.87	2.10	2.55	2.75
Kr							

	+1	+2	+3	+4	+5	+6	+7
Rb	0.55						
Sr	0.65	0.90					
Y	0.68	0.95	1.23				
Zr	0.70	0.98	1.30	1.59			
Nb	0.71	1.03	1.36	1.68	1.93		
Mo	0.72	1.09	1.41	1.85	2.00	2.25	
Tc	0.73	1.06	1.47				
Ru	0.74	1.11	1.45				
Rh	0.74	1.15	1.51				
Pd	0.78	1.20	1.56				
Ag	0.75	1.26	1.60				
Cd	0.81	1.12	1.66				
In	0.65	1.18	1.44	1.99			
Sn	0.73	1.04	1.50	1.73	2.31		
Sb	0.80	1.10	1.36	1.80	2.03	2.82	
Te	0.81	1.17	1.43	1.66	2.08	2.28	3.17
I	0.88	1.19	1.56				
Xe							
Cs	0.54						
Ba	0.62	0.86					
La	0.64	0.90	1.19				
Hf	0.71	1.05	1.31	1.57			
Ta	0.75						
W	0.76						
Re	0.76						
Os	0.79						
Ir	0.81						
Pt	0.81	1.17					
Au	0.82	1.23					
Hg	0.88	1.17	1.59				
Tl	0.67	1.23	1.48				
Pb	0.74	1.05	1.53	1.76	2.25		
Bi	0.73	1.11	1.37	1.83	2.03	2.55	
Po	0.79						
At							
Rn							

Rys. 1. Elektryczność wg Görlicha

3. Skala elektroujemności wg Paulinga (rys. 2) oraz równanie (3):

$$\Delta E = E_2 - E_1, \text{ gdzie } E_2 > E_1 \quad (3)$$

[illegible]

Rys. 2. Elektryczność wg Paulinga