

Ειδικά Θέματα Δομικής Βιολογίας
Εργασία Κρυσταλλογραφίας

Ονοματεπώνυμο :

Αριθμ. Μητρώου :

Ένας υποθετικός μονοδιάστατος κρύσταλλος συμμετρίας rpt έχει διάσταση στοιχειώδους χυψελίδας ίση με 10 Angstrom και περιέχει το ισοδύναμο δύο ατόμων υδραργύρου και τεσσάρων ατόμων οξυγόνου (ανά στοιχειώδη χυψελίδα). Από αυτόν τον κρύσταλλο μετρήθηκαν τα εξής δεδομένα :

h	$ \vec{F} $
1	57.1
2	17.7
3	18.6
4	45.9
5	43.7
6	38.5
7	8.4
8	9.8
9	11.5
10	10.8
11	5.2
12	2.0

Ερώτηση 1η : Ποιες είναι οι κλασματικές συντεταγμένες των ατόμων του υδραργύρου ; Ποιες είναι οι αποστάσεις (σε Angstrom) μεταξύ διαδοχικών (στη δομή) ατόμων υδραργύρου ;

Ερώτηση 2η : Η δήλωση “οι φάσεις των παραγόντων δομής ουσιαστικά καθορίζονται από τα άτομα του υδραργύρου” είναι σωστή ή λάθος και γιατί ;

Οι τιμές του ατομικού παράγοντα σκέδασης του υδραργύρου για τις γωνίες σκέδασης (περίθλασης) που αντιστοιχούν σε κάθε h είναι :

h	f_{Hg}
1	78.4
2	73.8
3	66.8
4	58.1
5	48.5
6	38.9
7	30.0
8	22.2
9	15.8
10	10.8
11	7.1
12	4.5

Ερώτηση 3η : Με δεδομένες τις συντεταγμένες του ατόμου του υδραργύρου, υπολογίστε το πλάτος και τη φάση των παραγόντων δομής που θα προέκυπταν εάν η δομή αποτελούνταν μόνο από τα άτομα του υδραργύρου (εάν δηλαδή τα οξυγόνα απουσίαζαν).

Ερώτηση 4η : Ποιά είναι η δομή ;

Δηλαδή : Ποιες είναι οι συντεταγμένες [κλασματικές και απόλυτες (σε Angstrom)] όλων των ατόμων της στοιχειώδους κυψελίδας ;

Βαθμολογία ασκησης :

Ερώτηση	Βαθμολογία
1η	3
2η	2
3η	3
4η	2

Οι εργασίες σας θα πρέπει να παραδοθούν στον διδάσκοντα (προσωπικά, ονομαστικά και με απουσία) μεχρι το τέλος του εξαμήνου (δηλαδή μέχρι και την Τρίτη 31 Μαΐου).

NMG