

BIOKRYSTALOGRAFIA MAKROMOLEKULARNA - ĆWICZENIE NR 4		
Temat ćwiczenia: Podstawy modelowania struktur krystalicznych		
Wydział: Informatyka i telekomunikacja Kierunek: Bioinformatyka	Stopień: I	Sem.: V
Prowadzący ćwiczenie:	Data wykonania:	
Wykonujący ćwiczenie:		
Zwrot:	Zaliczenie:	Uwagi:

1. Cel ćwiczenia

teoretyczny – poznanie zagadnień dotyczących struktur przestrzennych kryształów, metody określania struktury przestrzennej oraz właściwości ciał stałych

praktyczny – zapoznanie się ze sposobami określania i modelowania przestrzennego struktur krystalicznych

2. Zagadnienia teoretyczne

ciała stałe – definicje i podziały; ciała krystaliczne, monokryształy, polikryształy; rodzaje wiązań chemicznych; elektrojemność; komórka elementarna; typy sieci Bravaisego; płaszczyzny symetrii

3. Literatura

1. J. Dereń, J. Haber, R. Pampuch, Chemia ciała stałego, PWN 1975.

4. Wykonanie ćwiczenia

1. Zgodnie z zaleceniami Prowadzącego wykonać obliczenia.
2. Korzystając z dostarczonych danych zaprojektować strukturę wybranego związku krystalicznego w programie Vesta.

5. Zasady bezpieczeństwa

Wszystkie przewidziane w ćwiczeniu badania i pomiary wykonywać zgodnie z poleceniami oraz pod nadzorem prowadzącego.

6. Załącznik

Wykorzystać skalę elektroujemności wg Görlicha oraz poniżej podany wzór (1):

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

X_{1G} - miara elektroujemności 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							
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							

Elektroujemność wg Görlicha