



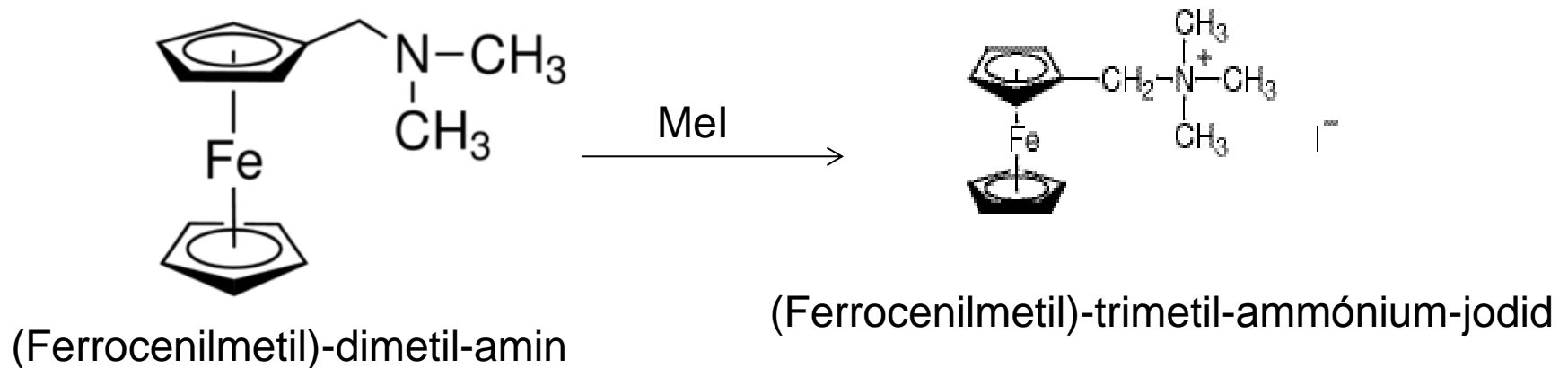
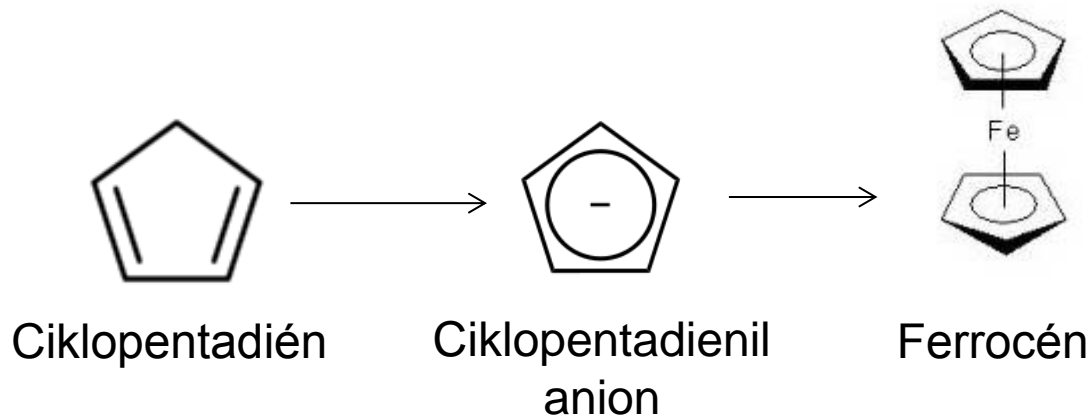
Tervezzünk és építsünk kristályokat!

Fekete Krisztián, Szent István Gimnázium,
Kalocsa

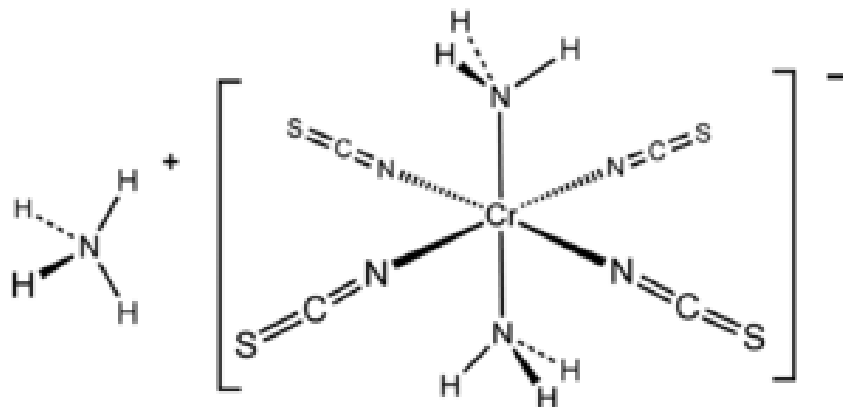
Keserű György, Baár-Madas Református
Gimnázium, Budapest

01/07/2013

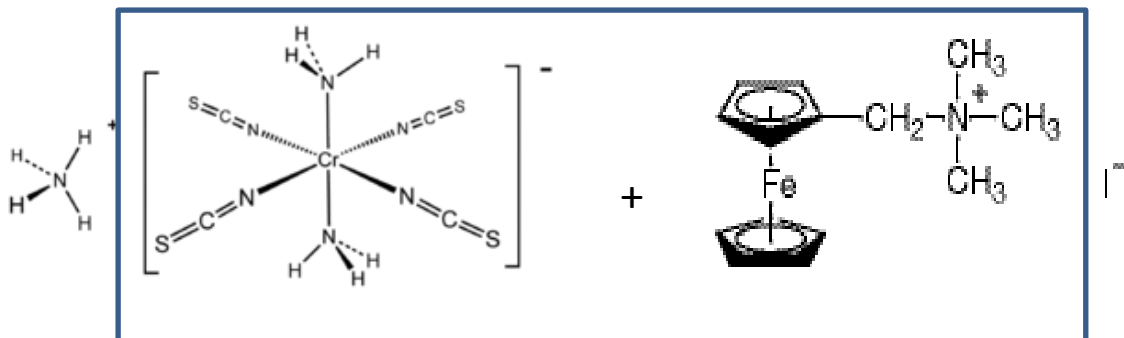
Kiindulási anyagok: A, Ferrocén származék



B, Ammónium-reineckát



Nem-kovalens szintézis:

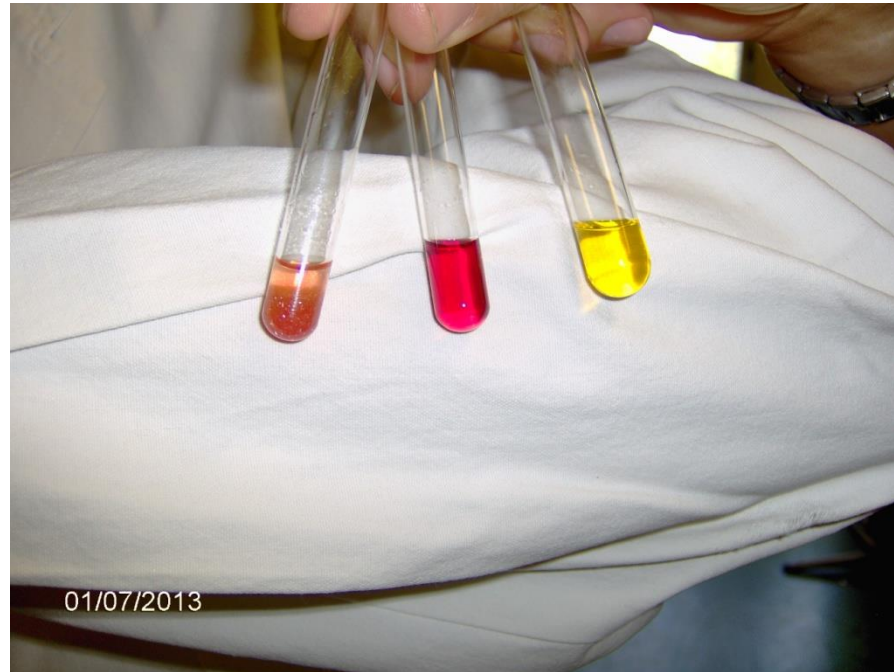
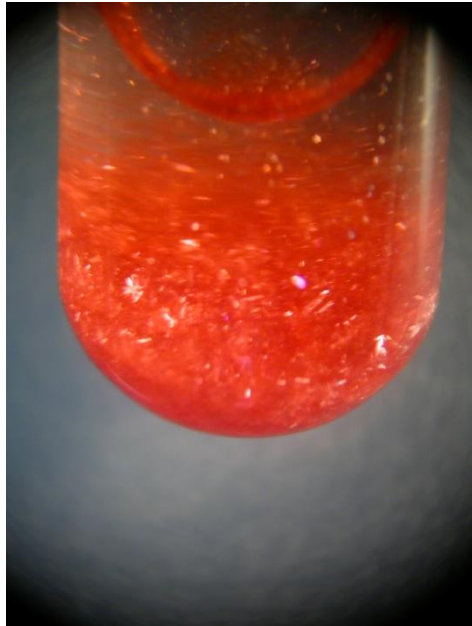


Oldhatósági próbák

Ferrocénium só			Ammónium-reineckát		
Jól oldja:	Alig oldja:	Nem oldja:	Jól oldja:	Alig oldja:	Nem oldja:
DMF	Etanol	Hexán	Víz	Aceton	Hexán
Metanol	THF	Víz	DMF	Kloroform	
Kloroform			Metanol	THF	
Aceton			Etanol		

A sóképzés

- Az új só oldhatósága eltér az eredetiektől → új oldószer keresése



Kristálynövesztési technikák

- Kontrollált sebességű párologtatás: forráspont!
- Gőzdiffúziós kísérlet
- Melegítés-hűtés
- Oltókristállyal
- Szeparációs technikával

Túltelítés!

Oldószerek: aceton, DMF, THF, ketonok stb.

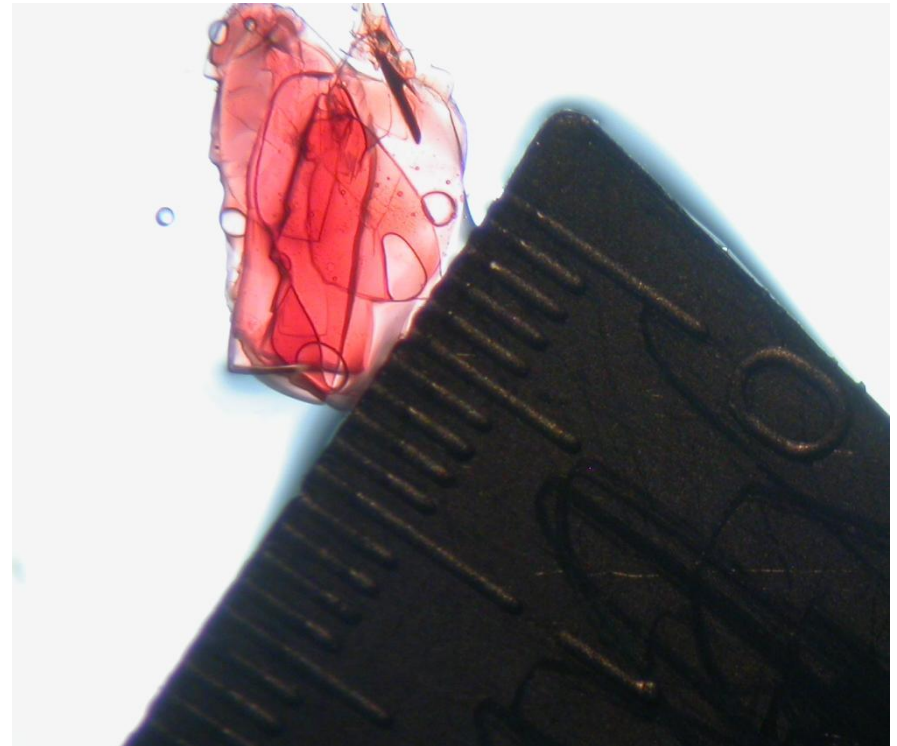
Kicsapószer: dietil-éter, metanol

A kristályosítás



- Párolgásos (acetonnal)
- Heptanon - acetonos kicsapás (Dietil-éterrel)

A megfelelő kristály kiválasztása

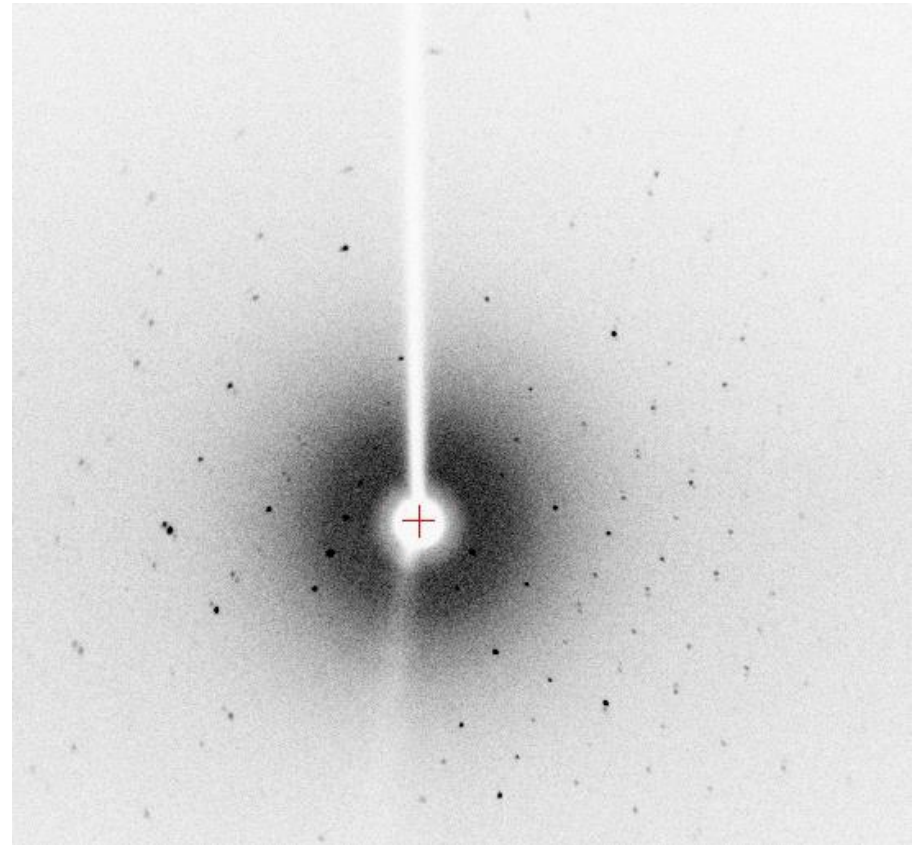
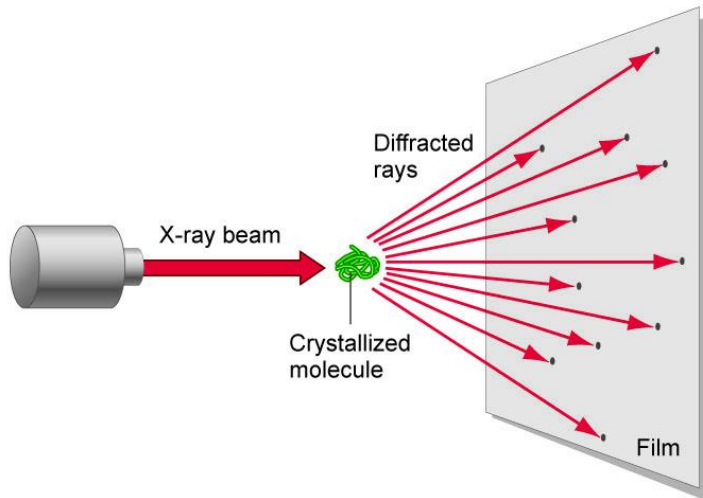


Röntgendiffrakció

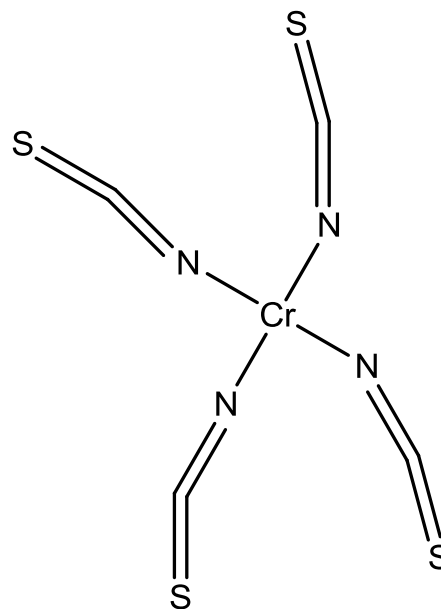
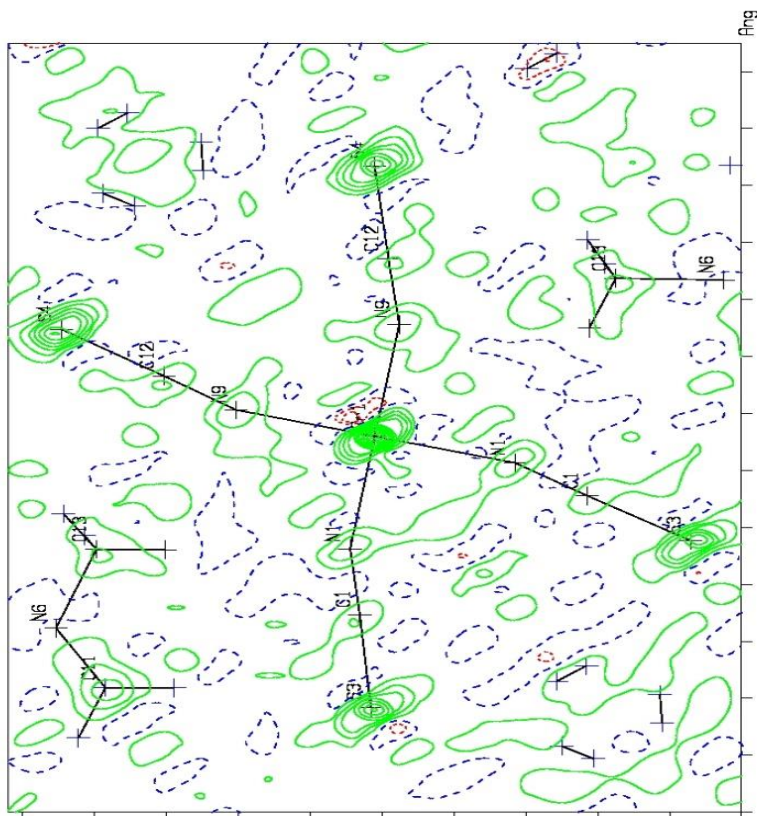
Kristáyméret: $0,3 \times 0,15 \times 0,03$ mm



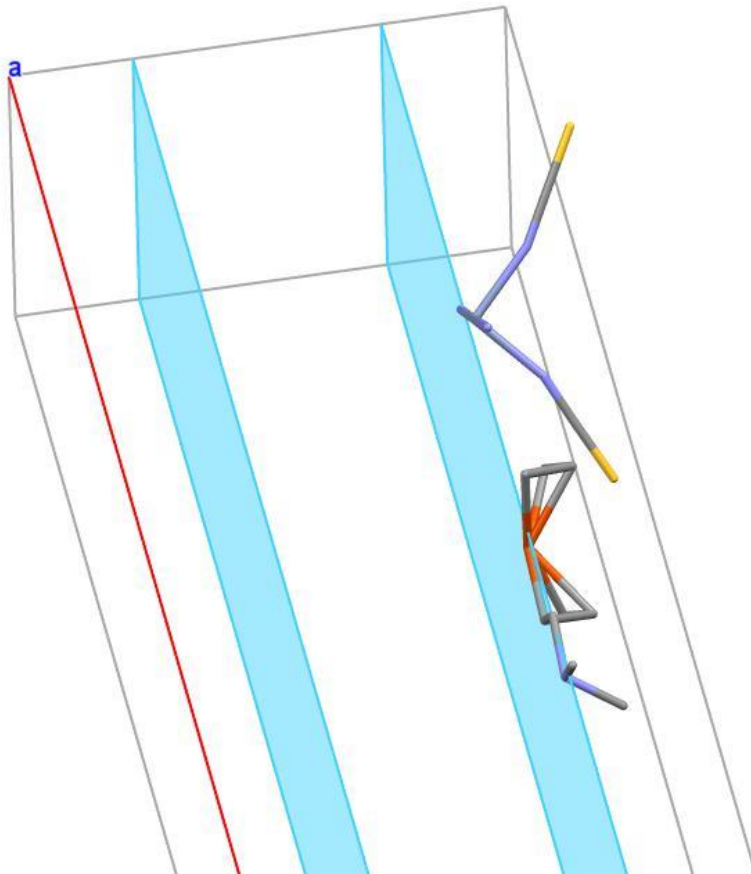
- Szórési kép (reflexió)
- Hurok (loop)
- Interferencia
- Intenzitás!



Elektronsűrűségi térkép



A szerkezeti kép



Aszimmetrikus egység

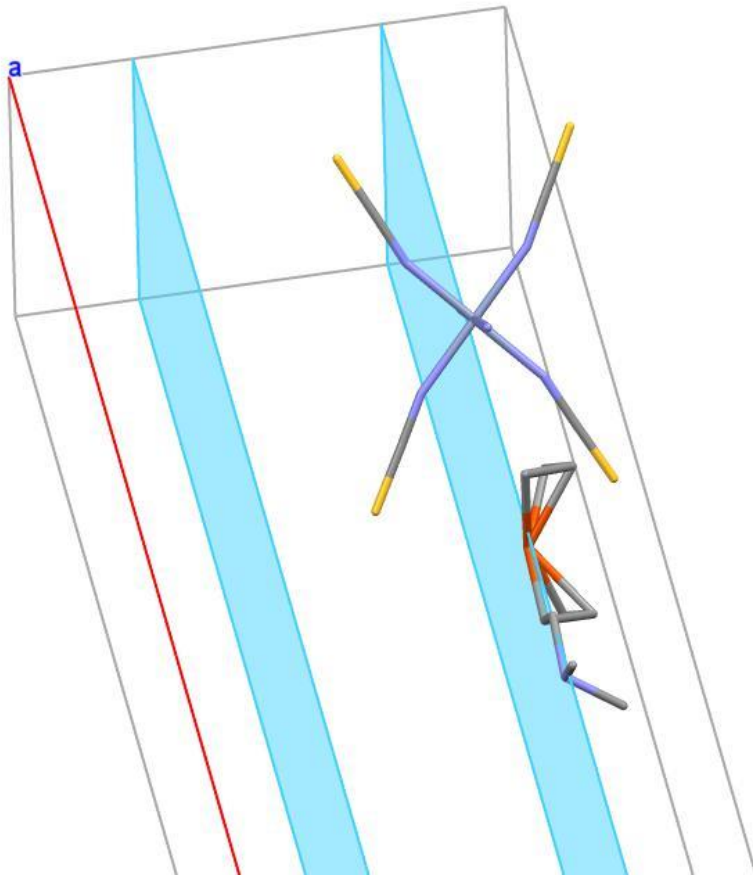
↓
Szimmetria
műveletek

Elemi cella

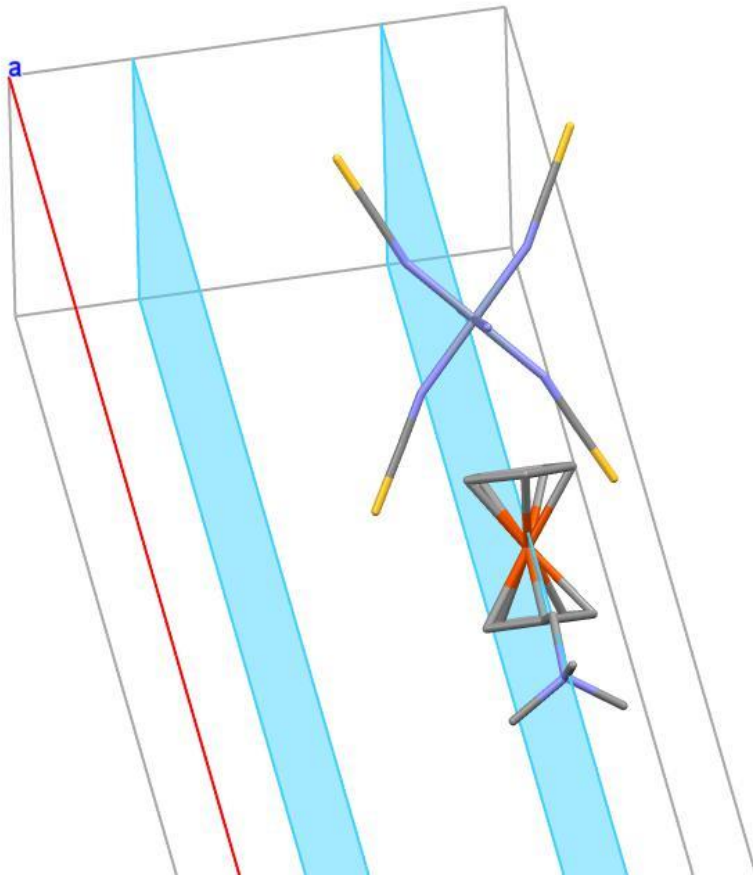
↓
Eltolás

Kristály

A szerkezeti kép



A szerkezeti kép



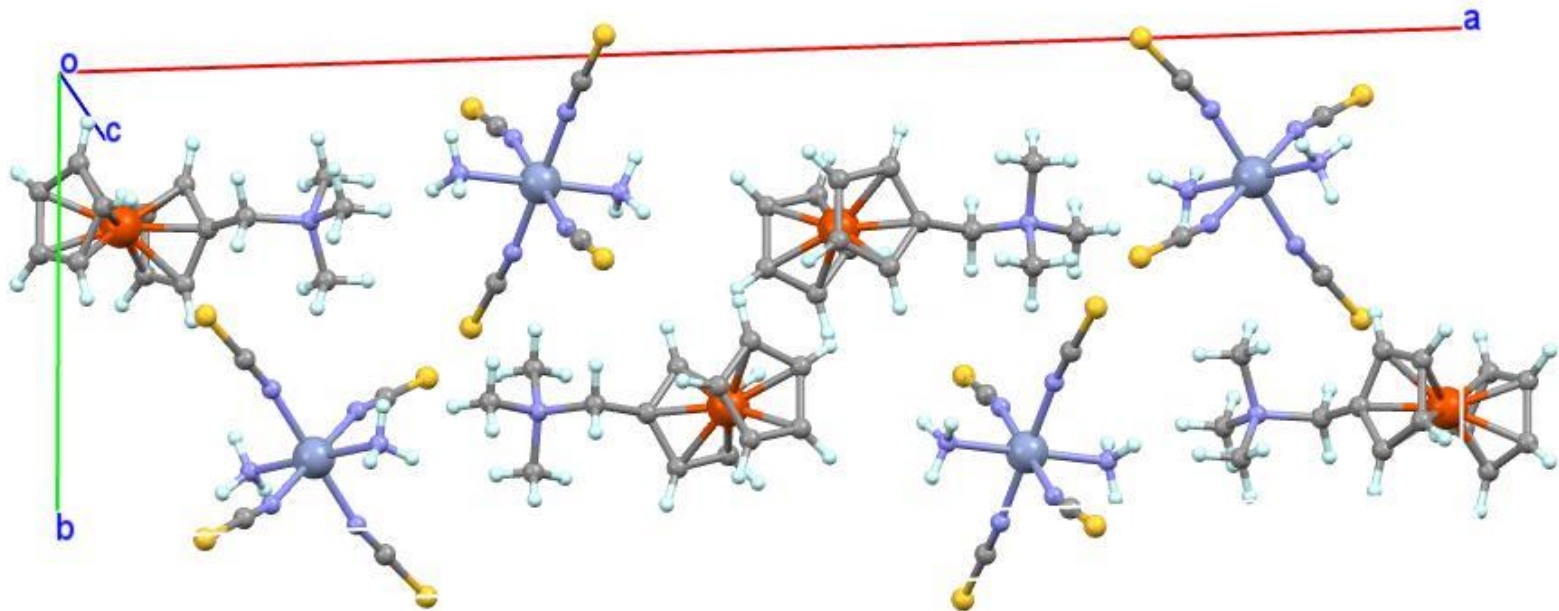
Az elemi cella

a: 33.0026 Å

$\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$

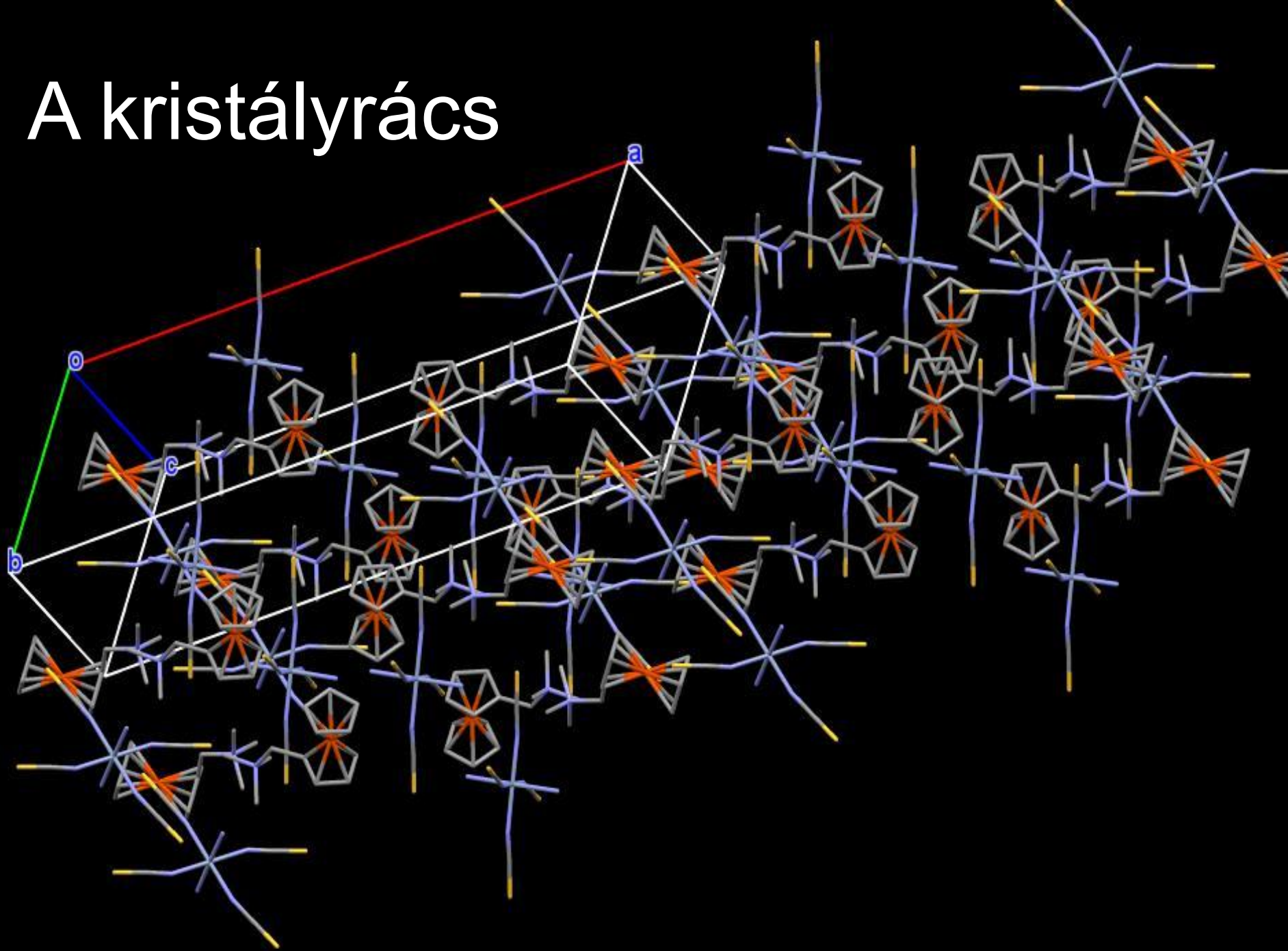
b: 11.1152 Å

c: 7.0047 Å

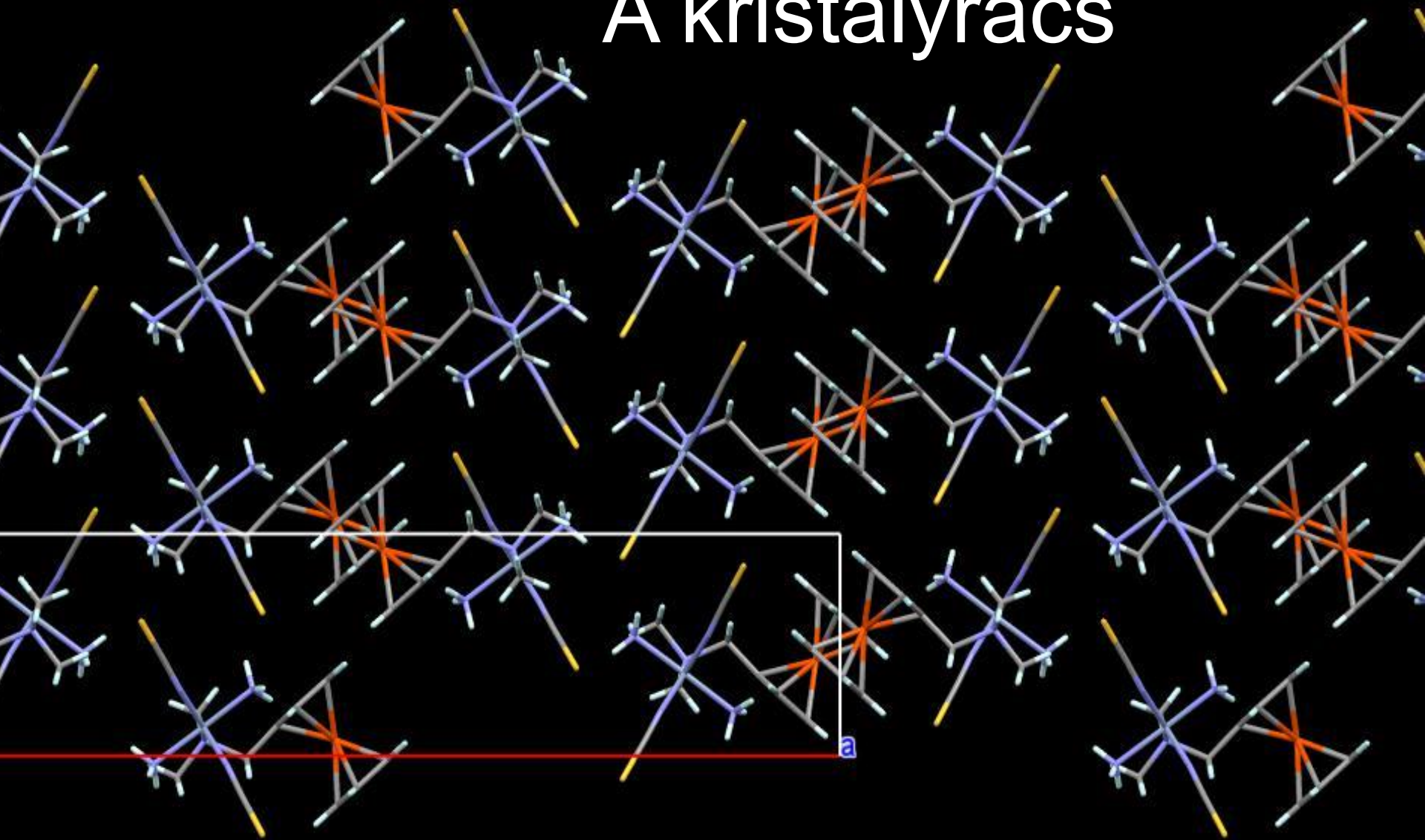


1 Å = 10^{-10} m

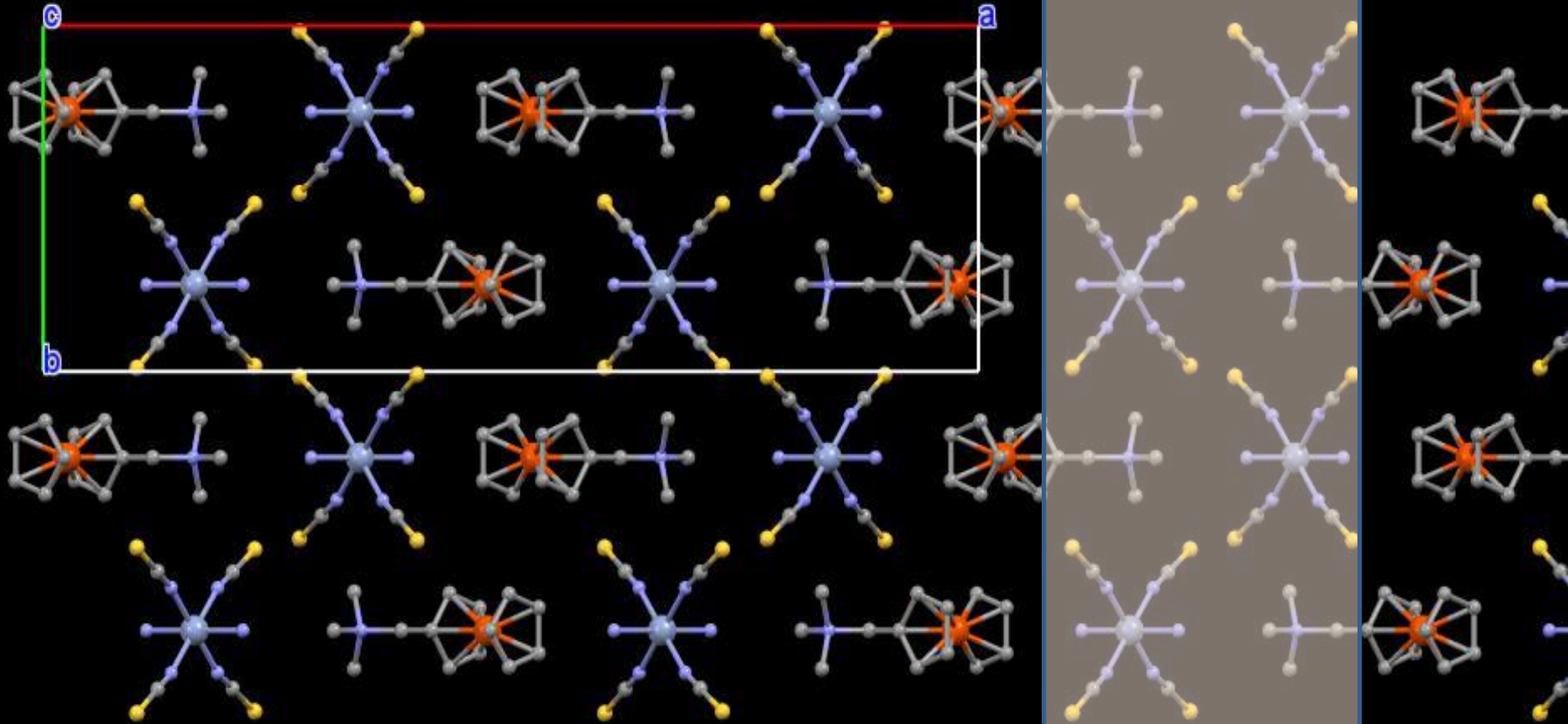
A kristályrács



A kristályrács



A kristályrács



Poláros réteg

Köszönetnyilvánítás

Holczbauer Tamás

Kudar Veronika

Tóth Viola

Lendvayné Győrik Gabriella (Gabi néni) 😊

Bombicz Petra

MTA Természettudományi Kutatóközpont



**Köszönjük a
figyelmet!**

01/07/2013