

Plan ćwiczeń laboratoryjnych z *Krystalochemii*

Zajęcia odbywają się we wtorki, w godz. 14–17 (lub krócej), w sali 17 (bud. B) lub w sali 12B (Zakład Krystalografii)

	Tematyka zajęć	Długość i termin zajęć. Sala (jeśli nie 17)
LAB 1	<b>Krystalograficzna baza danych związków organicznych: Cambridge Structural Database (CSD).</b> Wyszukiwanie struktur, analiza geometryczna pojedynczych struktur, analiza statystyczna wybranych parametrów geometrycznych (długości wiązań, kątów walencyjnych, kątów torsyjnych, oddziaływań międzycząsteczkowych i innych) w grupach struktur, wykonywanie rysunków pojedynczych cząsteczek oraz ich upakowania w kryształach. Stosowane programy: ConQuest i Mercury z pakietu CSD.	2 h gr. 1 – 21 IV godz. 14-15:30 gr. 2 – 21 IV godz. 15:30-17
LAB 2	<b>CSD – cd.</b> UWAGA: W trakcie ćwiczeń należy przygotować tabelę zawierającą wybrane parametry geometryczne (długości wiązań, kąty walencyjne i torsyjne) dla wybranej struktury. Dane te będą pomocne podczas budowania modelu (LAB 3) i powinny być dołączone do sprawozdania. Zaliczenie: opis poniżej.	4 h gr. 1 – 28 IV gr. 2 – 5 V
LAB 3	<b>Modelowanie struktury związków chemicznych.</b> Budowa modeli przestrzennych cząsteczek związków organicznych tematycznie związanych z poprzednimi ćwiczeniami (LAB 1 i LAB 2). Zaliczenie na podstawie oceny poprawności zbudowanego modelu, ze szczególnym uwzględnieniem konformacji i stereochemii układu.	5 h (2.5 h + 2.5 h)
LAB 4	<b>Morfologia, pokrój i symetria zewnętrzna kryształów.</b> Opis pokroju i morfologii kryształów, wyznaczanie elementów symetrii kryształów obserwowanych pod mikroskopem stereoskopowym. Zaliczenie na podstawie oceny poprawności opisu symetrii zewnętrznej badanych kryształów.	gr. 1 – 12 V gr. 2 – 19 V s. 12B
LAB 5	<b>Krystalograficzna baza danych związków nieorganicznych: Inorganic Crystal Structure Database (ICSD).</b> Wyszukiwanie struktur, analiza geometryczna poliedrów koordynacyjnych, analiza wpływu różnych czynników na otoczenie koordynacyjne wybranych metali, analiza porównawcza (tego samego metalu w różnym otoczeniu chemicznym, w grupie metali). Stosowane programy: Mercury, Shape, ConQuest. Zaliczenie: opis poniżej.	4 h gr. 1 – 26 V gr. 2 – 2 VI

Literatura:

**LAB 5:** Instrukcja „Nieorganiczna baza danych (ICSD). Podstawowa instrukcja obsługi”. Dostęp z internetu na stronie www Wydziału Chemii Uniwersytetu Wrocławskiego (<https://chem.uni.wroc.pl/pl/jednostka-organizacyjna/111>); Program SHAPE – User’s Manual, M. Llunell, D. Casanova, J. Cirera, P. Alemany, S. Alvarez, Universitat de Barcelona . Dostęp z internetu, [http://www.ee.ub.edu/index.php?option=com\\_jdownloads&Itemid=529&view=finish&cid=12&catid=3&m=0](http://www.ee.ub.edu/index.php?option=com_jdownloads&Itemid=529&view=finish&cid=12&catid=3&m=0)

## Zaliczanie sprawozdań (LAB 1, LAB 2, LAB 5)

Sprawozdania w postaci plików **nazwisko1\_nazwisko2.doc**, **nazwisko1\_nazwisko2.docx** lub **nazwisko1\_nazwisko2.pdf** proszę wysłać e-mailem na adres: [katarzyna.slepokura@chem.uni.wroc.pl](mailto:katarzyna.slepokura@chem.uni.wroc.pl) lub przynieść nagrane na podpisanej płycie CD do pok. 11 (Zakład Krystalografii, budynek B).

Każde sprawozdanie powinno zawierać:

- **Imiona i nazwiska** obu autorów, ich nr-y albumu, specjalność na studiach, **jeden** adres e-mail do korespondencji.
- **Nazwę zadania**. Jeżeli autorzy poczynili jakieś dodatkowe założenia, ograniczenia lub modyfikację tematu należy dokładnie je opisać i uzasadnić.
- **Wstęp chemiczny** opisujący grupę związków, charakterystyczne właściwości chemiczne i strukturalne badanego obiektu. Mogą być dodatkowe rysunki lub schematy jeśli ułatwią zrozumienie treści opisu.
- Precyzyjnie **opisany sposób wyszukiwania struktur** umożliwiający powtórzenie wykonanego zadania. W przypadku CSD, najlepiej graficznie przedstawić zadanie, tak jak w programie ConQuest.
- **Wyniki przeszukiwania bazy** (w tym liczba znalezionych struktur).
- **Wyniki analizy statystycznej** (dot. CSD) jak wykresy i histogramy, ponumerowane i jednoznacznie opisane.
- **LAB 1/2: Rysunki** (w formacie JPG wstawione do tekstu sprawozdania lub jako pojedyncze pliki) wykonane programem MERCURY dla dwóch różnych struktur, które z jakiegoś powodu, zdaniem autorów są ciekawe. Dla każdej struktury należy wykonać dwa rysunki: pojedynczej molekuly z opisem atomów oraz upakowania sieci krystalicznej (bez opisu atomów) z uwzględnieniem minimum czterech komórek sieciowych tzn. 1x2x2 (jedna stała sieciowa prostopadle do płaszczyzny rysunku oraz po dwie w płaszczyźnie rysunku w dwóch kierunkach). Dla każdej rysowanej struktury należy podać jej REFCODE. Rysunki mają być narysowane przejrzysto (minimalne nakładanie się atomów) aby dobrze ilustrowały cząsteczkę i upakowanie sieci.
- **LAB 5: Rysunki** (w formacie JPG wstawione do tekstu sprawozdania lub jako pojedyncze pliki) wykonane programem MERCURY, pokazujące otoczenie koordynacyjne wybranych jonów metali (z wybranych struktur).
- **Opisy rysunków i wykresów** w tekście sprawozdania **są konieczne**. Każdy rysunek i wykres musi mieć swój nr w podpisie i w tekście sprawozdania koło opisu uwzględniającego: jak został sporządzony, co odzwierciedla, jakie wnioski.
- **Wnioski**. Sprawozdanie musi posiadać część poświęconą wnioskowi (nie mylić ze streszczeniem) wynikającym z wykonania zadania.

Uwagi o ocenie sprawozdań:

- Sprawozdanie powinno poprawnie, precyzyjnie i wyczerpująco opisywać zagadnienie. Każdy zwrot sprawozdania celem dokonania uzupełnień, spowoduje obniżenie oceny o jeden stopień. Sprawozdania „bez poprawek” oddane w terminie **do tygodnia po zakończeniu zajęć** uzyskają ocenę **bdb**.
- Czas sprawdzenia sprawozdania będzie nie dłuższy niż jeden tydzień. Informacja o ocenie sprawozdania lub potrzebie dokonania poprawek w sprawozdaniu będzie przesyłana *on-line* na adres e-mailowy podany w sprawozdaniu. Po trzech zwrotach sprawozdania możliwa będzie jedna próba zaliczenia ustnego.