

ЮГОРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
Институт геологии, нефти и газа
Кафедра химии

М.К. Котванова

КРИСТАЛЛОХИМИЯ

Учебное пособие

Ханты-Мансийск
2008

ББК 24.1
УДК 548.3
К 73

Рецензент:

зав. кафедрой неорганической химии
Алтайского государственного университета,
доктор химических наук, профессор В.А. Новоженев

Котванова, Маргарита Кондратьевна

К 73 Кристаллохимия: Учебное пособие / М.К. Котванова. –
Ханты-Мансийск: РИЦ ЮГУ, 2008. – 116 с.

Учебное пособие содержит программу курса, индивидуальные задания по разделам «Симметрия молекул и кристаллов» и «Симметрия кристаллических структур», примерные вопросы к коллоквиуму по систематической кристаллохимии, иллюстрационный материал к лекциям и некоторые справочные данные. Пособие предназначено для студентов 2-го курса, обучающихся по специальности 020101 – Химия.

ББК 24.1
УДК 548.3

© Югорский государственный университет, 2008
© Котванова М.К., 2008

СОДЕРЖАНИЕ

Введение	4
Программа курса	5
Симметрия молекул и кристаллов	8
Симметрия кристаллических структур	34
Систематическая кристаллохимия	64
Описание некоторых кристаллических структур.....	66
Таблицы кристаллохимических радиусов.....	89
Иллюстрации к курсу лекций	92
Библиографический список	114

ВВЕДЕНИЕ

Кристаллохимия – важнейший раздел химии, наука о кристаллических структурах, базирующаяся главным образом на данных рентгеноструктурного анализа, а также нейтронографии и электронографии.

Кристалл – физическое тело, имеющее строгую трехмерную периодичность внутреннего строения. Разнообразные кристаллы с их специфическими свойствами в настоящее время широко используются в науке и технике. Реализация потребности промышленности в новых кристаллических полупроводниках, сверхпроводниках, лазерах, пьезо- и сегнетоэлектриках напрямую связана с более глубоким пониманием зависимости физических и химических свойств кристаллов от их состава и строения. Именно эти вопросы и являются основным содержанием кристаллохимии.

Современный рентгеноструктурный анализ и другие дифракционные методы – основной источник достоверной количественной информации о строении химических веществ (от простейших структур металлов и ионных бинарных соединений до сложных структур биополимеров и комплексов с полидентатными лигандами). Обработка этой информации, систематизация структурного материала, выявление и интерпретация закономерностей, присущих строению кристаллических веществ, установление зависимости физических и химических свойств от структуры – таковы основные задачи кристаллохимии.

Кристаллохимия самым тесным образом связана с кристаллографией, изучающей, в основном, внешнюю форму кристалла; физикой твердого тела; геологией; минералогией; материаловедением. Подчеркнем, что при получении и исследовании новых материалов кристаллохимические знания и представления выходят на передний план.

Важно иметь в виду, что успешное овладение кристаллохимическими знаниями требует наглядного представления, визуализации структур с помощью шарико-проволочных моделей, а также подвижных изображений на мониторе компьютера. Работа с этими моделями, как правило, плодотворно сказывается на процессе обучения.

тензорами второго ранга (электропроводность, диэлектрическая проницаемость, тепловое расширение и др.). Пиро- и пьезоэлектрические свойства.

Симметрия кристаллических структур

Открытые элементы симметрии кристаллических структур. Винтовые оси. Плоскости скользящего отражения. Оптические свойства кристаллов. Энантиоморфизм. Типы решеток (решетки Бравэ). Взаимодействие закрытых и открытых элементов симметрии между собой и с перпендикулярными трансляциями. Пространственные группы. Принцип их вывода. Системы эквивалентных позиций в пространственных группах.

Основы рентгеноструктурного анализа

Дифракция рентгеновских лучей. Уравнения Лауэ. Уравнение Вульфа-Брэгга. Индексы узловых сеток. Межплоскостные расстояния. Метод порошка в рентгенографии. Рентгенофазовый анализ. Интенсивность дифракционного луча. Структурная амплитуда. Формула электронной плотности. Рентгеноструктурный анализ.

Общая кристаллохимия

Типы химической связи в структурах. Гомо- и гетеродесмические структуры. Координационные, островные, цепочечные, слоистые, каркасные структуры. Число формульных единиц и рентгеновская плотность. Координационные числа и координационные полиэдры. Структурные типы. Описание структур в терминах плотнейших шаровых упаковок (ПШУ) и плотных шаровых кладок (ПШК). Пустоты в ПШУ и ПШК. Слоистость ПШУ. Кристаллохимические радиусы. Металлические и ионные радиусы. Коэффициент плотности упаковки металлических и ионных структур. Ковалентные и ван-дер-ваальсовы радиусы. Кристаллохимические явления. Изоструктурность. Изоморфизм. Твердые растворы замещения, внедрения, вычитания. Сверхструктуры. Полиморфизм.

Систематическая кристаллохимия

Типичные и аномальные структуры металлов. Интерметаллиды. Кристаллические структуры простых веществ-неметаллов. Изменение характера структуры в группах периодической системы. Характеристика кристаллических структур бинарных соединений.

Структуры АХ, описываемые в терминах ПШУ–ПШК (анионные упаковки, кладки). Примеры различных по характеру кристаллических структур АХ и ХУ, не описываемых в терминах ПШУ–ПШК. Особенности координации переходных и непереходных металлов. Кластеры. Общая характеристика тернарных кристаллических структур. Структурный тип перовскита. Сегнето- и антисегнето-электрические свойства веществ с искаженной структурой перовскита. Структурный тип шпинели. Нормальные и обращенные шпинели. Объяснение строения шпинелей с позиций теории кристаллического поля. Ферриты и их техническое значение. Связь строения, и магнитных свойств соединений, кристаллизующихся по типу шпинели. Структуры солей кислородных кислот. Особенности строения силикатов. Классификация структур силикатов. Цеолиты. Общая характеристика молекулярных кристаллов. Конденсированные фазы с различной степенью упорядоченности.

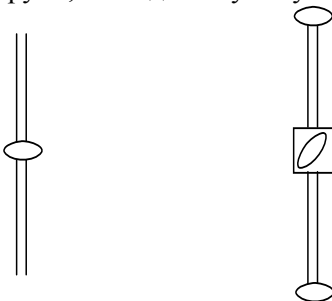
ЛИТЕРАТУРА

1. Зоркий П.М. Симметрия молекул и кристаллических структур. – М.: Изд-во МГУ, 1986. – 288 с.
2. Харгиттаи И., Харгиттаи М. Симметрия глазами химика. – М.: Мир, 1989. – 467 с.
3. Бокий Г.Б. Кристаллохимия. – М.: Наука, 1971. – 400 с.
4. Порай-Кошиц М.А. Основы структурного анализа химических соединений. – М.: Высшая школа, 1982. – 151 с.
5. Урусов В.С. Теоретическая кристаллохимия. – М.: Изд-во МГУ, 1987. – 273 с.
6. Уэллс А. Структурная неорганическая химия. Т.1–3. – М.: Мир, 1987. – 1089 с.
7. Кребс Г. Основы кристаллохимии неорганических соединений. – М.: Мир, 1971. – 292 с.
8. Пенкаля Т. Очерки кристаллохимии – Л.:Химия, 1974. – 496 с.
9. Шаскольская М.П. Кристаллография. – М.: Высшая школа, 1976. – 391 с.
10. Бацанов С.С. Структурная химия. Факты и зависимости. – М.: Диалог-МГУ, 2000. – 292 с.
11. Конвей Дж., Слоэн Н. Упаковки шаров, решетки и группы. Т.1.– М.: Мир, 1990. – 415 с.

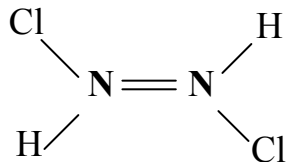
СИММЕТРИЯ МОЛЕКУЛ И КРИСТАЛЛОВ

Вариант 1

1. Пользуясь теоремами взаимодействия, дорисуйте на проекциях элементы симметрии, наличие которых вытекает из присутствующих элементов симметрии. Запишите международные символы точечных групп, в каждом случае укажите категорию.



2. Перечертите в тетрадь графическую формулу плоской молекулы 1,2-дихлорэтилена. Изобразите непосредственно на молекуле имеющиеся элементы симметрии. Определите точечную группу и категорию молекулы.



3. Изобразите проекцию элементов симметрии, определите точечную группу и категорию иона PF_6^- .

4. Для точечной группы $2/m$ изобразите проекцию элементов симметрии, укажите категорию. Запишите символ Шенфлиса. Дайте к нему пояснения.

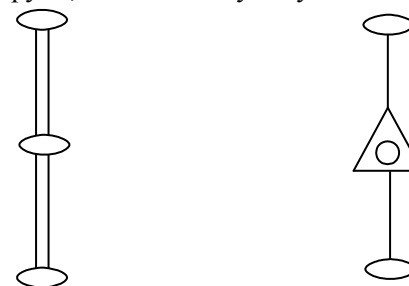
5. Для точечной группы T_d изобразите проекцию элементов симметрии, укажите категорию. Запишите международный символ.

6. В гипотетической молекуле A_xB_y атомы каждого сорта занимают только одну систему эквивалентных позиций. Каков формульный состав молекулы, если а) симметрия молекулы $mm2$, ато-

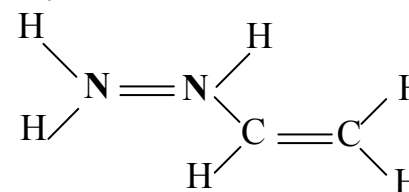
мы А располагаются на плоскости m_x , атомы В располагаются в общей позиции; б) симметрия молекулы $6/mmm$, атомы А располагаются на оси 6, атомы В располагаются в общей позиции?

Вариант 2

1. Пользуясь теоремами взаимодействия, дорисуйте на проекциях элементы симметрии, наличие которых вытекает из присутствующих элементов симметрии. Запишите международные символы точечных групп, в каждом случае укажите категорию.



2. Перечертите в тетрадь графическую формулу плоской молекулы бутадиена. Изобразите непосредственно на молекуле имеющиеся элементы симметрии. Определите точечную группу и категорию молекулы.



3. Изобразите проекцию элементов симметрии, определите точечную группу и категорию молекулы XeF_2 .

4. Для точечной группы $m\bar{3}m$ изобразите проекцию элементов симметрии, укажите категорию. Запишите символ Шенфлиса. Дайте к нему пояснения.

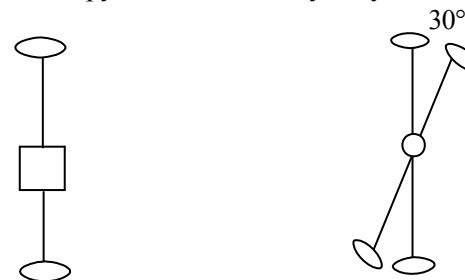
5. Для точечной группы D_{2d} изобразите проекцию элементов симметрии, укажите категорию. Запишите международный символ.

6. В гипотетической молекуле A_xB_y атомы каждого сорта занимают только одну систему эквивалентных позиций. Каков фор-

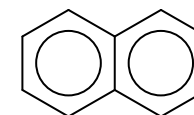
мультный состав молекулы, если а) симметрия молекулы $6/m$, атомы А располагаются на оси 6, атомы В располагаются в общей позиции; б) симметрия молекулы $\bar{4}3m$, атомы А располагаются на оси 3, атомы В располагаются в особой точке на оси $\bar{4}$?

Вариант 4

1. Пользуясь теоремами взаимодействия, дорисуйте на проекциях элементы симметрии, наличие которых вытекает из присутствующих элементов симметрии. Запишите международные символы точечных групп, в каждом случае укажите категорию.



2. Перечертите в тетрадь графическую формулу плоской молекулы нафталина. Изобразите непосредственно на молекуле имеющиеся элементы симметрии. Определите точечную группу и категорию молекулы.



3. Изобразите проекцию элементов симметрии, определите точечную группу и категорию молекулы $C \equiv O$.

4. Для точечной группы $\bar{3}m$ изобразите проекцию элементов симметрии, укажите категорию. Запишите символ Шенфлиса. Дайте к нему пояснения.

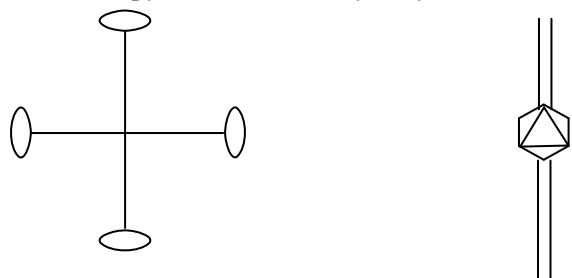
5. Для точечной группы S_6 изобразите проекцию элементов симметрии, укажите категорию. Запишите международный символ.

6. В гипотетической молекуле A_xB_y атомы каждого сорта занимают только одну систему эквивалентных позиций. Каков

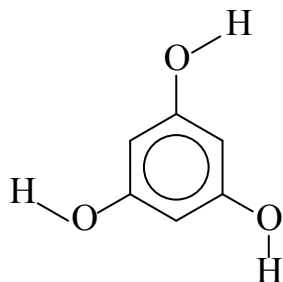
формульный состав молекулы, если а) симметрия молекулы $4/m$, атомы А располагаются на оси 4, атомы В располагаются в общей позиции; б) симметрия молекулы $6mm$, атомы А располагаются на плоскости m_x , атомы В располагаются в общей позиции?

Вариант 5

1. Пользуясь теоремами взаимодействия, дорисуйте на проекциях элементы симметрии, наличие которых вытекает из присутствующих элементов симметрии. Запишите международные символы точечных групп, в каждом случае укажите категорию.



2. Перечертите в тетрадь графическую формулу плоской молекулы 1,3,5-триоксибензола. Изобразите непосредственно на молекуле имеющиеся элементы симметрии. Определите точечную группу и категорию молекулы.



3. Изобразите проекцию элементов симметрии, определите точечную группу и категорию иона $SbCl_6^-$.

4. Для точечной группы 32 изобразите проекцию элементов симметрии, укажите категорию. Запишите символ Шенфлиса. Дайте к нему пояснения.

5. Для точечной группы D_{3h} изобразите проекцию элементов симметрии, укажите категорию. Запишите международный символ.

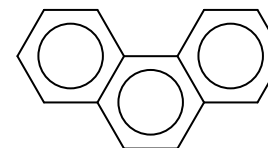
6. В гипотетической молекуле A_xV_y атомы каждого сорта занимают только одну систему эквивалентных позиций. Каков формульный состав молекулы, если а) симметрия молекулы 32 , атомы А располагаются на оси 3 , атомы В располагаются в общей позиции; б) симметрия молекулы $\bar{4}2m$, атомы А располагаются на плоскости m , атомы В располагаются в особой точке на оси $\bar{4}$?

Вариант 6

1. Пользуясь теоремами взаимодействия, дорисуйте на проекциях элементы симметрии, наличие которых вытекает из присутствующих элементов симметрии. Запишите международные символы точечных групп, в каждом случае укажите категорию.



2. Перечертите в тетрадь графическую формулу плоской молекулы фенантрена. Изобразите непосредственно на молекуле имеющиеся элементы симметрии. Определите точечную группу и категорию молекулы.



3. Изобразите проекцию элементов симметрии, определите точечную группу и категорию иона AlF_6^- .

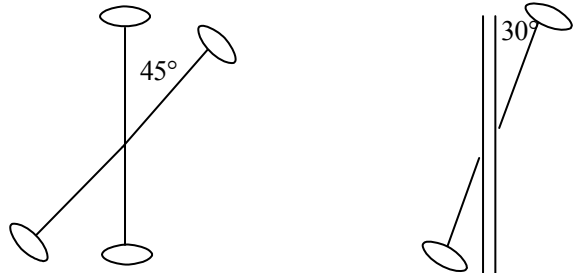
4. Для точечной группы 422 изобразите проекцию элементов симметрии, укажите категорию. Запишите символ Шенфлиса. Дайте к нему пояснения.

5. Для точечной группы C_{3h} изобразите проекцию элементов симметрии, укажите категорию. Запишите международный символ.

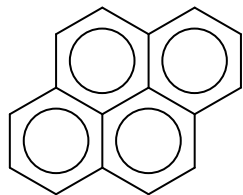
6. В гипотетической молекуле A_xB_y атомы каждого сорта занимают только одну систему эквивалентных позиций. Каков формульный состав молекулы, если а) симметрия молекулы $4/m\bar{3}$, атомы А располагаются на оси 4, атомы В располагаются в общей позиции; б) симметрия молекулы $m\bar{3}$, атомы А располагаются на плоскости m , атомы В располагаются в общей позиции?

Вариант 7

1. Пользуясь теоремами взаимодействия, дорисуйте на проекциях элементы симметрии, наличие которых вытекает из присутствующих элементов симметрии. Запишите международные символы точечных групп, в каждом случае укажите категорию.



2. Перечертите в тетрадь графическую формулу плоской молекулы пирена. Изобразите непосредственно на молекуле имеющиеся элементы симметрии. Определите точечную группу и категорию молекулы.



3. Изобразите проекцию элементов симметрии, определите точечную группу и категорию иона NH_4^+ .

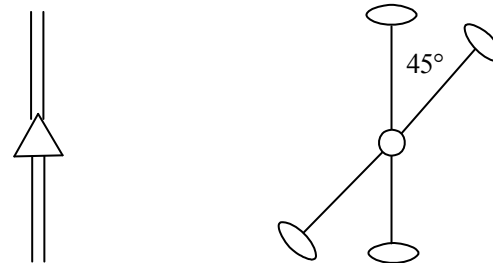
4. Для точечной группы $\bar{4}2m$ изобразите проекцию элементов симметрии, укажите категорию. Запишите символ Шенфлиса. Дайте к нему пояснения.

5. Для точечной группы C_{6v} изобразите проекцию элементов симметрии, укажите категорию. Запишите международный символ.

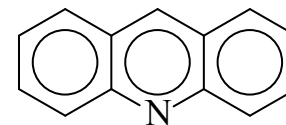
6. В гипотетической молекуле A_xB_y , атомы каждого сорта занимают только одну систему эквивалентных позиций. Каков формульный состав молекулы, если а) симметрия молекулы 222 , атомы А располагаются на оси 2_x , атомы В располагаются в общей позиции; б) симметрия молекулы $6/mmm$, атомы А располагаются на плоскости m_z , атомы В располагаются в общей позиции?

Вариант 8

1. Пользуясь теоремами взаимодействия, дорисуйте на проекциях элементы симметрии, наличие которых вытекает из присутствующих элементов симметрии. Запишите международные символы точечных групп, в каждом случае укажите категорию.



2. Перечертите в тетрадь графическую формулу плоской молекулы акридина. Изобразите непосредственно на молекуле имеющиеся элементы симметрии. Определите точечную группу и категорию молекулы.



3. Изобразите проекцию элементов симметрии, определите точечную группу и категорию молекулы BF_3 .

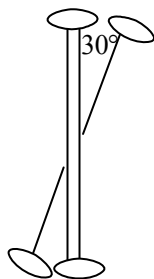
4. Для точечной группы $4/m\bar{m}m$ изобразите проекцию элементов симметрии, укажите категорию. Запишите символ Шенфлиса. Дайте к нему пояснения.

5. Для точечной группы D_6 изобразите проекцию элементов симметрии, укажите категорию. Запишите международный символ.

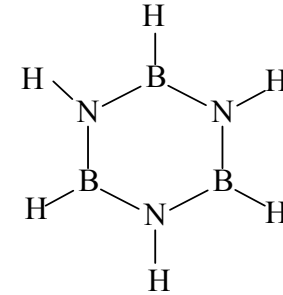
6. В гипотетической молекуле A_xB_y атомы каждого сорта занимают только одну систему эквивалентных позиций. Каков формульный состав молекулы, если а) симметрия молекулы 622 , атомы А располагаются на оси 6 , атомы В располагаются в общей позиции; б) симметрия молекулы $m\bar{m}2$, атомы А располагаются на плоскости m_y , атомы В располагаются в общей позиции?

Вариант 9

1. Пользуясь теоремами взаимодействия, дорисуйте на проекциях элементы симметрии, наличие которых вытекает из присутствующих элементов симметрии. Запишите международные символы точечных групп, в каждом случае укажите категорию.



2. Перечертите в тетрадь графическую формулу плоской молекулы боразола. Изобразите непосредственно на молекуле имеющиеся элементы симметрии. Определите точечную группу и категорию молекулы.



3. Изобразите проекцию элементов симметрии, определите точечную группу и категорию молекулы NH_3 .

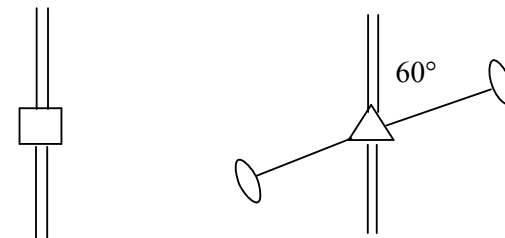
4. Для точечной группы $\bar{6}$ изобразите проекцию элементов симметрии, укажите категорию. Запишите символ Шенфлиса. Дайте к нему пояснения.

5. Для точечной группы O_h изобразите проекцию элементов симметрии, укажите категорию. Запишите международный символ.

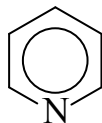
6. В гипотетической молекуле A_xB_y атомы каждого сорта занимают только одну систему эквивалентных позиций. Каков формульный состав молекулы, если а) симметрия молекулы $m\bar{3}m$, атомы А располагаются на оси 4, атомы В располагаются в центре симметрии; б) симметрия молекулы $2/m$, атомы А располагаются на плоскости m , атомы В располагаются в общей позиции?

Вариант 10

1. Пользуясь теоремами взаимодействия, дорисуйте на проекциях элементы симметрии, наличие которых вытекает из присутствующих элементов симметрии. Запишите международные символы точечных групп, в каждом случае укажите категорию.



2. Перечертите в тетрадь графическую формулу плоской молекулы пиридина. Изобразите непосредственно на молекуле имеющиеся элементы симметрии. Определите точечную группу и категорию молекулы.



3. Изобразите проекцию элементов симметрии, определите точечную группу и категорию молекулы HOC1 .

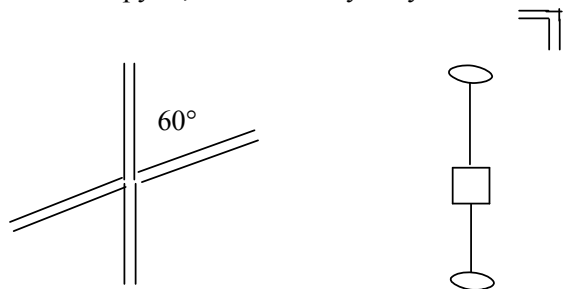
4. Для точечной группы $\bar{6} m2$ изобразите проекцию элементов симметрии, укажите категорию. Запишите символ Шенфлиса. Дайте к нему пояснения.

5. Для точечной группы D_3 изобразите проекцию элементов симметрии, укажите категорию. Запишите международный символ.

6. В гипотетической молекуле A_xV_y атомы каждого сорта занимают только одну систему эквивалентных позиций. Каков формульный состав молекулы, если а) симметрия молекулы $\bar{6} m2$, атомы А располагаются на оси $\bar{6}$, атомы В располагаются на оси 2; б) симметрия молекулы $4mm$, атомы А располагаются на плоскости m_x , атомы В располагаются в общей позиции?

Вариант 11

1. Пользуясь теоремами взаимодействия, дорисуйте на проекциях элементы симметрии, наличие которых вытекает из присутствующих элементов симметрии. Запишите международные символы точечных групп, в каждом случае укажите категорию.



2. Перечертите в тетрадь графическую формулу плоской молекулы хлорбензола. Изобразите непосредственно на молекуле имеющиеся элементы симметрии. Определите точечную группу и категорию молекулы.



3. Изобразите проекцию элементов симметрии, определите точечную группу и категорию молекулы CHCl_3 .

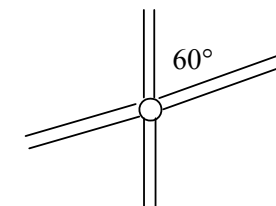
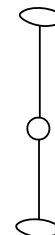
4. Для точечной группы $m\bar{3}$ изобразите проекцию элементов симметрии, укажите категорию. Запишите символ Шенфлиса. Дайте к нему пояснения.

5. Для точечной группы D_2 изобразите проекцию элементов симметрии, укажите категорию. Запишите международный символ.

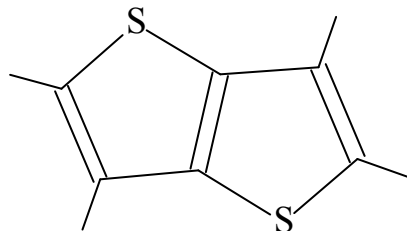
6. В гипотетической молекуле A_xB_y атомы каждого сорта занимают только одну систему эквивалентных позиций. Каков формульный состав молекулы, если а) симметрия молекулы 422 , атомы А располагаются на оси 4, атомы В располагаются на оси 2_x ; б) симметрия молекулы $m\bar{3}$, атомы А располагаются на плоскости m_z , атомы В располагаются в общей позиции?

Вариант 12

1. Пользуясь теоремами взаимодействия, дорисуйте на проекциях элементы симметрии, наличие которых вытекает из присутствующих элементов симметрии. Запишите международные символы точечных групп, в каждом случае укажите категорию.



2. Перечертите в тетрадь графическую формулу плоской молекулы тиофена. Изобразите непосредственно на молекуле имеющиеся элементы симметрии. Определите точечную группу и категорию молекулы.



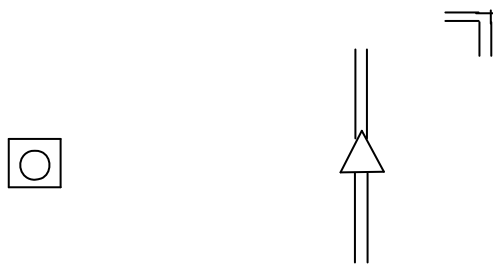
3. Изобразите проекцию элементов симметрии, определите точечную группу и категорию молекулы H_2S .

4. Для точечной группы 23 изобразите проекцию элементов симметрии, укажите категорию. Запишите символ Шенфлиса. Дайте к нему пояснения.

5. Для точечной группы C_{4h} изобразите проекцию элементов симметрии, укажите категорию. Запишите международный символ.

6. В гипотетической молекуле A_xB_y атомы каждого сорта занимают только одну систему эквивалентных позиций. Каков формульный состав молекулы, если а) симметрия молекулы $4/mmm$, атомы А располагаются на оси 2, атомы В располагаются на оси 4; б) симметрия молекулы $3m$, атомы А располагаются на плоскости m , атомы В располагаются в общей позиции?

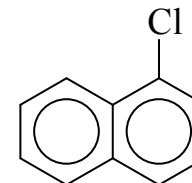
Вариант 13



1. Пользуясь теоремами взаимодействия, дорисуйте на проекциях элементы симметрии, наличие которых вытекает из при-

существующих элементов симметрии. Запишите международные символы точечных групп, в каждом случае укажите категорию.

2. Перечертите в тетрадь графическую формулу плоской молекулы хлорнафталина. Изобразите непосредственно на молекуле имеющиеся элементы симметрии. Определите точечную группу и категорию молекулы.



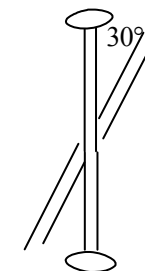
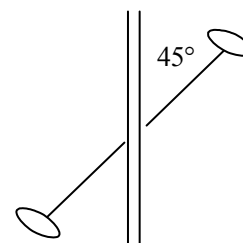
3. Изобразите проекцию элементов симметрии, определите точечную группу и категорию иона PCl_6^- .

4. Для точечной группы $m\bar{3}m$ изобразите проекцию элементов симметрии, укажите категорию. Запишите символ Шенфлиса. Дайте к нему пояснения.

5. Для точечной группы D_{4h} изобразите проекцию элементов симметрии, укажите категорию. Запишите международный символ.

6. В гипотетической молекуле A_xB_y атомы каждого сорта занимают только одну систему эквивалентных позиций. Каков формульный состав молекулы, если а) симметрия молекулы $4mm$, атомы А располагаются на оси 4, атомы В располагаются в общей позиции; б) симметрия молекулы $6/m$, атомы А располагаются на плоскости m , атомы В располагаются в общей позиции?

Вариант 14



1. Пользуясь теоремами взаимодействия, дорисуйте на проекциях элементы симметрии, наличие которых вытекает из при-

существующих элементов симметрии. Запишите международные символы точечных групп, в каждом случае укажите категорию.

2. Изобразите в тетради графическую формулу плоской молекулы этилена. Разместите непосредственно на молекуле имеющиеся элементы симметрии. Определите точечную группу и категорию молекулы.

3. Изобразите проекцию элементов симметрии, определите точечную группу и категорию молекулы HCN.

4. Для точечной группы $\bar{4}3m$ изобразите проекцию элементов симметрии, укажите категорию. Запишите символ Шенфлиса. Дайте к нему пояснения.

5. Для точечной группы C_{2v} изобразите проекцию элементов симметрии, укажите категорию. Запишите международный символ.

6. В гипотетической молекуле A_xV_y атомы каждого сорта занимают только одну систему эквивалентных позиций. Каков формульный состав молекулы, если а) симметрия молекулы $m\bar{3}m$, атомы А располагаются на оси 2_z , атомы В располагаются в общей позиции; б) симметрия молекулы $\bar{4}2m$, атомы А располагаются на оси 2_x , атомы В располагаются на плоскости m ?

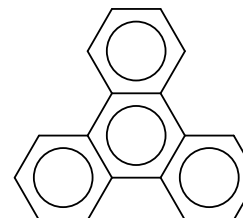
Вариант 15

1. Пользуясь теоремами взаимодействия, дорисуйте на проекциях элементы симметрии, наличие которых вытекает из присутствующих элементов симметрии. Запишите международные символы точечных групп, в каждом случае укажите категорию.



2. Перечертите в тетрадь графическую формулу плоской молекулы трифенилена. Изобразите непосредственно на молеку-

ле имеющиеся элементы симметрии. Определите точечную группу и категорию молекулы.



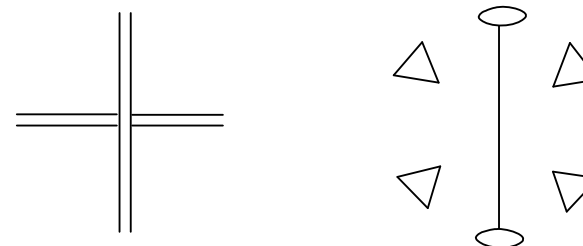
3. Изобразите проекцию элементов симметрии, определите точечную группу и категорию молекулы CCl_4 .

4. Для точечной группы 222 изобразите проекцию элементов симметрии, укажите категорию. Запишите символ Шенфлиса. Дайте к нему пояснения.

5. Для точечной группы C_{3v} изобразите проекцию элементов симметрии, укажите категорию. Запишите международный символ.

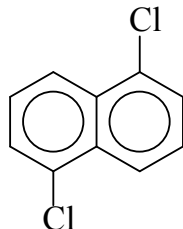
6. В гипотетической молекуле A_xB_y атомы каждого сорта занимают только одну систему эквивалентных позиций. Каков формульный состав молекулы, если а) симметрия молекулы 222 , атомы А располагаются на оси 2_y , атомы В располагаются в общей позиции; б) симметрия молекулы $4mm$, атомы А располагаются на оси 4, атомы В располагаются на плоскости m_x ?

Вариант 16



1. Пользуясь теоремами взаимодействия, дорисуйте на проекциях элементы симметрии, наличие которых вытекает из присутствующих элементов симметрии. Запишите международные символы точечных групп, в каждом случае укажите категорию.

2. Перечертите в тетрадь графическую формулу плоской молекулы 1,5-дихлорнафталина. Изобразите непосредственно на молекуле имеющиеся элементы симметрии. Определите точечную группу и категорию молекулы.



3. Изобразите проекцию элементов симметрии, определите точечную группу и категорию молекулы OF_2 .

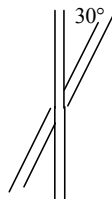
4. Для точечной группы $mm2$ изобразите проекцию элементов симметрии, укажите категорию. Запишите символ Шенфлиса. Дайте к нему пояснения.

5. Для точечной группы T_h изобразите проекцию элементов симметрии, укажите категорию. Запишите международный символ.

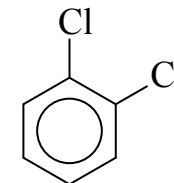
6. В гипотетической молекуле A_xB_y атомы каждого сорта занимают только одну систему эквивалентных позиций. Каков формульный состав молекулы, если а) симметрия молекулы $2/m$, атомы А располагаются на оси 2, атомы В располагаются в общей позиции; б) симметрия молекулы $6mm$, атомы А располагаются на оси 6, атомы В располагаются на плоскости m_x ?

Вариант 17

1. Пользуясь теоремами взаимодействия, дорисуйте на проекциях элементы симметрии, наличие которых вытекает из присутствующих элементов симметрии. Запишите международные символы точечных групп, в каждом случае укажите категорию.



2. Перечертите в тетрадь графическую формулу плоской молекулы 1,2-дихлорбензола. Изобразите непосредственно на молекуле имеющиеся элементы симметрии. Определите точечную группу и категорию молекулы.



3. Изобразите проекцию элементов симметрии, определите точечную группу и категорию молекулы CO_2 .

4. Для точечной группы $3m$ изобразите проекцию элементов симметрии, укажите категорию. Запишите символ Шенфлиса. Дайте к нему пояснения.

5. Для точечной группы S_4 изобразите проекцию элементов симметрии, укажите категорию. Запишите международный символ.

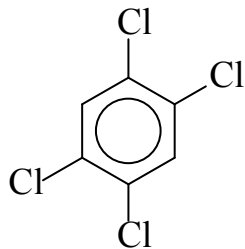
6. В гипотетической молекуле A_xB_y атомы каждого сорта занимают только одну систему эквивалентных позиций. Каков формульный состав молекулы, если а) симметрия молекулы $\bar{3}m$, атомы А располагаются на оси 2, атомы В располагаются в общей позиции; б) симметрия молекулы $m\bar{3}m$, атомы А располагаются в центре симметрии, атомы В располагаются на плоскости m_y ?

Вариант 18

1. Пользуясь теоремами взаимодействия, дорисуйте на проекциях элементы симметрии, наличие которых вытекает из присутствующих элементов симметрии. Запишите международные символы точечных групп, в каждом случае укажите категорию.



2. Перечертите в тетрадь графическую формулу плоской молекулы 1,2,4,5-тетрахлорбензола. Изобразите непосредственно на молекуле имеющиеся элементы симметрии. Определите точечную группу и категорию молекулы.



3. Изобразите проекцию элементов симметрии, определите точечную группу и категорию молекулы $N \equiv C$.

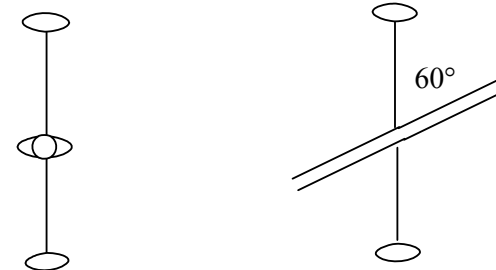
4. Для точечной группы 622 изобразите проекцию элементов симметрии, укажите категорию. Запишите символ Шенфлиса. Дайте к нему пояснения.

5. Для точечной группы C_6 изобразите проекцию элементов симметрии, укажите категорию. Запишите международный символ.

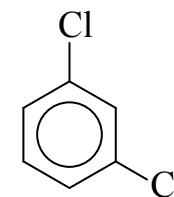
6. В гипотетической молекуле A_xV_y атомы каждого сорта занимают только одну систему эквивалентных позиций. Каков формульный состав молекулы, если а) симметрия молекулы 422 , атомы А располагаются на оси 2_x , атомы В располагаются в общей позиции; б) симметрия молекулы $\bar{6} m2$, атомы А располагаются на плоскости m_z , атомы В располагаются на оси $\bar{6}$?

Вариант 19

1. Пользуясь теоремами взаимодействия, дорисуйте на проекциях элементы симметрии, наличие которых вытекает из присутствующих элементов симметрии. Запишите международные символы точечных групп, в каждом случае укажите категорию.



2. Перечертите в тетрадь графическую формулу плоской молекулы 1,3-дихлорбензола. Изобразите непосредственно на молекуле имеющиеся элементы симметрии. Определите точечную группу и категорию молекулы.



3. Изобразите проекцию элементов симметрии, определите точечную группу и категорию иона BO_3^{3-} .

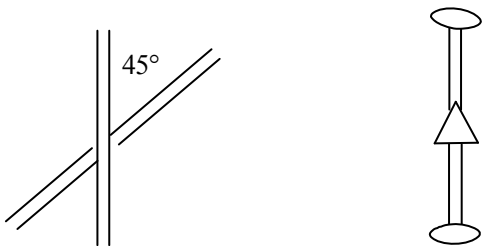
4. Для точечной группы $4mm$ изобразите проекцию элементов симметрии, укажите категорию. Запишите символ Шенфлиса. Дайте к нему пояснения.

5. Для точечной группы O изобразите проекцию элементов симметрии, укажите категорию. Запишите международный символ.

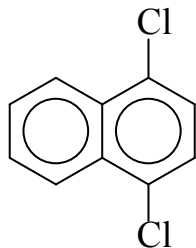
6. В гипотетической молекуле A_xB_y атомы каждого сорта занимают только одну систему эквивалентных позиций. Каков формульный состав молекулы, если а) симметрия молекулы $6mm$, атомы А располагаются на оси 6, атомы В располагаются в общей позиции; б) симметрия молекулы mmm , атомы А располагаются на плоскости m_x , атомы В располагаются на плоскости m_z ?

Вариант 20

1. Пользуясь теоремами взаимодействия, дорисуйте на проекциях элементы симметрии, наличие которых вытекает из присутствующих элементов симметрии. Запишите международные символы точечных групп, в каждом случае укажите категорию.



2. Перечертите в тетрадь графическую формулу плоской молекулы 1,4-дихлорнафталина. Изобразите непосредственно на молекуле имеющиеся элементы симметрии. Определите точечную группу и категорию молекулы.



3. Изобразите проекцию элементов симметрии, определите точечную группу и категорию молекулы BeCl_2 .

4. Для точечной группы $6mm$ изобразите проекцию элементов симметрии, укажите категорию. Запишите символ Шенфлиса. Дайте к нему пояснения.

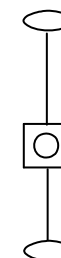
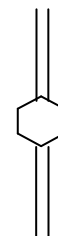
5. Для точечной группы T изобразите проекцию элементов симметрии, укажите категорию. Запишите международный символ.

6. В гипотетической молекуле A_xV_y атомы каждого сорта занимают только одну систему эквивалентных позиций. Каков формульный состав молекулы, если а) симметрия молекулы $4/m$, атомы A располагаются на плоскости m , атомы V располагаются в общей позиции; б) симметрия молекулы $\bar{4}3m$, атомы A располагаются на оси $\bar{4}$, атомы V располагаются на оси 3 ?

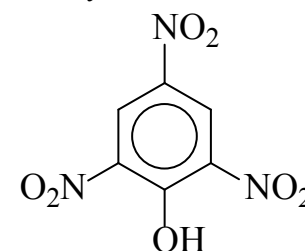
Вариант 21

1. Пользуясь теоремами взаимодействия, дорисуйте на проекциях элементы симметрии, наличие которых вытекает из при-

существующих элементов симметрии. Запишите международные символы точечных групп, в каждом случае укажите категорию.



2. Перечертите в тетрадь графическую формулу плоской молекулы тринитрофенола. Изобразите непосредственно на молекуле имеющиеся элементы симметрии. Определите точечную группу и категорию молекулы.



3. Изобразите проекцию элементов симметрии, определите точечную группу и категорию молекулы NF_3 .

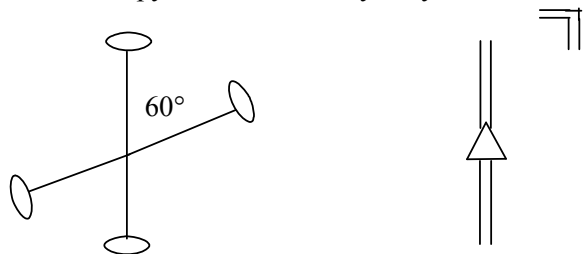
4. Для точечной группы $6/m$ изобразите проекцию элементов симметрии, укажите категорию. Запишите символ Шенфлиса. Дайте к нему пояснения.

5. Для точечной группы D_4 изобразите проекцию элементов симметрии, укажите категорию. Запишите международный символ.

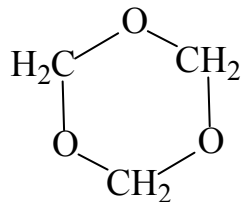
6. В гипотетической молекуле A_xB_y атомы каждого сорта занимают только одну систему эквивалентных позиций. Каков формульный состав молекулы, если а) симметрия молекулы 222 , атомы А располагаются на оси 2_z , атомы В располагаются в общей позиции; б) симметрия молекулы $6/mmm$, атомы А располагаются на плоскости m_x , атомы В располагаются в общей позиции?

Вариант 22

1. Пользуясь теоремами взаимодействия, дорисуйте на проекциях элементы симметрии, наличие которых вытекает из присутствующих элементов симметрии. Запишите международные символы точечных групп, в каждом случае укажите категорию.



2. Перечертите в тетрадь графическую формулу плоской молекулы триоксана. Изобразите непосредственно на молекуле имеющиеся элементы симметрии. Определите точечную группу и категорию молекулы.



3. Изобразите проекцию элементов симметрии, определите точечную группу и категорию молекулы HOJ .

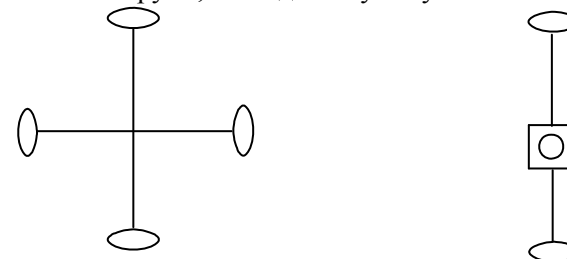
4. Для точечной группы $4/m$ изобразите проекцию элементов симметрии, укажите категорию. Запишите символ Шенфлиса. Дайте к нему пояснения.

5. Для точечной группы D_{3d} изобразите проекцию элементов симметрии, укажите категорию. Запишите международный символ.

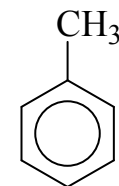
6. В гипотетической молекуле A_xV_y атомы каждого сорта занимают только одну систему эквивалентных позиций. Каков формульный состав молекулы, если а) симметрия молекулы $m\bar{m}m$, атомы А располагаются в центре симметрии, атомы В располагаются на плоскости m_x ; б) симметрия молекулы $\bar{6}m2$, атомы А располагаются на оси 2, атомы В располагаются в общей позиции?

Вариант 23

1. Пользуясь теоремами взаимодействия, дорисуйте на проекциях элементы симметрии, наличие которых вытекает из присутствующих элементов симметрии. Запишите международные символы точечных групп, в каждом случае укажите категорию.



2. Перечертите в тетрадь графическую формулу плоской молекулы толуола. Изобразите непосредственно на молекуле имеющиеся элементы симметрии. Определите точечную группу и категорию молекулы.



3. Изобразите проекцию элементов симметрии, определите точечную группу и категорию молекулы H_2O .

4. Для точечной группы 432 изобразите проекцию элементов симметрии, укажите категорию. Запишите символ Шенфлиса. Дайте к нему пояснения.

5. Для точечной группы C_{2h} изобразите проекцию элементов симметрии, укажите категорию. Запишите международный символ.

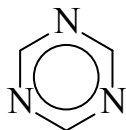
6. В гипотетической молекуле A_xB_y атомы каждого сорта занимают только одну систему эквивалентных позиций. Каков формульный состав молекулы, если а) симметрия молекулы 622 , атомы А располагаются на оси 2_x , атомы В располагаются в общей позиции; б) симметрия молекулы $4/mmm$, атомы А располагаются на плоскости m_z , атомы В располагаются на оси 4 ?

Вариант 24

1. Пользуясь теоремами взаимодействия, дорисуйте на проекциях элементы симметрии, наличие которых вытекает из присутствующих элементов симметрии. Запишите международные символы точечных групп, в каждом случае укажите категорию.



2. Перечертите в тетрадь графическую формулу плоской молекулы триазина. Изобразите непосредственно на молекуле имеющиеся элементы симметрии. Определите точечную группу и категорию молекулы.



3. Изобразите проекцию элементов симметрии, определите точечную группу и категорию молекулы SiCl_4 .

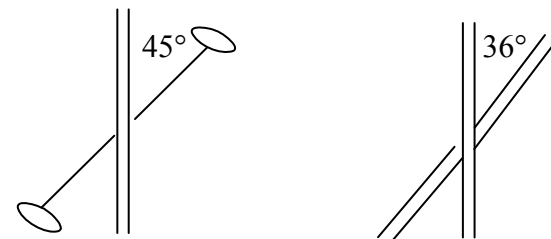
4. Для точечной группы $\bar{4}$ изобразите проекцию элементов симметрии, укажите категорию. Запишите символ Шенфлиса. Дайте к нему пояснения.

5. Для точечной группы C_{6h} изобразите проекцию элементов симметрии, укажите категорию. Запишите международный символ.

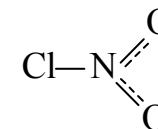
6. В гипотетической молекуле A_xV_y атомы каждого сорта занимают только одну систему эквивалентных позиций. Каков формульный состав молекулы, если а) симметрия молекулы 32 , атомы А располагаются на оси 2, атомы В располагаются в общей позиции; б) симметрия молекулы $6/m$, атомы А располагаются на плоскости m , атомы В располагаются на оси 6?

Вариант 25

1. Пользуясь теоремами взаимодействия, дорисуйте на проекциях элементы симметрии, наличие которых вытекает из присутствующих элементов симметрии. Запишите международные символы точечных групп, в каждом случае укажите категорию.



2. Перечертите в тетрадь графическую формулу плоской молекулы нитрилхлорида. Изобразите непосредственно на молекуле имеющиеся элементы симметрии. Определите точечную группу и категорию молекулы.



3. Изобразите проекцию элементов симметрии, определите точечную группу и категорию молекулы HCl.

4. Для точечной группы C_6 изобразите проекцию элементов симметрии, укажите категорию. Запишите символ Шенфлиса. Дайте к нему пояснения.

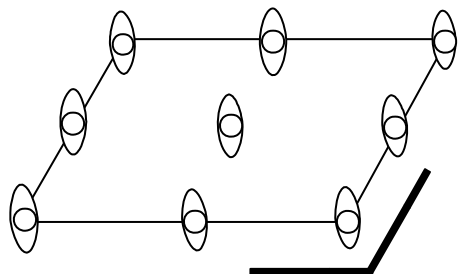
5. Для точечной группы C_{4v} изобразите проекцию элементов симметрии, укажите категорию. Запишите международный символ.

6. В гипотетической молекуле A_xB_y атомы каждого сорта занимают только одну систему эквивалентных позиций. Каков формульный состав молекулы, если а) симметрия молекулы $m\bar{3}m$, атомы А располагаются на оси 2_y , атомы В располагаются в общей позиции; б) симметрия молекулы $\bar{3}m$, атомы А располагаются на плоскости m , атомы В располагаются на оси $\bar{3}$?

СИММЕТРИЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СТРУКТУР

Вариант 1

1. На проекции изображены элементы симметрии для пространственной группы $P2/m$:



Перечертите проекцию в тетрадь. Определите категорию и сингонию, охарактеризуйте элементарную ячейку. Представьте себе, как проходят все элементы симметрии в ячейке. Нанесите на проекцию точки, представляющие собой общую систему эквивалентных позиций (СЭП), укажите кратность СЭП, запишите координаты точек.

Сделайте то же самое для одной из частных позиций, а именно: точки располагаются на плоскости симметрии.

2. Кратчайшее межатомное расстояние в кристаллах одной из модификаций стронция (структурный тип α -Fe) равно $4,18 \text{ \AA}$. Определите плотность кристаллов стронция.

3. Определите параметры решетки одной из модификаций титана (структурный тип Mg). Для решения задачи воспользуйтесь таблицами кристаллохимических радиусов.

4. В кристаллической структуре вещества состава $A_xB_2C_y$ атомы А и С совместно образуют плотнейшую шаровую упаковку, а атомы В занимают $1/8$ октаэдрических пустот. В другой структуре вещества такого же состава совместную упаковку образуют атомы В и С, а атомы А занимают $1/2$ тетраэдрических пустот. Установите состав вещества, вычислив значения x и y .

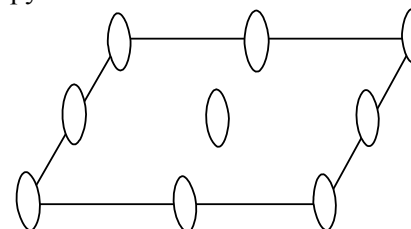
5. Какова структура лондейлита по геометрическому признаку? Ответ обоснуйте.

6. Назовите КЧ и полиэдры кальция, титана и кислорода в структуре перовскита CaTiO_3 . Покажите на модели.

7. Каково число формульных единиц в структуре графита? Покажите на модели.

Вариант 2

1. На проекции изображены элементы симметрии для пространственной группы Р 2:



Перечертите проекцию в тетрадь. Определите категорию и сингонию, охарактеризуйте элементарную ячейку. Представьте себе, как проходят все элементы симметрии в ячейке. Нанесите на проекцию точки, представляющие собой общую систему эквивалентных позиций (СЭП), укажите кратность СЭП, запишите координаты точек.

Сделайте то же самое для всевозможных частных позиций.

2. Параметр кубической решетки алмаза $a = 3,56 \text{ \AA}$, параметры гексагональной решетки графита $a = 2,46$; $c = 6,7 \text{ \AA}$. Как соотносятся плотности алмаза и графита?

3. Определите параметры решетки одной из модификаций титана (структурный тип $\alpha\text{-Fe}$). Для решения задачи воспользуйтесь таблицами кристаллохимических радиусов.

4. В кристаллической структуре вещества состава A_2B_x атомы А образуют объемноцентрированную кубическую кладку, а атомы В занимают все тетрагонально-бипирамидальные пустоты. Установите состав вещества, вычислив значение x .

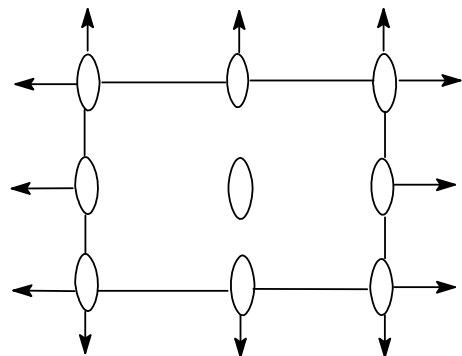
5. Какова структура NiAs по геометрическому признаку? Ответ обоснуйте.

6. Назовите КЧ и полиэдры азота и бора в структуре нитрида бора BN . Покажите на модели.

7. Каково число формульных единиц в структуре вюрцита ZnS ? Покажите на модели.

Вариант 3

1. На проекции изображены элементы симметрии для пространственной группы P 222:



Перечертите проекцию в тетрадь. Определите категорию и сингонию, охарактеризуйте элементарную ячейку. Представьте себе, как проходят все элементы симметрии в ячейке. Нанесите на проекцию точки, представляющие собой общую систему эквивалентных позиций (СЭП), укажите кратность СЭП, запишите координаты точек.

Сделайте то же самое для одной из частных позиций, а именно: точки располагаются на оси 2_z .

2. Параметр кубической решетки сфалерита равен 5,41 Å. Какова плотность кристаллов сфалерита?

3. Определите параметры решетки золота (структурный тип Cu). Для решения задачи воспользуйтесь таблицами кристаллохимических радиусов.

4. Кристаллы CsNiCl_3 имеют следующую структуру: атомы Cl и Cs образуют совместно двуслойную плотнейшую упаковку, а атомы Ni находятся в октаэдрических пустотах. Определите, какая часть октаэдрических пустот заполнена.

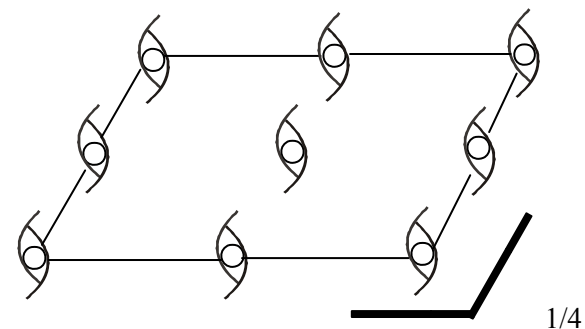
5. Какова структура графита по геометрическому признаку? Ответ обоснуйте.

6. Назовите КЧ и полиэдры рения и кислорода в структуре оксида рения ReO_3 . Покажите на модели.

7. Каково число формульных единиц в структуре арсенида никеля NiAs ? Покажите на модели.

Вариант 4

1. На проекции изображены элементы симметрии для пространственной группы $P 2_1/m$:



Перечертите проекцию в тетрадь. Определите категорию и сингонию, охарактеризуйте элементарную ячейку. Представьте себе, как проходят все элементы симметрии в ячейке. Нанесите на проекцию точки, представляющие собой общую систему эквивалентных позиций (СЭП), укажите кратность СЭП, запишите координаты точек.

Сделайте то же самое для одной из частных позиций, а именно: точки располагаются в центре симметрии.

2. В кубической структуре CsCl расстояние Cs – Cl равно 3,46 Å. Какова плотность кристаллов хлорида цезия?

3. Определите параметры решетки одной из модификаций натрия (структурный тип Cu). Для решения задачи воспользуйтесь таблицами кристаллохимических радиусов.

4. В кристаллической структуре AB_2C_4 атомы С образуют плотнейшую упаковку. Координационное число атомов А равно 4, а атомов В – 6. Каков тип занятых пустот? Какая часть пустот заполнена?

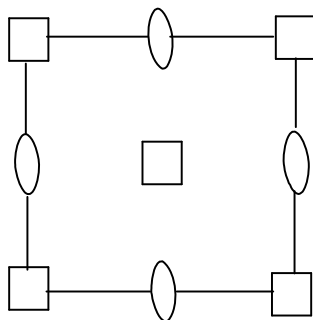
5. Какова структура перовскита по геометрическому признаку? Ответ обоснуйте.

6. Назовите КЧ и полиэдры цинка и серы в структуре сфалерита ZnS. Покажите на модели.

7. Каково число формульных единиц в структуре алмаза? Покажите на модели.

Вариант 5

1. На проекции изображены элементы симметрии для пространственной группы P 4:



Перечертите проекцию в тетрадь. Определите категорию и сингонию, охарактеризуйте элементарную ячейку. Представьте себе, как проходят все элементы симметрии в ячейке. Нанесите на проекцию точки, представляющие собой общую систему эквивалентных позиций (СЭП), укажите кратность СЭП, запишите координаты точек.

Сделайте то же самое для одной из частных позиций, а именно: точки располагаются на оси 4 внутри объема элементарной ячейки.

2. В кубической структуре SrCl_2 (структурный тип флюорита) расстояние $\text{Sr} - \text{Cl}$ равно $3,02 \text{ \AA}$. Какова плотность кристаллов хлорида стронция?

3. Определите параметры решетки одной из модификаций натрия (структурный тип $\alpha\text{-Fe}$). Для решения задачи воспользуйтесь таблицами кристаллохимических радиусов.

4. В кристаллической структуре $\text{A}_x\text{B}_y\text{C}_{12}$ атомы С образуют плотнейшую шаровую упаковку. Атомы А занимают $3/8$ тетраэдрических пустот, а атомы В – $2/3$ октаэдрических пустот. Установите состав вещества, вычислив значения x и y .

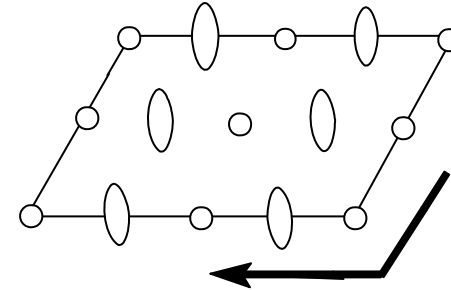
5. Выполняется ли ПШУ в структуре перовскита? Ответ обоснуйте. Покажите на модели.

6. Что представляет собой элементарная ячейка в структуре графита? Обоснуйте выбор ячейки. Покажите на модели.

7. Каково число формульных единиц в структуре ртути Hg? Покажите на модели.

Вариант 6

1. На проекции изображены элементы симметрии для пространственной группы $P 2/b$:



Перечертите проекцию в тетрадь. Определите категорию и сингонию, охарактеризуйте элементарную ячейку. Представьте себе, как проходят все элементы симметрии в ячейке. Нанесите на проекцию точки, представляющие собой общую систему эквивалентных позиций (СЭП), укажите кратность СЭП, запишите координаты точек.

Сделайте то же самое для одной из частных позиций, а именно: точки располагаются в центре симметрии.

2. Параметры гексагональной решетки кристаллов $MnBi$ (структурный тип $NiAs$) равны $a = 4,26$; $c = 6,12 \text{ \AA}$. Число формульных единиц $Z = 2$. Какова плотность кристаллов $MnBi$?

3. Определите параметры решетки одной из модификаций натрия (структурный тип Mg). Для решения задачи воспользуйтесь таблицами кристаллохимических радиусов.

4. В кристаллической структуре $A_xB_yC_6$ атомы C образуют плотнейшую шаровую упаковку. Атомы A занимают $2/3$ тетраэдрических пустот, а атомы B – $1/3$ октаэдрических пустот. Установите состав вещества, вычислив значения x и y .

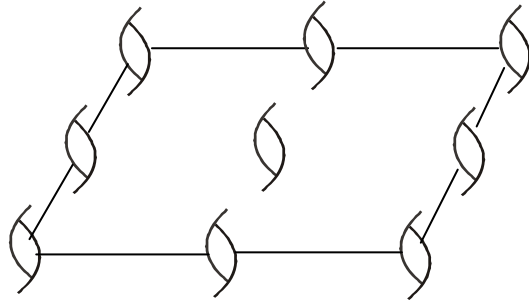
5. Выполняется ли ПШУ в структуре индия In ? Ответ обоснуйте. Покажите на модели.

6. Что представляет собой элементарная ячейка в структуре интерметаллида $CuAu$? Обоснуйте выбор ячейки. Покажите на модели.

7. Какова структура лонсдейлита по геометрическому признаку? Ответ обоснуйте. Покажите на модели.

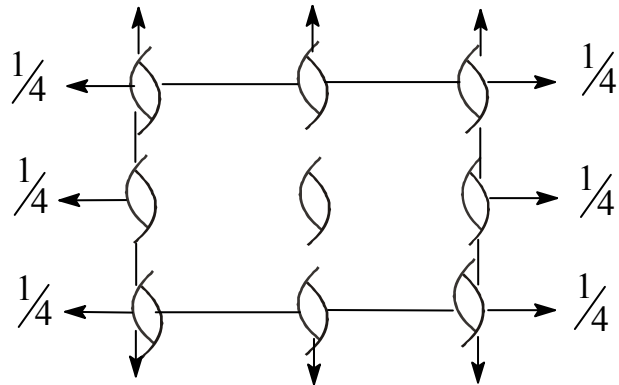
Вариант 7

1. На проекции изображены элементы симметрии для пространственной группы $P 2_1$:



Перечертите проекцию в тетрадь. Определите категорию и сингонию, охарактеризуйте элементарную ячейку. Представьте себе, как проходят все элементы симметрии в ячейке. Нанесите на проекцию точки, представляющие собой общую систему эквивалентных позиций (СЭП), укажите кратность СЭП, запишите координаты точек.

Сделайте то же самое для одной из частных позиций пространственной группы $P 222_1$. Рассмотрите точки, располагающиеся на оси 2_x .



2. Кристаллы хлорида ртути имеют плотность $5,4 \text{ г/см}^3$. Установите, является этот хлорид каломелью Hg_2Cl_2 или сулемой HgCl_2 , если параметры тетрагональной ячейки каломели

равны $a = 4,47$; $c = 10,85$ Å; число формульных единиц $Z = 2$; параметры ортогональной ячейки сулемы равны $a = 5,96$; $b = 12,74$; $c = 10,85$ Å; число формульных единиц $Z = 4$.

3. Определите параметры решетки одной из модификаций стронция (структурный тип α -Fe). Для решения задачи воспользуйтесь таблицами кристаллохимических радиусов.

4. В кристаллической структуре состава $A_xB_2C_y$ атомы С образуют плотнейшую шаровую упаковку. Атомы А занимают $1/4$ тетраэдрических пустот, а атомы В – все октаэдрические пустоты. Установите состав вещества, вычислив значения x и y .

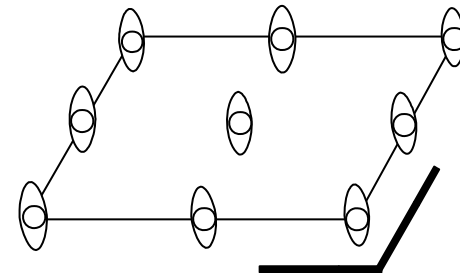
5. Выполняется ли ПШУ в структуре хлорида цезия CsCl? Ответ обоснуйте. Покажите на модели.

6. Назовите КЧ и полиэдры никеля и мышьяка в структуре арсенида никеля NiAs. Покажите на модели.

7. Какова структура вюрцита ZnS по геометрическому признаку? Ответ обоснуйте. Покажите на модели.

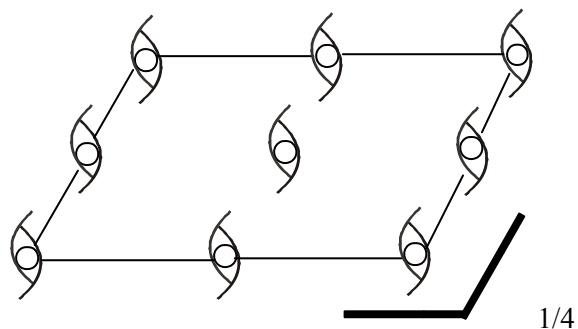
Вариант 8

1. На проекции изображены элементы симметрии для пространственной группы $P 2/m$:



Перечертите проекцию в тетрадь. Определите категорию и сингонию, охарактеризуйте элементарную ячейку. Представьте себе, как проходят все элементы симметрии в ячейке. Нанесите на проекцию точки, представляющие собой одну из частных позиций, а именно: точки располагаются на оси 2 на ребре элементарной ячейки. Укажите кратность СЭП, запишите координаты точек.

Сделайте то же самое для одной из частных позиций пространственной группы $P 2_1/m$. Рассмотрите точки, располагающиеся на плоскости симметрии.



2. Кубическая модификация HgS имеет параметр ячейки $a = 5,84 \text{ \AA}$; число формульных единиц $Z = 4$. Гексагональная модификация HgS имеет параметры $a = 4,16$; $c = 9,54 \text{ \AA}$; число формульных единиц $Z = 3$. Какую модификацию представляют собой кристаллы HgS, если их плотность равна $7,73 \text{ г/см}^3$?

3. Определите параметры решетки одной из модификаций циркония (структурный тип Mg). Для решения задачи воспользуйтесь таблицами кристаллохимических радиусов.

4. В кристаллической структуре состава $A_xB_6C_y$ атомы C образуют плотнейшую шаровую упаковку. Атомы A занимают $3/8$ тетраэдрических пустот, а атомы B – половину октаэдрических пустот. Установите состав вещества, вычислив значения x и y .

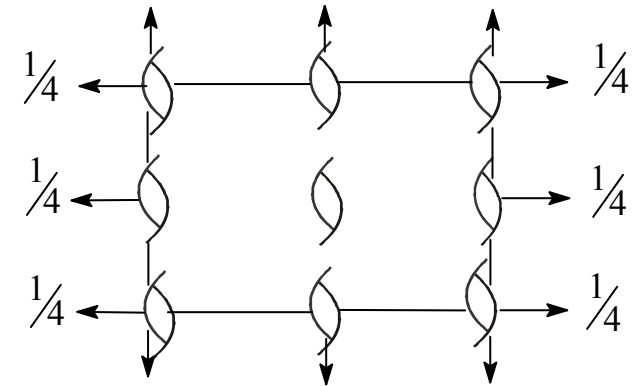
5. Выполняется ли ПШУ в структуре флюорита CaF_2 ? Ответ обоснуйте. Покажите на модели.

6. Назовите КЧ и полиэдр железа в структуре α -Fe. Покажите на модели.

7. Какова структура нитрида бора BN по геометрическому признаку? Ответ обоснуйте. Покажите на модели.

Вариант 9

1. На проекции изображены элементы симметрии для пространственной группы $P 222_1$:



Перечертите проекцию в тетрадь. Определите категорию и сингонию, охарактеризуйте элементарную ячейку. Представьте себе, как проходят все элементы симметрии в ячейке. Нанесите на проекцию точки, представляющие собой общую систему эквивалентных позиций (СЭП), укажите кратность СЭП, запишите координаты точек.

Сделайте то же самое для одной из частных позиций, а именно: точки располагаются на оси 2_y .

2. Предельный углеводород имеет плотность $0,98 \text{ г/см}^3$ и следующие параметры ортогональной ячейки: $a = 7,452$; $b = 4,965$; $c = 81,60 \text{ \AA}$; число формульных единиц $Z = 4$. Установите формулу углеводорода.

3. Определите параметры решетки одной из модификаций циркония (структурный тип $\alpha\text{-Fe}$). Для решения задачи воспользуйтесь таблицами кристаллохимических радиусов.

4. В кристаллической структуре состава $A_xB_{2-x}C_y$ атомы А и В совместно образуют простую гексагональную кладку. Атомы С занимают половину тригонально-призматических пустот. Установите состав вещества, вычислив значение y .

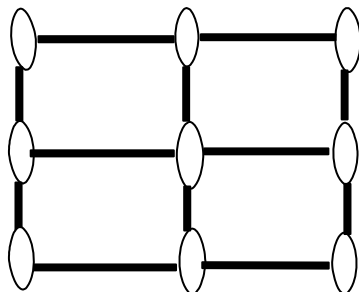
5. Выполняется ли ПШУ в структуре хлорида цезия CsCl ? Ответ обоснуйте. Покажите на модели.

6. Назовите КЧ и полиэдры кальция и фтора в структуре флюорита CaF_2 . Покажите на модели.

7. Какова структура магния по геометрическому признаку? Ответ обоснуйте. Покажите на модели.

Вариант 10

1. На проекции изображены элементы симметрии для пространственной группы $Pmm2$:



Перечертите проекцию в тетрадь. Определите категорию и сингонию, охарактеризуйте элементарную ячейку. Представьте себе, как проходят все элементы симметрии в ячейке. Нанесите на проекцию точки, представляющие собой общую систему эквивалентных позиций (СЭП), укажите кратность СЭП, запишите координаты точек.

Сделайте то же самое для одной из частных позиций, а именно: точки располагаются на оси 2 на грани элементарной ячейки.

2. Параметры моноклинной ячейки галогенида меди равны $a = 6,85$; $b = 6,70$; $c = 3,30 \text{ \AA}$; $\gamma = 121^\circ$; число формульных единиц $Z = 2$. Плотность вещества равна $3,44 \text{ г/см}^3$. Установите формулу галогенида.

3. Определите параметры решетки кристаллов γ -Fe (структурный тип Cu). Для решения задачи воспользуйтесь таблицами кристаллохимических радиусов.

4. В кристаллической структуре состава $A_xB_{2-x}C_y$ атомы А и В совместно образуют простую кубическую кладку. Атомы С занимают половину кубических пустот. Установите состав вещества, вычислив значение y .

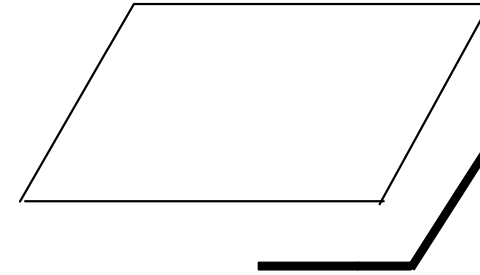
5. Выполняется ли ПШУ в структуре интерметаллида Cu_3Au ? Ответ обоснуйте. Покажите на модели.

6. Назовите КЧ и полиэдры цезия и хлора в структуре хлорида цезия CsCl. Покажите на модели.

7. Какова структура алмаза по геометрическому признаку? Ответ обоснуйте. Покажите на модели.

Вариант 11

1. На проекции изображены элементы симметрии для пространственной группы Pm :



Перечертите проекцию в тетрадь. Определите категорию и сингонию, охарактеризуйте элементарную ячейку. Представьте себе, как проходят все элементы симметрии в ячейке. Нанесите на проекцию точки, представляющие собой общую систему эквивалентных позиций (СЭП), укажите кратность СЭП, запишите координаты точек.

Сделайте то же самое для всевозможных частных позиций.

2. Параметры ортогональной ячейки одной из селитр равны $a = 5,13$; $b = 9,17$; $c = 6,50 \text{ \AA}$; число формульных единиц $Z = 4$. Плотность вещества равна $2,19 \text{ г/см}^3$. Установите, какая это селитра: чилийская (KNO_3), индийская (NaNO_3) или английская (NH_4NO_3).

3. Определите параметры решетки кристаллов бария (структурный тип $\alpha\text{-Fe}$). Для решения задачи воспользуйтесь таблицами кристаллохимических радиусов.

4. Запишите координаты центров кубических пустот в элементарной ячейке простой кубической кладки (начало координат совместите с центром одного из шаров).

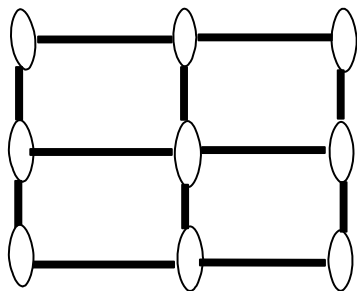
5. Выполняется ли ПШУ в структуре сфалерита ZnS ? Ответ обоснуйте. Покажите на модели.

6. Назовите КЧ и полиэдры бора и азота в структуре нитрида бора BN . Покажите на модели.

7. Каково число формульных единиц в структуре оксида меди (I) Cu_2O ? Покажите на модели.

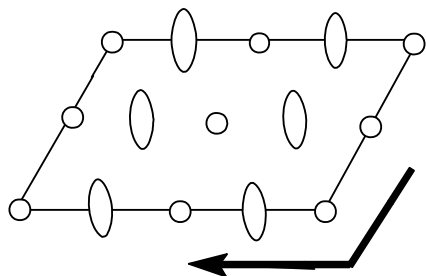
Вариант 12

1. На проекции изображены элементы симметрии для пространственной группы $P\ mm2$:



Перечертите проекцию в тетрадь. Определите категорию и сингонию, охарактеризуйте элементарную ячейку. Представьте себе, как проходят все элементы симметрии в ячейке. Нанесите на проекцию точки, представляющие собой одну из частных позиций, а именно: точки располагаются на плоскости m_x . Укажите кратность СЭП, запишите координаты точек.

Сделайте то же самое для одной из частных позиций пространственной группы $P\ 2/b$. Рассмотрите точки, располагающиеся на оси 2 на грани элементарной ячейки.



2. Кристаллы бромзамещенного бензола имеют состав $C_6H_{6-x}Br_x$. Плотность вещества равна $2,26\text{ г/см}^3$. Параметры моноклинной ячейки равны $a = 15,46$; $b = 5,80$; $c = 4,11\text{ \AA}$; $\gamma = 112,5^\circ$; число формульных единиц $Z = 2$. Установите формульный состав вещества, вычислив значение x .

3. Определите параметры решетки кристаллов α -Fe. Для решения задачи воспользуйтесь таблицами кристаллохимических радиусов.

4. Запишите координаты центров тригонально-призматических пустот в элементарной ячейке простой гексагональной кладки (начало координат совместите с центром одного из шаров).

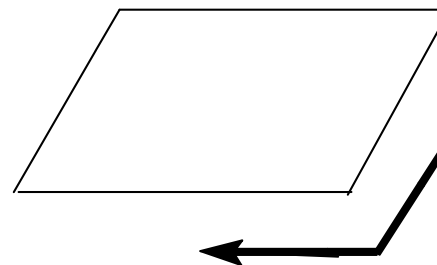
5. Выполняется ли ПШУ в структуре оксида рения ReO_3 ? Ответ обоснуйте. Покажите на модели.

6. Назовите КЧ и полиэдры цинка и серы в структуре вюрцита ZnS . Покажите на модели.

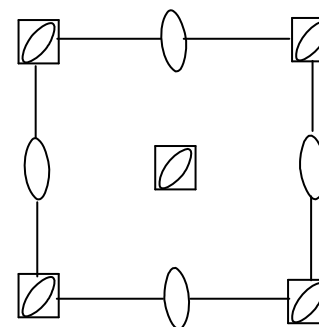
7. Какова структура $\alpha\text{-Fe}$ по геометрическому признаку? Ответ обоснуйте. Покажите на модели.

Вариант 13

1. На проекции изображены элементы симметрии для пространственной группы Pb :



Перечертите проекцию в тетрадь. Определите категорию и сингонию, охарактеризуйте элементарную ячейку. Представьте себе, как проходят все элементы симметрии в ячейке. Нанесите на проекцию точки, представляющие собой общую систему эквивалентных позиций (СЭП), укажите кратность СЭП, запишите координаты точек.



Сделайте то же самое для одной из частных позиций пространственной группы $P\bar{4}$. Рассмотрите точки, располагающиеся на оси $\bar{4}$ внутри элементарной ячейки.

2. Плотность кристаллов одного из галогенидов меди составляет $4,89 \text{ г/см}^3$. Параметры моноклинной ячейки равны $a = 7,18$; $b = 7,14$; $c = 3,46 \text{ \AA}$; $\gamma = 121,15^\circ$; число формульных единиц $Z = 2$. Установите формулу галогенида меди.

3. Определите параметры решетки кристаллов алюминия (структурный тип Cu). Для решения задачи воспользуйтесь таблицами кристаллохимических радиусов.

4. Запишите координаты центров тетрагонально-бипирамидальных пустот в элементарной ячейке объемноцентрированной кубической кладки (начало координат совместите с центром одного из шаров).

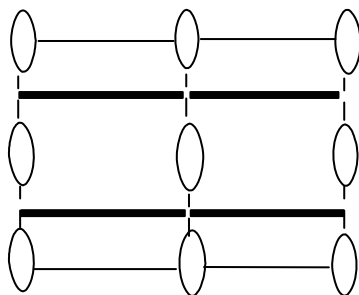
5. Выполняется ли ПШУ в структуре меди? Ответ обоснуйте. Покажите на модели.

6. Назовите КЧ и полиэдры цинка и серы в структуре сфалерита ZnS . Покажите на модели.

7. Какова структура флюорита CaF_2 по геометрическому признаку? Ответ обоснуйте. Покажите на модели.

Вариант 14

1. На проекции изображены элементы симметрии для пространственной группы $Pm2$:



Перечертите проекцию в тетрадь. Определите категорию и сингонию, охарактеризуйте элементарную ячейку. Представьте себе, как проходят все элементы симметрии в ячейке. Нанесите

на проекцию точки, представляющие собой общую систему эквивалентных позиций (СЭП), укажите кратность СЭП, запишите координаты точек.

Сделайте то же самое для одной из частных позиций, а именно: точки располагаются на оси 2.

2. Плотность кристаллогидрата сульфата магния составляет $1,75 \text{ г/см}^3$. Параметры моноклинной ячейки равны $a = 10,0$; $b = 24,3$; $c = 7,2 \text{ \AA}$; $\gamma = 98,6^\circ$; число формульных единиц $Z = 8$. Установите количество молекул воды в формульной единице и запишите формулу кристаллогидрата сульфата магния.

3. Определите параметры решетки кристаллов меди. Для решения задачи воспользуйтесь таблицами кристаллохимических радиусов.

4. Запишите координаты центров октаэдрических пустот в элементарной ячейке двуслойной плотнейшей упаковки (начало координат совместите с центром одного из шаров).

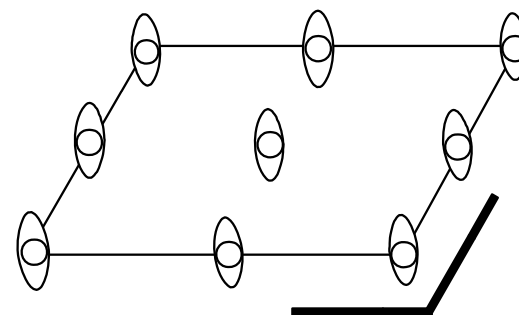
5. Выполняется ли ПШУ в структуре ртути? Ответ обоснуйте. Покажите на модели.

6. Назовите КЧ и полиэдр углерода в структуре графита. Покажите на модели.

7. Каково число формульных единиц в структуре перовскита CaTiO_3 ? Покажите на модели.

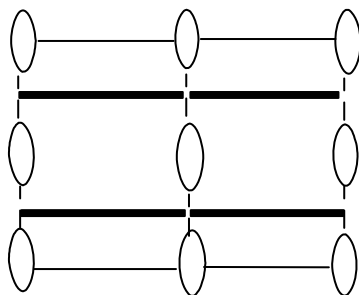
Вариант 15

1. На проекции изображены элементы симметрии для пространственной группы $P 2/m$:



Перечертите проекцию в тетрадь. Определите категорию и сингонию, охарактеризуйте элементарную ячейку. Представьте себе, как проходят все элементы симметрии в ячейке. Нанесите на проекцию точки, представляющие собой общую систему эквивалентных позиций (СЭП), укажите кратность СЭП, запишите координаты точек.

Сделайте то же самое для одной из частных позиций пространственной группы $P 6_3/m 2$. Рассмотрите точки, располагающиеся на плоскости m .



2. Плотность кристаллогидрата сульфата кальция составляет $2,32 \text{ г/см}^3$. Параметры моноклинной ячейки равны $a = 10,47$; $b = 6,28$; $c = 15,15 \text{ \AA}$; $\gamma = 99,0^\circ$; число формульных единиц $Z = 8$. Установите количество молекул воды в формульной единице и запишите формулу кристаллогидрата сульфата кальция.

3. Определите параметры решетки кристаллов интерметаллического соединения MgLa (структурный тип CsCl). Для решения задачи воспользуйтесь таблицами кристаллохимических радиусов.

4. В кристаллической структуре состава $\text{A}_2\text{B}_3\text{C}_x$ атомы А и С совместно образуют плотнейшую шаровую упаковку, а атомы В занимают $1/4$ тетраэдрических пустот. Установите состав вещества, вычислив значение x .

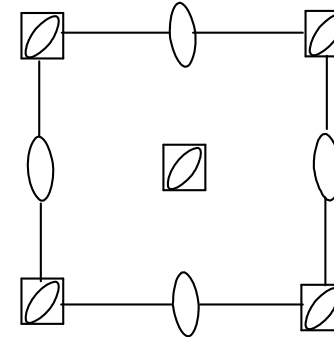
5. Из предложенных моделей структур выберите структуры, в которых выполняется ПШУ. Ответ обоснуйте.

6. Что представляет собой элементарная ячейка в структуре борида алюминия AlB_2 ? Каков тип ячейки? Ответ обоснуйте. Покажите на модели.

7. Каково число формульных единиц в структуре $\alpha\text{-Fe}$? Покажите на модели.

Вариант 16

1. На проекции изображены элементы симметрии для пространственной группы $P\bar{4}$:



Перечертите проекцию в тетрадь. Определите категорию и сингонию, охарактеризуйте элементарную ячейку. Представьте себе, как проходят все элементы симметрии в ячейке. Нанесите на проекцию точки, представляющие собой две частные системы эквивалентных позиций (СЭП), а именно: 1) точки располагаются на оси $\bar{4}$ на ребре элементарной ячейки; 2) точки, располагаются на оси 2. Укажите кратность каждой СЭП, запишите координаты точек.

2. Плотность кристаллогидрата сульфата цинка составляет $1,97 \text{ г/см}^3$. Параметры ортогональной ячейки равны $a = 11,85$; $b = 12,09$; $c = 6,83 \text{ \AA}$; число формульных единиц $Z = 4$. Установите количество молекул воды в формульной единице и запишите формулу кристаллогидрата сульфата цинка.

3. Определите параметры решетки кристаллов хлорида натрия NaCl. Для решения задачи воспользуйтесь таблицами кристаллохимических радиусов.

4. Запишите координаты центров тетраэдрических пустот в элементарной ячейке двуслойной плотнейшей упаковки (начало координат совместите с центром одного из шаров).

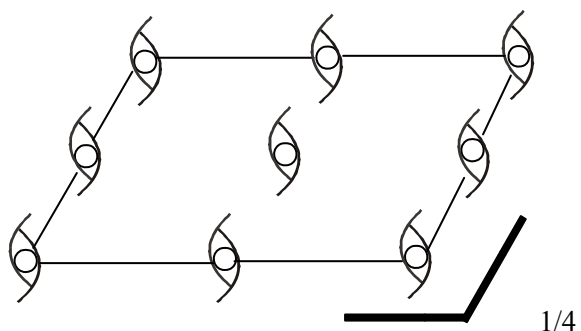
5. Из предложенных моделей структур выберите структуры, в которых выполняется объемноцентрированная кубическая кладка. Ответ обоснуйте.

6. Что представляет собой элементарная ячейка в структуре интерметаллида Fe_3Al ? Каков тип ячейки? Ответ обоснуйте. Покажите на модели.

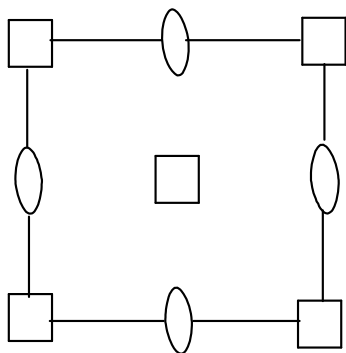
7. Каково число формульных единиц в структуре лонсдейлита? Покажите на модели.

Вариант 17

1. На проекции изображены элементы симметрии для пространственной группы $P 2_1/m$:



Перечертите проекцию в тетрадь. Определите категорию и сингонию, охарактеризуйте элементарную ячейку. Представьте себе, как проходят все элементы симметрии в ячейке. Нанесите на проекцию точки, представляющие собой общую систему эквивалентных позиций (СЭП), укажите кратность СЭП, запишите координаты точек.



Сделайте то же самое для одной из частных позиций пространственной группы $P4$. Рассмотрите точки, располагающиеся на оси 4 на ребре элементарной ячейки.

2. Плотность кристаллогидрата сульфата бериллия составляет $1,96 \text{ г/см}^3$. Параметры тетрагональной ячейки равны $a = 8,02$; $b = 10,75 \text{ \AA}$; число формульных единиц $Z = 4$. Установите количество молекул воды в формульной единице и запишите формулу кристаллогидрата сульфата бериллия.

3. Определите параметры решетки кристаллов интерметаллического соединения Mg_2Sn (структурный тип CaF_2). Для решения задачи воспользуйтесь таблицами кристаллохимических радиусов.

4. Запишите координаты центров октаэдрических пустот в элементарной ячейке трехслойной плотнейшей упаковки (начало координат совместите с центром одного из шаров).

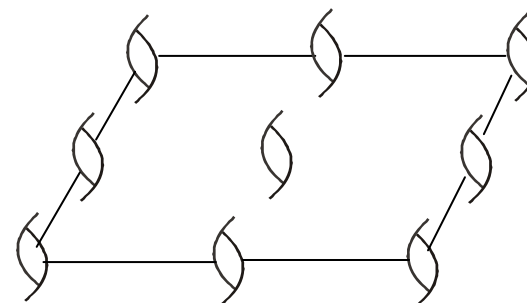
5. Выполняется ли ПШУ в структуре вюрцита ZnS ? Ответ обоснуйте. Покажите на модели.

6. Что представляет собой элементарная ячейка в структуре ртути? Каков тип ячейки? Ответ обоснуйте. Покажите на модели.

7. Каково число формульных единиц в структуре оксида меди (I) Cu_2O ? Покажите на модели.

Вариант 18

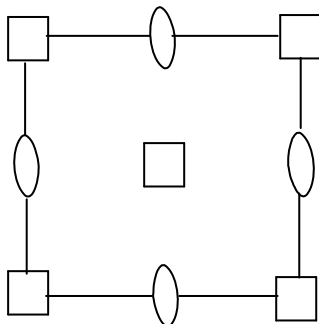
1. На проекции изображены элементы симметрии для пространственной группы $P2_1$:



Перечертите проекцию в тетрадь. Определите категорию и сингонию, охарактеризуйте элементарную ячейку. Представьте себе, как проходят все элементы симметрии в ячейке. Нанесите

на проекцию точки, представляющие собой общую систему эквивалентных позиций (СЭП), укажите кратность СЭП, запишите координаты точек.

Сделайте то же самое для одной из частных позиций пространственной группы $P4$. Рассмотрите точки, располагающиеся на оси 2.



2. Плотность кристаллогидрата хлорида кальция составляет $1,72 \text{ г/см}^3$. Параметры гексагональной ячейки равны $a = 7,86$; $b = 3,91 \text{ \AA}$; число формульных единиц $Z = 1$. Установите количество молекул воды в формульной единице и запишите формулу кристаллогидрата хлорида кальция.

3. Определите параметры решетки кристаллов алмаза. Для решения задачи воспользуйтесь таблицами кристаллохимических радиусов.

4. Запишите координаты центров тетраэдрических пустот в элементарной ячейке трехслойной плотнейшей упаковки (начало координат совместите с центром одного из шаров).

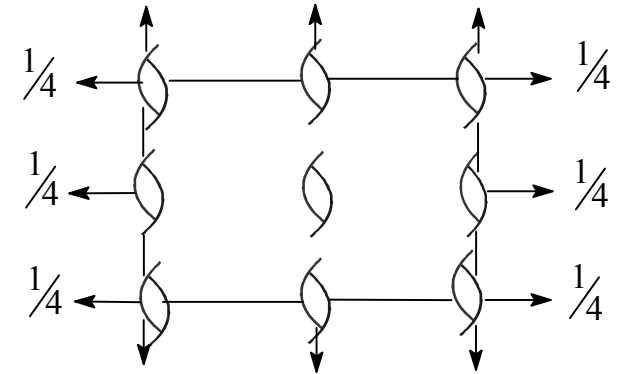
5. Какова структура ртути по геометрическому признаку? Ответ обоснуйте. Покажите на модели.

6. Выполняется ли ПШУ в структуре интерметаллида Fe_3Al ? Ответ обоснуйте. Покажите на модели.

7. Что представляет собой элементарная ячейка в структуре индия? Каков тип ячейки? Ответ обоснуйте. Покажите на модели.

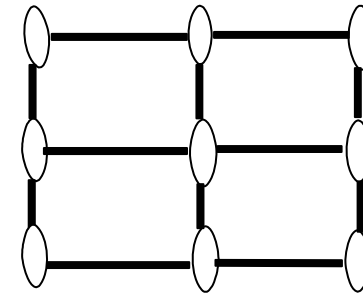
Вариант 19

1. На проекции изображены элементы симметрии для пространственной группы $P222_1$:



Перечертите проекцию в тетрадь. Определите категорию и сингонию, охарактеризуйте элементарную ячейку. Представьте себе, как проходят все элементы симметрии в ячейке. Нанесите на проекцию точки, представляющие собой общую систему эквивалентных позиций (СЭП), укажите кратность СЭП, запишите координаты точек.

Сделайте то же самое для одной из частных позиций пространственной группы $P\ mm2$. Рассмотрите точки, располагающиеся на оси 2 на ребре элементарной ячейки.



2. Плотность алюмокалиевых квасцов $KAl(SO_4)_2 \cdot xH_2O$ составляет $1,75\text{ г/см}^3$. Параметр кубической ячейки равен $a = 12,13\text{ \AA}$; число формульных единиц $Z = 4$. Установите количество молекул воды в формульной единице и запишите формулу алюмокалиевых квасцов.

3. Определите параметры решетки кристаллов хлорида стронция $SrCl_2$ (структурный тип CaF_2). Для решения задачи воспользуйтесь таблицами кристаллохимических радиусов.

4. В кристаллической структуре состава A_3B_x атомы В образуют объемноцентрированную кубическую кладку, а атомы А занимают все тетрагонально-бипирамидальные пустоты. Установите состав вещества, вычислив значение x .

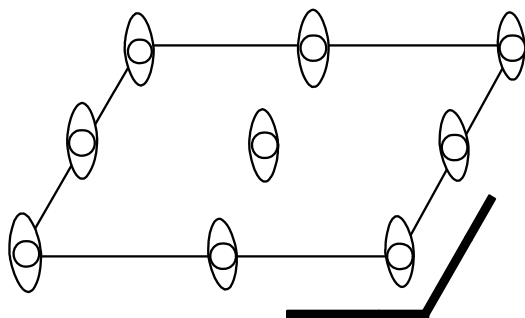
5. Какова структура арсенида никеля NiAs по геометрическому признаку? Ответ обоснуйте. Покажите на модели.

6. Выполняется ли ПШУ в структуре борида алюминия AlB_2 ? Ответ обоснуйте. Покажите на модели.

7. Что представляет собой элементарная ячейка в структуре магния? Каков тип ячейки? Ответ обоснуйте. Покажите на модели.

Вариант 20

1. На проекции изображены элементы симметрии для пространственной группы $P 2/m$:



Перечертите проекцию в тетрадь. Определите категорию и сингонию, охарактеризуйте элементарную ячейку. Представьте себе, как проходят все элементы симметрии в ячейке. Нанесите на проекцию точки, представляющие собой общую систему эквивалентных позиций (СЭП), укажите кратность СЭП, запишите координаты точек.

Сделайте то же самое для одной из частных позиций, а именно: точки располагаются на оси 2 внутри элементарной ячейки.

2. Плотность кристаллов кремния (структурный тип алмаза) составляет $2,23 \text{ г/см}^3$. Рассчитайте параметр кубической ячейки и кратчайшее межатомное расстояние в структуре кремния.

3. Определите параметры решетки кристаллов бериллия (структурный тип Mg). Для решения задачи воспользуйтесь таблицами кристаллохимических радиусов.

4. В кристаллической структуре состава AB_x атомы В образуют простую гексагональную кладку, а атомы А занимают половину тригонально-призматических пустот. Установите состав вещества, вычислив значение x .

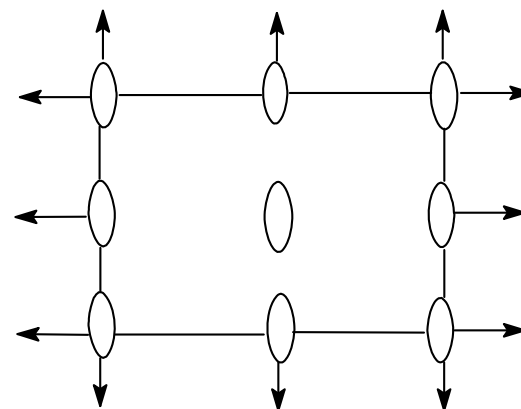
5. Какова структура оксида рения ReO_3 по геометрическому признаку? Ответ обоснуйте. Покажите на модели.

6. Выполняется ли ПШУ в структуре меди? Ответ обоснуйте. Покажите на модели.

7. Что представляет собой элементарная ячейка в структуре интерметаллида $CuAu$? Каков тип ячейки? Ответ обоснуйте. Покажите на модели.

Вариант 21

1. На проекции изображены элементы симметрии для пространственной группы $P 222$:



Перечертите проекцию в тетрадь. Определите категорию и сингонию, охарактеризуйте элементарную ячейку. Представьте себе, как проходят все элементы симметрии в ячейке. Нанесите на проекцию точки, представляющие собой общую систему эквивалентных позиций (СЭП), укажите кратность СЭП, запишите координаты точек.

Сделайте то же самое для одной из частных позиций, а именно: точки располагаются на оси 2_x .

2. Плотность кристаллов теллурида бериллия BeTe (структурный тип сфалерита) составляет $5,59 \text{ г/см}^3$. Рассчитайте параметр кубической ячейки и кратчайшее межатомное расстояние $\text{Be} - \text{Te}$ в структуре теллурида бериллия.

3. Определите параметры решетки кристаллов магния. Для решения задачи воспользуйтесь таблицами кристаллохимических радиусов.

4. В кристаллической структуре состава $\text{A}_2\text{B}_{x-2}\text{C}_x$ атомы А и С совместно образуют простую кубическую кладку, а атомы В занимают половину кубических пустот. Установите состав вещества, вычислив значение x .

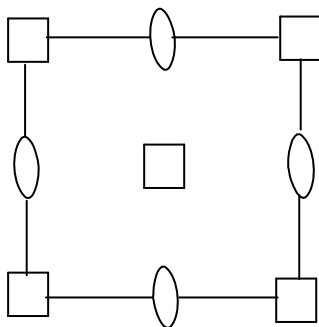
5. Какова структура оксида рения ReO_3 по геометрическому признаку? Ответ обоснуйте. Покажите на модели.

6. Выполняется ли ПШУ в структуре интерметаллида Cu_3Au ? Ответ обоснуйте. Покажите на модели.

7. Каково число формульных единиц в структуре индия? Покажите на модели.

Вариант 22

1. На проекции изображены элементы симметрии для пространственной группы Р 4:



Перечертите проекцию в тетрадь. Определите категорию и сингонию, охарактеризуйте элементарную ячейку. Представьте себе, как проходят все элементы симметрии в ячейке. Нанесите на проекцию точки, представляющие собой общую систему эк-

вивалентных позиций (СЭП), укажите кратность СЭП, запишите координаты точек.

Сделайте то же самое для одной из частных позиций, а именно: точки располагаются на оси 2.

2. Плотность кристаллов поваренной соли составляет $2,163 \text{ г/см}^3$. Рассчитайте параметр кубической ячейки и кратчайшее межатомное расстояние Na – Cl в структуре поваренной соли.

3. Определите параметры решетки кристаллов хлорида цезия. Для решения задачи воспользуйтесь таблицами кристаллохимических радиусов.

4. В кристаллической структуре состава ABC_2 атомы С образуют плотнейшую шаровую упаковку. Координационное число атомов А равно 6, а атомов В – 4. Каков тип занятых пустот? Какая часть пустот каждого типа занята?

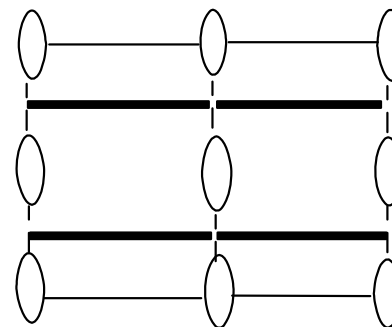
5. Выполняется ли ПШУ в структуре оксида меди (I) Cu_2O ? Ответ обоснуйте. Покажите на модели.

6. Что представляет собой элементарная ячейка в структуре магния? Каков тип ячейки? Ответ обоснуйте. Покажите на модели.

7. Каково число формульных единиц в структуре флюорита CaF_2 ? Покажите на модели.

Вариант 23

1. На проекции изображены элементы симметрии для пространственной группы $P 2_1/a$:



Перечертите проекцию в тетрадь. Определите категорию и сингонию, охарактеризуйте элементарную ячейку. Представьте

себе, как проходят все элементы симметрии в ячейке. Нанесите на проекцию точки, представляющие собой две частные системы эквивалентных позиций (СЭП), а именно: 1) точки располагаются на плоскости m ; 2) точки, располагаются на оси 2. Укажите кратность каждой СЭП, запишите координаты точек.

2. Плотность кубических кристаллов интерметаллического соединения Cu_3Au составляет $12,2 \text{ г/см}^3$. Рассчитайте параметр ячейки и кратчайшее межатомное расстояние $\text{Cu} - \text{Au}$ в структуре Cu_3Au .

3. Определите параметры решетки кристаллов оксида магния (структурный тип NaCl). Для решения задачи воспользуйтесь таблицами кристаллохимических радиусов.

4. В кристаллической структуре состава $\text{A}_x\text{B}_{8-y}\text{C}_y$ атомы В и С совместно образуют простую кубическую кладку, а атомы А занимают $1/4$ кубических пустот. Установите состав вещества, вычислив значение x .

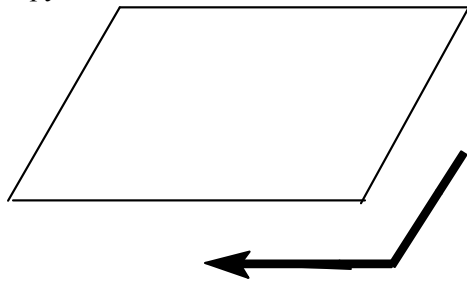
5. Какова структура борида алюминия AlB_2 по геометрическому признаку? Ответ обоснуйте. Покажите на модели.

6. Назовите КЧ и полиэдры железа и алюминия в структуре интерметаллида Fe_3Al . Покажите на модели.

7. Что представляет собой элементарная ячейка в структуре индия? Каков тип ячейки? Ответ обоснуйте. Покажите на модели.

Вариант 24

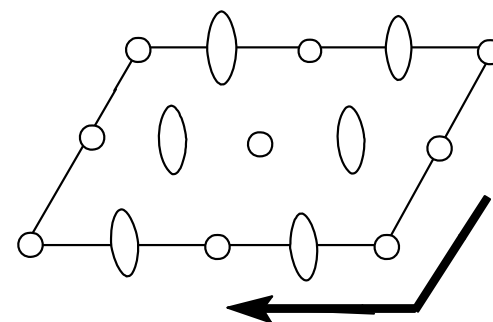
1. На проекции изображены элементы симметрии для пространственной группы $P6$:



Перечертите проекцию в тетрадь. Определите категорию и сингонию, охарактеризуйте элементарную ячейку. Представьте

себе, как проходят все элементы симметрии в ячейке. Нанесите на проекцию точки, представляющие собой общую систему эквивалентных позиций (СЭП), укажите кратность СЭП, запишите координаты точек.

Сделайте то же самое для одной из частных позиций пространственной группы $P 2/b$. Рассмотрите точки, располагающиеся на оси 2 внутри элементарной ячейки.



2. Плотность кристаллов хлорида калия (структурный тип NaCl) составляет $1,98 \text{ г/см}^3$. Рассчитайте параметр ячейки и кратчайшее межатомное расстояние K – Cl в структуре KCl.

3. Определите параметры решетки кристаллов NaI (структурный тип NaCl). Для решения задачи воспользуйтесь таблицами кристаллохимических радиусов.

4. В кристаллической структуре состава $A_6B_xC_2$ атомы B и C совместно образуют объемноцентрированную кубическую кладку, а атомы A занимают половину тетрагонально-бипирамидальных пустот. Установите состав вещества, вычислив значение x .

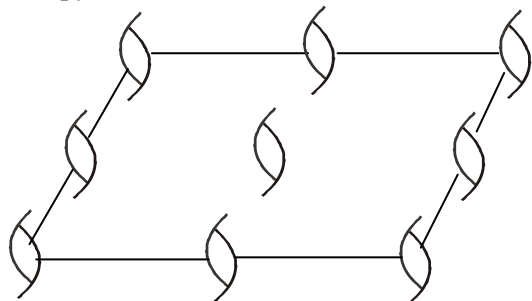
5. Выполняется ли ПШУ в структуре магния? Ответ обоснуйте. Покажите на модели.

6. Что представляет собой элементарная ячейка в структуре алмаза? Каков тип ячейки? Ответ обоснуйте. Покажите на модели.

7. Каково число формульных единиц в структуре интерметаллического соединения CuAu? Покажите на модели.

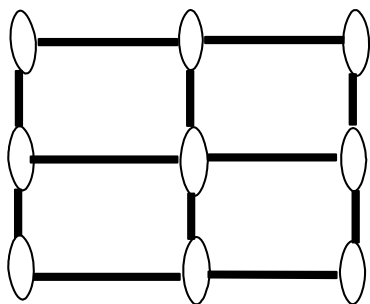
Вариант 25

1. На проекции изображены элементы симметрии для пространственной группы $P 2_1$:



Перечертите проекцию в тетрадь. Определите категорию и сингонию, охарактеризуйте элементарную ячейку. Представьте себе, как проходят все элементы симметрии в ячейке. Нанесите на проекцию точки, представляющие собой общую систему эквивалентных позиций (СЭП), укажите кратность СЭП, запишите координаты точек.

Сделайте то же самое для одной из частных позиций пространственной группы $P mm2$. Рассмотрите точки, располагающиеся на плоскости m_y .



2. Плотность кристаллов бромида калия (структурный тип NaCl) составляет $2,75 \text{ г/см}^3$. Рассчитайте параметр ячейки и кратчайшее межатомное расстояние К – Вг в структуре КВг.

3. Определите параметры решетки кристаллов флюорита CaF_2 . Для решения задачи воспользуйтесь таблицами кристаллохимических радиусов.

4. В кристаллической структуре состава A_3B_x атомы А образуют плотнейшую шаровую упаковку, а атомы В занимают $2/3$ октаэдрических пустот. Установите состав вещества, вычислив значение x .

5. Выполняется ли ПШУ в структуре сфалерита ZnS ? Ответ обоснуйте. Покажите на модели.

6. Что представляет собой элементарная ячейка в структуре интерметаллического соединения $CuAu$? Каков тип ячейки? Ответ обоснуйте. Покажите на модели.

7. Каково число формульных единиц в структуре хлорида цезия? Покажите на модели.

СИСТЕМАТИЧЕСКАЯ КРИСТАЛЛОХИМИЯ

Примерные вопросы к коллоквиуму

1. Вопрос по символам пространственных групп. Расшифруйте символ пространственной группы $I m\bar{3}$. Укажите категорию, сингонию, охарактеризуйте элементарную ячейку. Опишите, в каких кристаллографических направлениях проходят в ячейке присутствующие элементы симметрии.

2. Вопрос по классификации кристаллических структур. Какими: гомодесмическими или гетеродесмическими – являются кристаллические структуры CO , TiN , K_2CO_3 ? К какому типу структур (по геометрическому признаку) они относятся? Ответ обоснуйте.

3. Вопрос о влиянии характера химических связей на структурный мотив. Какой тип связи может быть у структур класса $P\bar{3}K_r-DC$? Приведите примеры и проиллюстрируйте их на конкретных моделях.

4. Вопрос по плотным и плотнейшим шаровым кладкам и упаковкам. Можно ли описать структуру соединения AB в терминах ПШУ (ПШК), если координационное число атомов A и B равно 4, причем у атомов A полиэдр квадрат, у атомов B полиэдр тетраэдр.

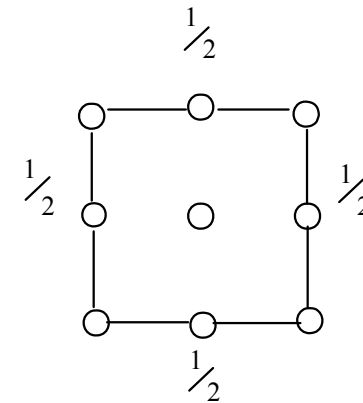
5. Вопрос по кристаллохимии металлов и интерметаллидов. К какому типу интерметаллидов можно отнести соединение Ag_5Al_3 ? Ответ обоснуйте.

6. Вопрос по кристаллохимии простых веществ-неметаллов. Особенности кристаллохимии углерода. Почему аналоги углерода по подгруппе не образуют структур, подобных графиту?

7. Вопрос по кристаллохимии бинарных соединений. Почему структурный тип $NiAs$ больше распространен среди бинарных соединений переходных металлов, чем структурный тип $NaCl$? Ответ обоснуйте.

8. Вопрос по кристаллохимии тройных соединений. Свойства нормальной или обращенной шпинели будет проявлять соединение $CaFe_2O_4$? Ответ обоснуйте. Приведите необходимые расчеты.

9. Вопрос на описание кристаллических структур с помощью проекций. Одна из модификаций кальция имеет структуру, описываемую проекцией вида



Соотношение параметров ячейки $a = b = c$; $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$. К какому структурному типу относится эта структура. Опишите ее.

10. Вопрос на выбор структурного типа. К какому структурному типу может относиться структура BaS, если ионный радиус Ba^{2+} равен $1,38 \text{ \AA}$, а ионный радиус S^{2-} – $1,82 \text{ \AA}$.

ОПИСАНИЕ НЕКОТОРЫХ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СТРУКТУР

1. α -Полоний (α -Po). Атомы располагаются в вершинах кубической ячейки.

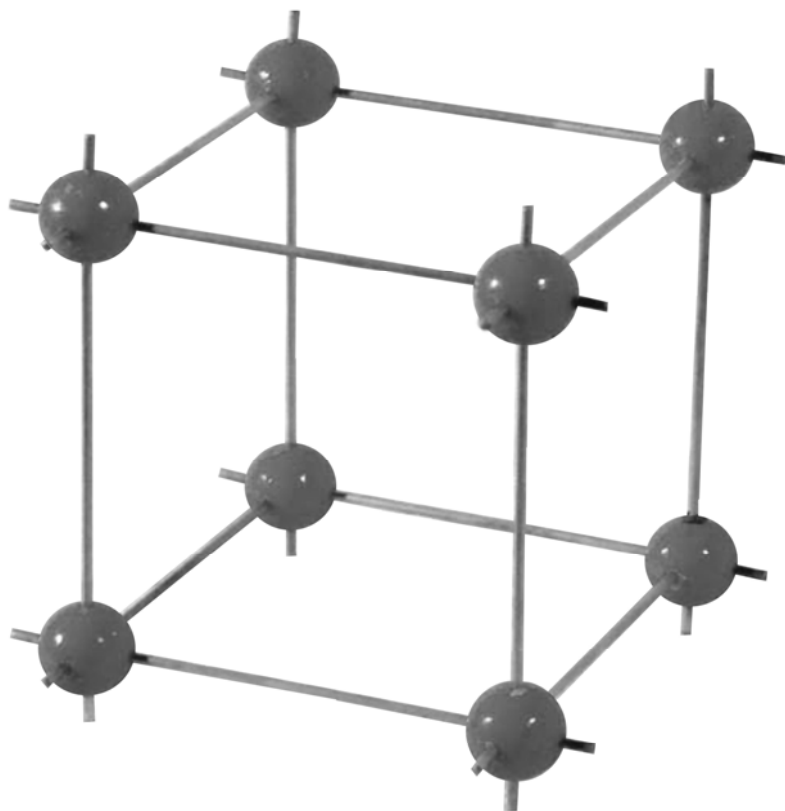


Рис.1. Модель кристаллической структуры α -Po

2. α -Железо (α -Fe). Атомы располагаются в вершинах и в центре кубической ячейки.

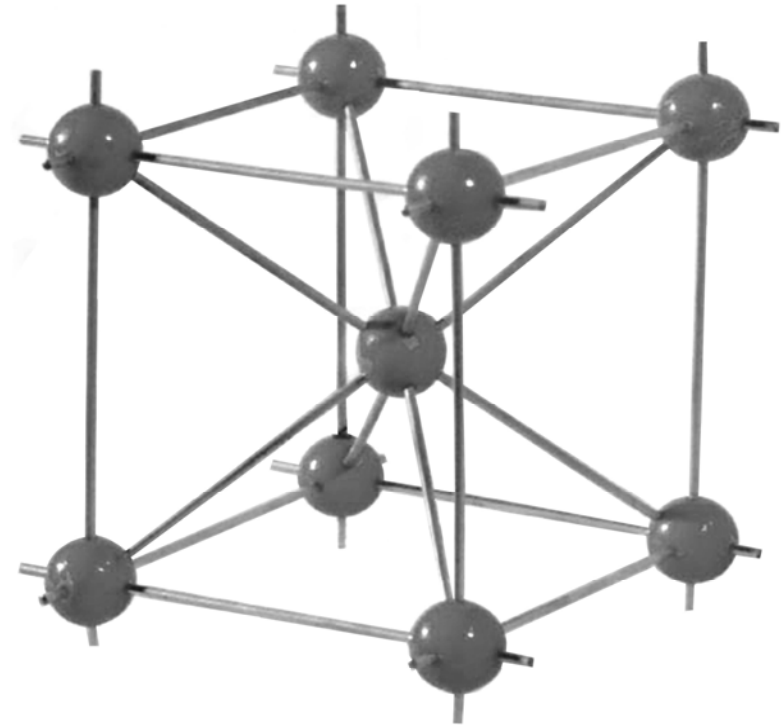


Рис.2. Модель кристаллической структуры α -Fe

3. Медь (Cu). Атомы располагаются в вершинах и в центрах всех граней кубической ячейки.

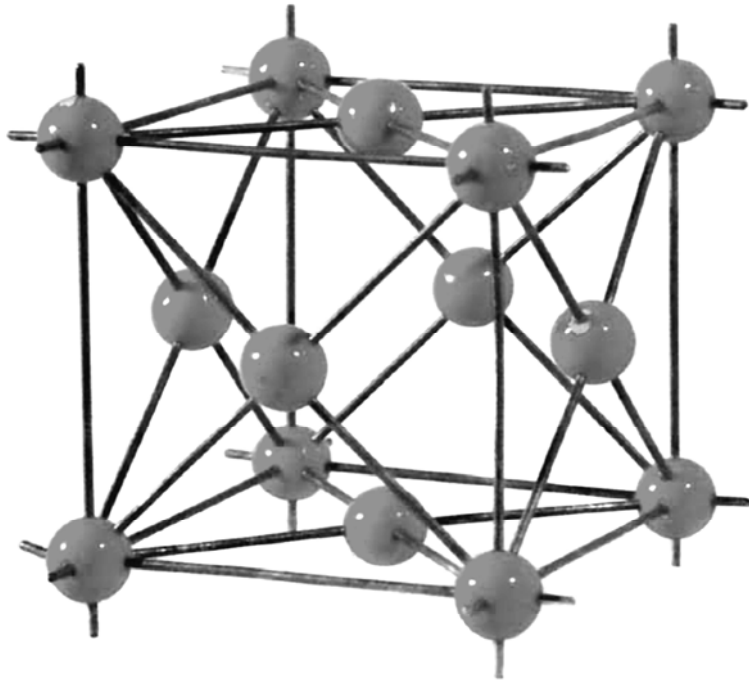


Рис.3. Модель кристаллической структуры меди

4. Индий (In). Атомы в вершинах и в центре тетрагональной ячейки. Отношение параметров $c/a = 1,52$.

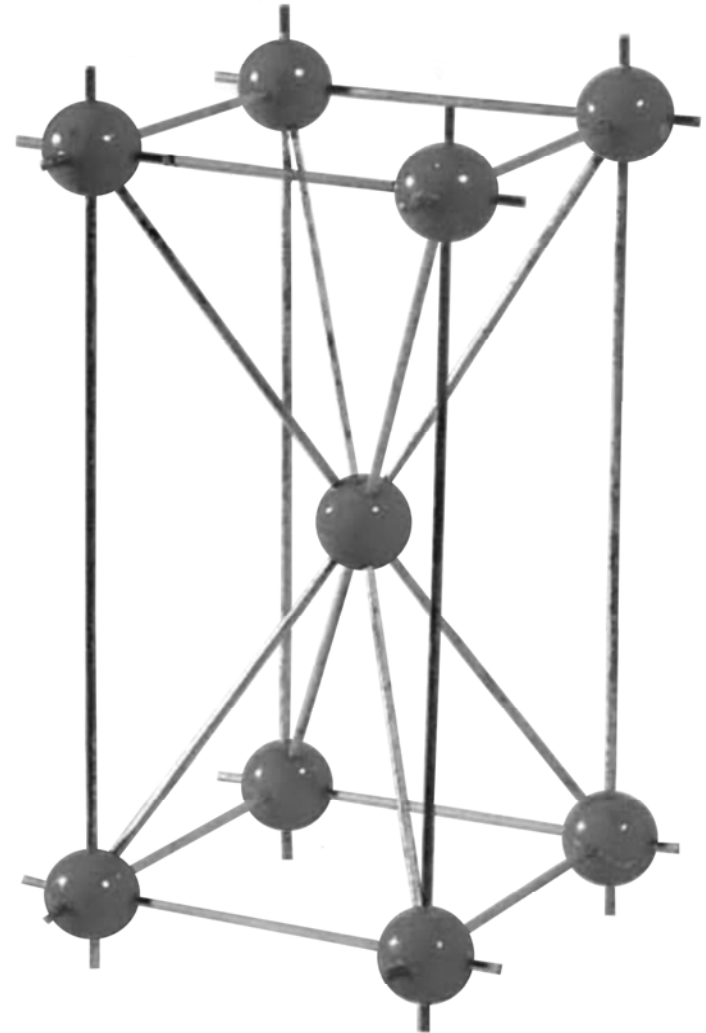


Рис.4. Модель кристаллической структуры индия

5. Ртуть (Hg). Атомы в вершинах гексагональной ячейки; еще два атома на большой объемной диагонали ячейки (они делят эту диагональ на три равные части). Отношение параметров $c/a = 1,92$.

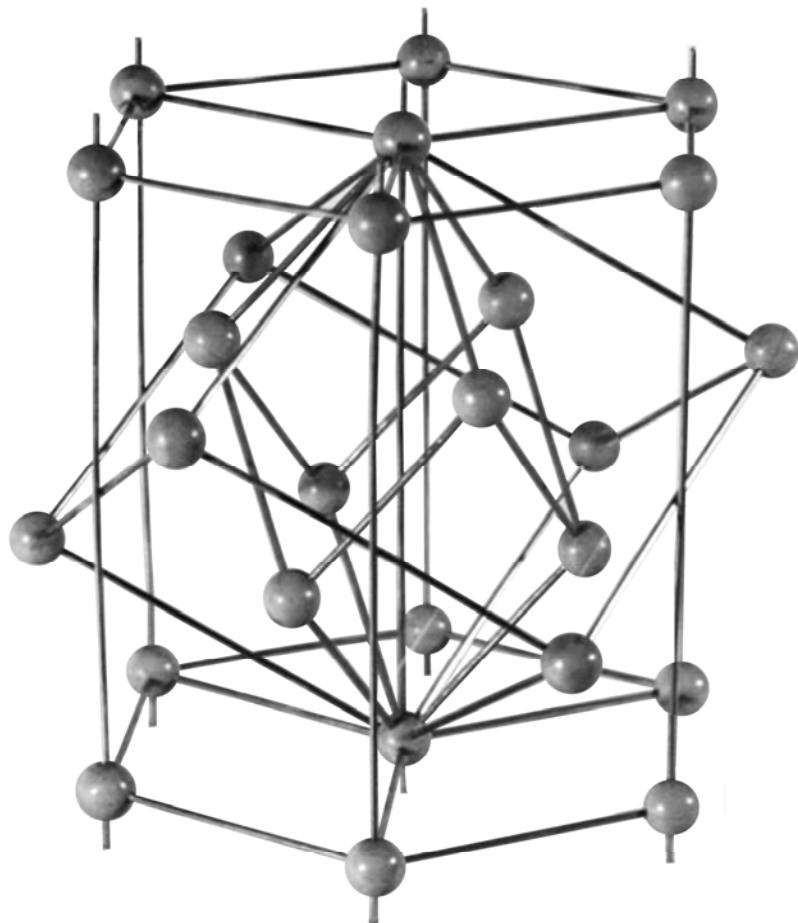


Рис.5. Модель кристаллической структуры ртути

6. Магний (Mg). Атомы располагаются в вершинах гексагональной ячейки и в центре одной из двух тригональных призм, на которые делится элементарная ячейка (ромбическая призма) плоскостью, проходящей через малые объемные диагонали. Отношение параметров $c/a = 1,63$.

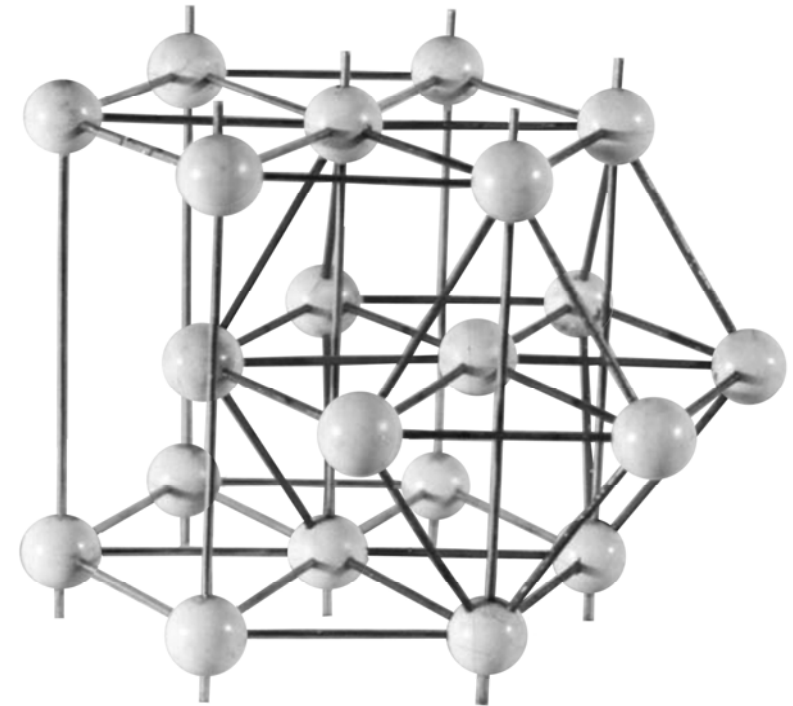


Рис.6. Модель кристаллической структуры магния

7. Интерметаллид Fe_3Al . Атомы Al в вершинах кубической ячейки и в центрах всех ее граней; атомы Fe в серединах всех ребер ячейки, в ее центре, а также в центрах восьми октантов.

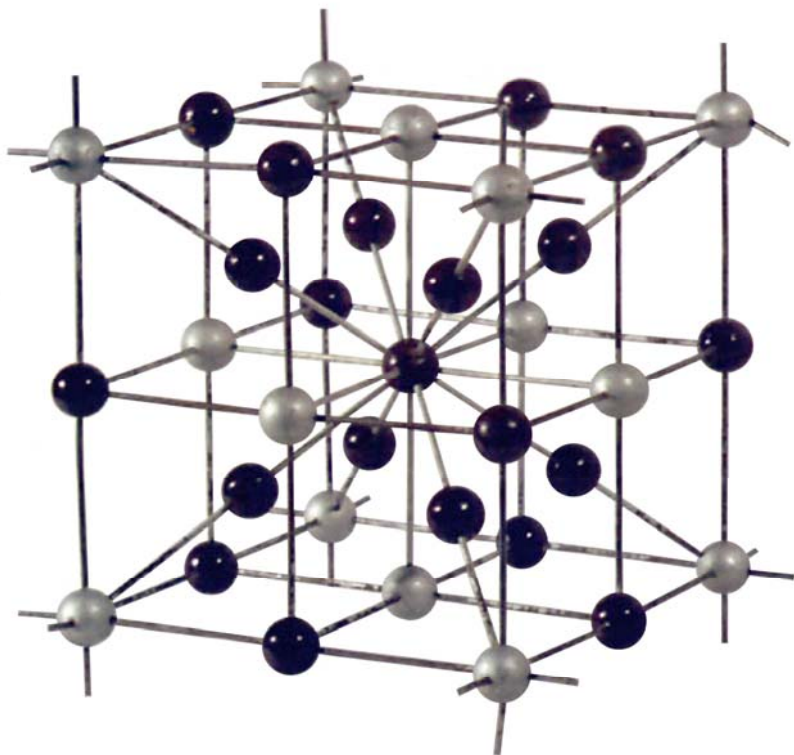


Рис.7. Модель кристаллической структуры Fe_3Al

8. Интерметаллид Cu_3Au . Атомы Au располагаются в вершинах кубической ячейки, атомы Cu – в центрах всех граней.

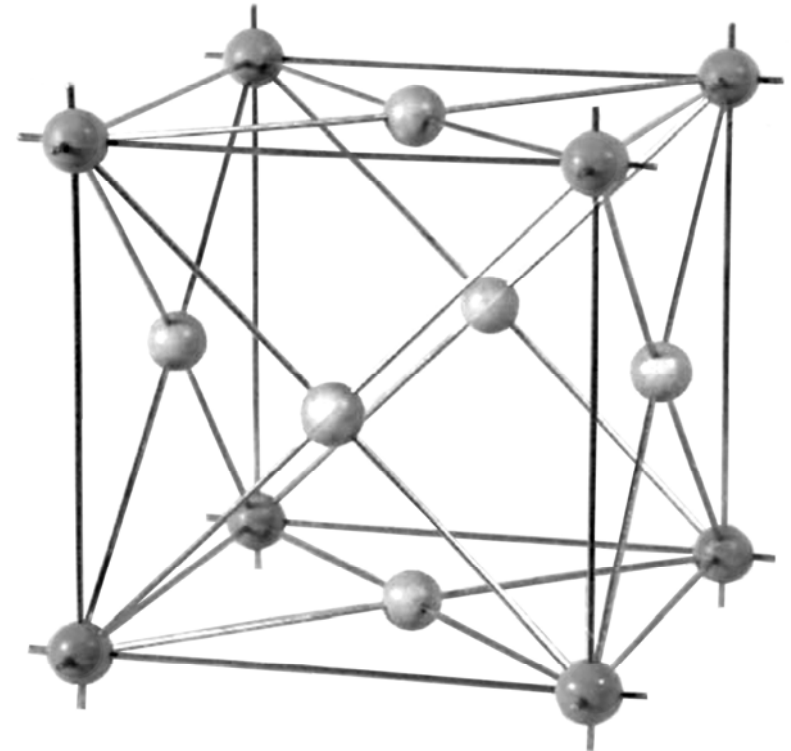


Рис.8. Модель кристаллической структуры Cu_3Au

9. Интерметаллид CuAu. Атомы Cu располагаются в вершинах тетрагональной ячейки, атом Au – в ее центре. Отношение параметров $c/a = 1,41$. Для псевдокубической структуры, которой соответствует приведенная на рисунке модель, отношение параметров $c/a = 1,07$.

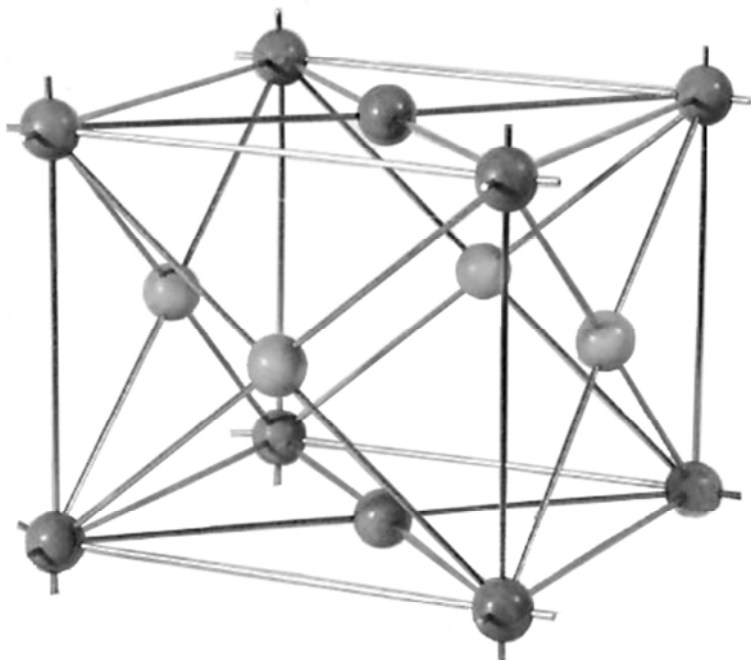


Рис.9. Модель кристаллической структуры CuAu

10. Алмаз (C). Атомы располагаются в вершинах кубической ячейки, в центрах всех ее граней и в центрах четырех октантов (в шахматном порядке).

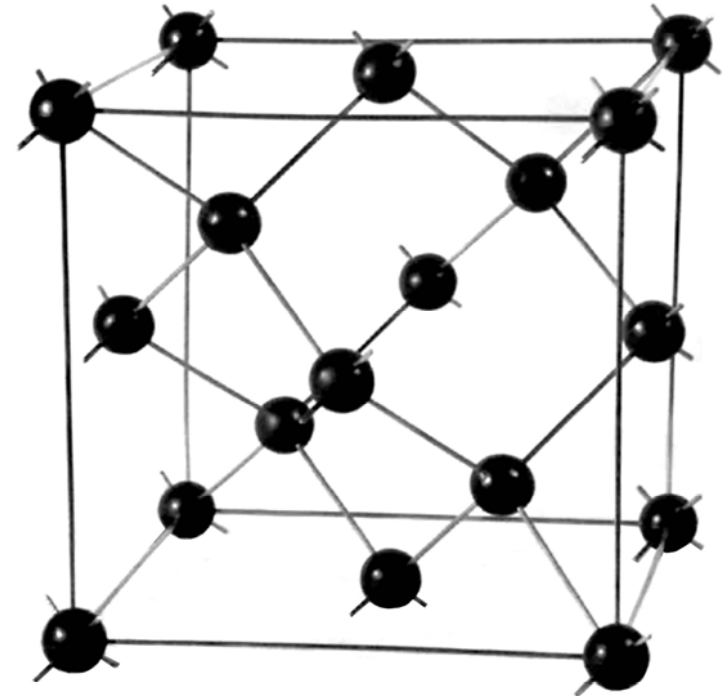


Рис.10. Модель кристаллической структуры алмаза

11. α -Графит (C). Атомы С образуют слои, состоящие из сопряженных правильных шестиугольников. Слои формируются по закону АВАВАВ...; слой В сдвинут относительно слоя А на величину вектора, равного связи С–С. Отношение параметров $c/a = 2,72$. Атомы углерода располагаются в вершинах гексагональной ячейки; на серединах четырех боковых ребер; в центре одной из двух тригональных призм, на которые делится элементарная ячейка (ромбическая призма) плоскостью, проходящей через малые объемные диагонали; по одному атому – на нижней и верхней гранях ячейки в центрах треугольников, образующихся делением основания ячейки малой диагональю.

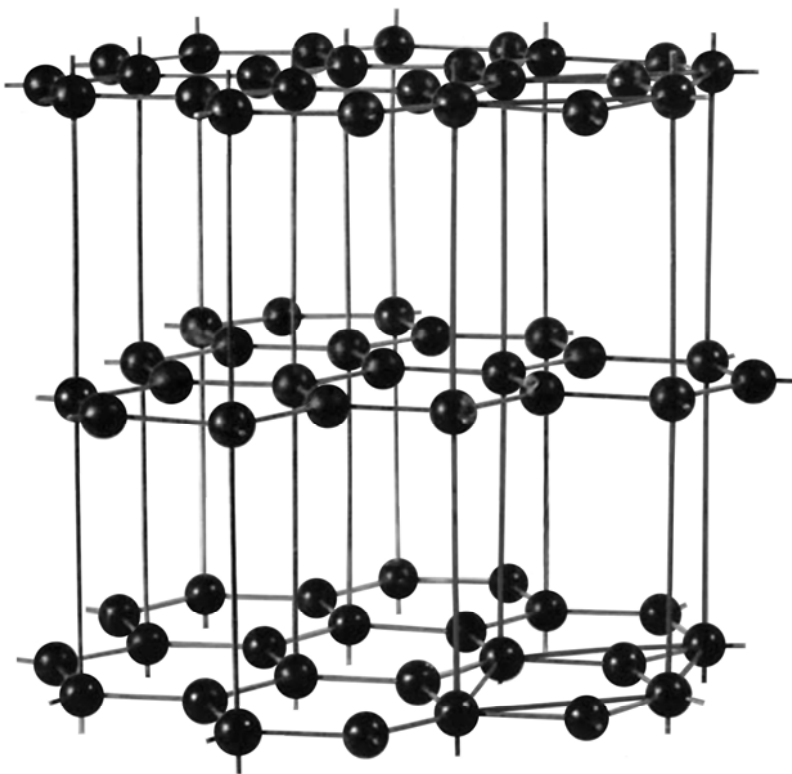
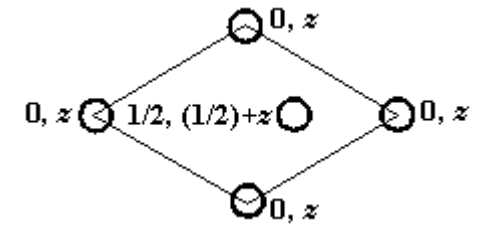


Рис.11. Модель кристаллической структуры α -графита

12. Лонсдейлит (С). Гексагональная ячейка с отношением параметров $c/a = 1,63$.



Координаты атомов:

$0, 0, 0; 0, 0, z; 1/3, 2/3, 1/2; 1/3, 2/3, (1/2)+z$, где $z = 3/8$.

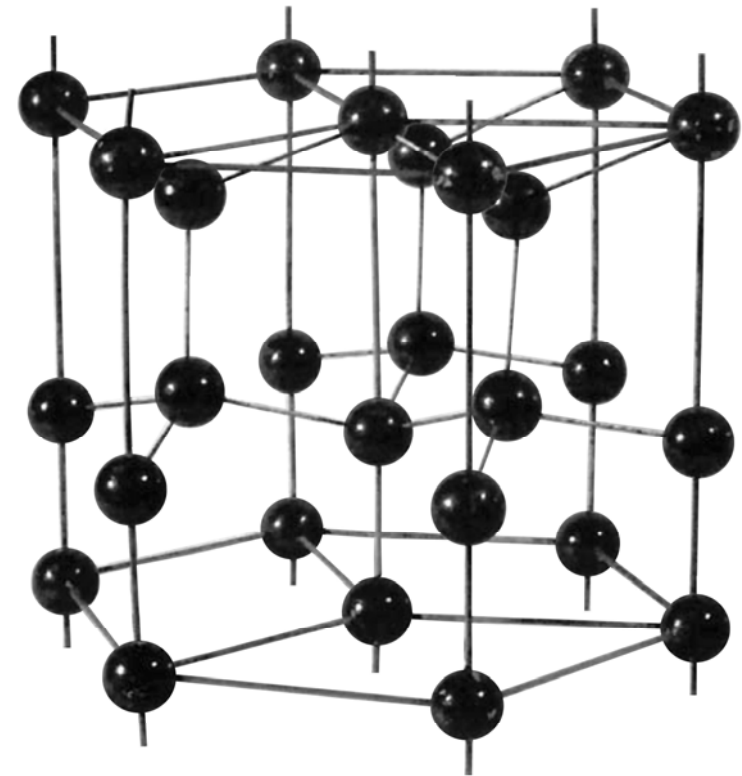


Рис.12. Модель кристаллической структуры лонсдейлита

13. Хлорид натрия (NaCl). Атомы Cl располагаются в вершинах кубической ячейки и в центрах всех ее граней, атомы Na – в центре ячейки и в серединах всех ребер.

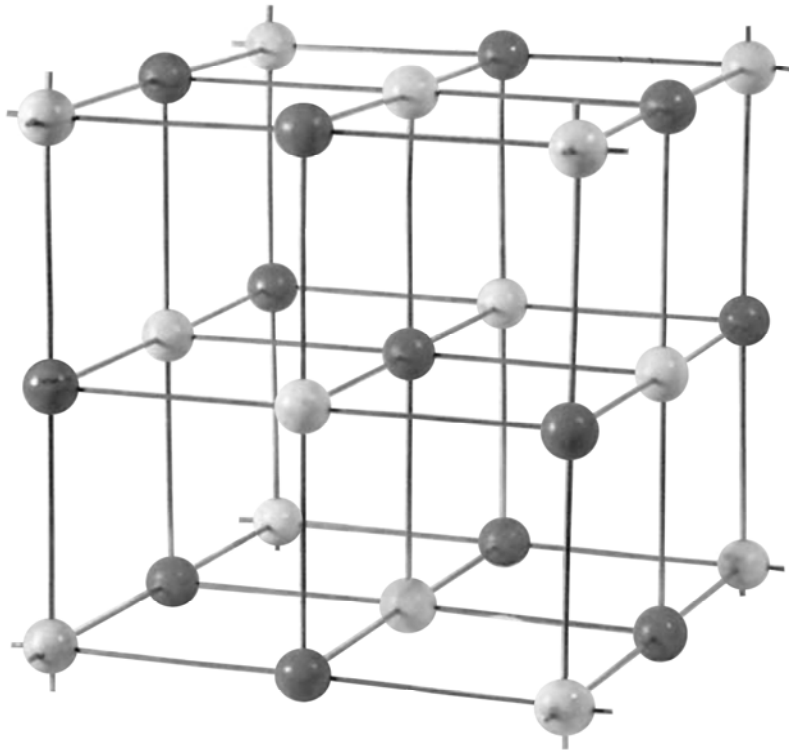


Рис.13. Модель кристаллической структуры NaCl

14. Хлорид цезия (CsCl). Атомы Cl располагаются в вершинах кубической ячейки, Cs – в ее центре.

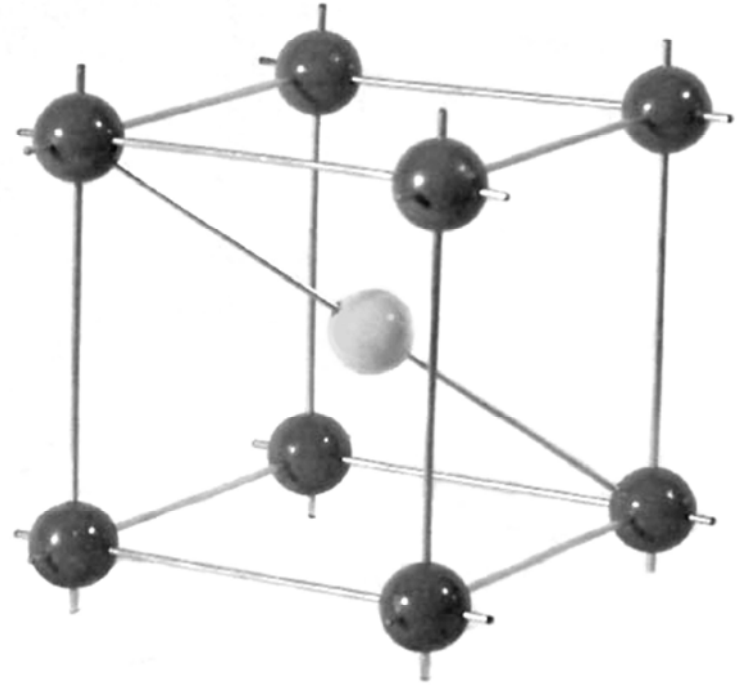


Рис. 14. Модель кристаллической структуры CsCl

15. Флюорит (CaF_2). Атомы Ca располагаются в вершинах кубической ячейки и в центрах всех ее граней, атомы F занимают центры всех восьми октантов.

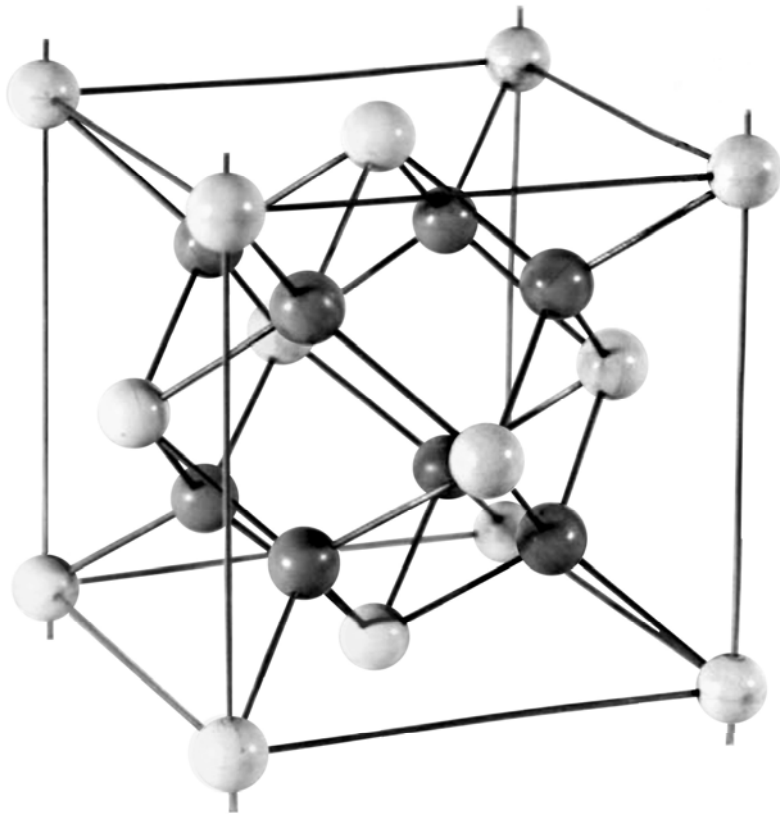


Рис.15. Модель кристаллической структуры флюорита

16. Сфалерит (ZnS). Атомы S располагаются в вершинах кубической ячейки и в центрах всех ее граней, атомы Zn – в центрах четырех октантов (в шахматном порядке).

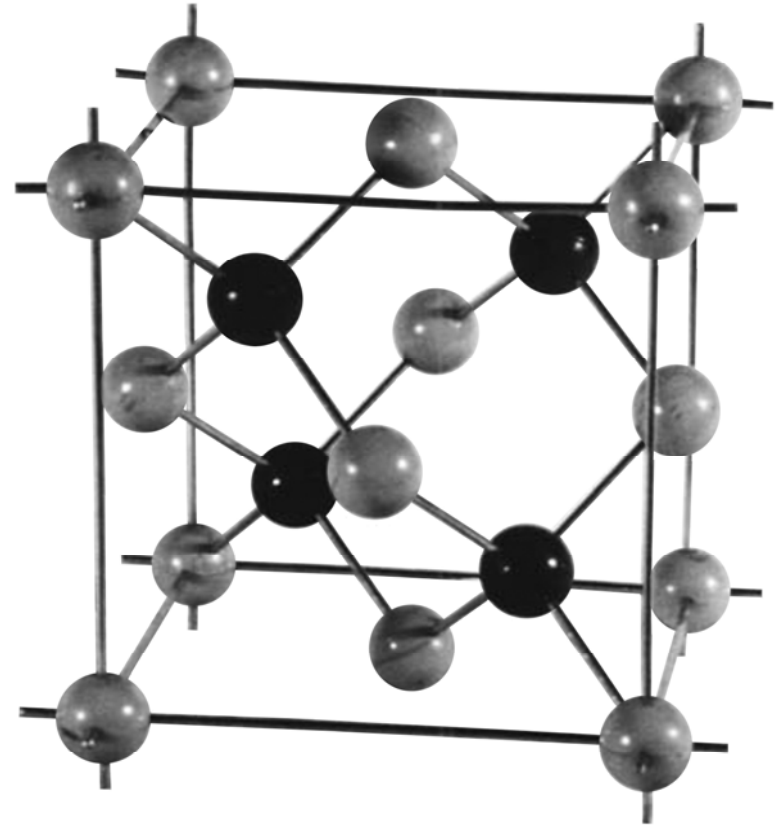
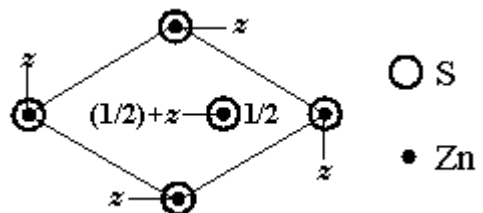


Рис.16. Модель кристаллической структуры сфалерита

17. Вюрцит (ZnS). Гексагональная ячейка с отношением параметров $c/a = 1,64$.



Координаты атомов:

S: $0, 0, 0; 1/3, 2/3, 1/2$

Zn: $0, 0, z; 1/3, 2/3, (1/2)+z$, где $z = 3/8$.

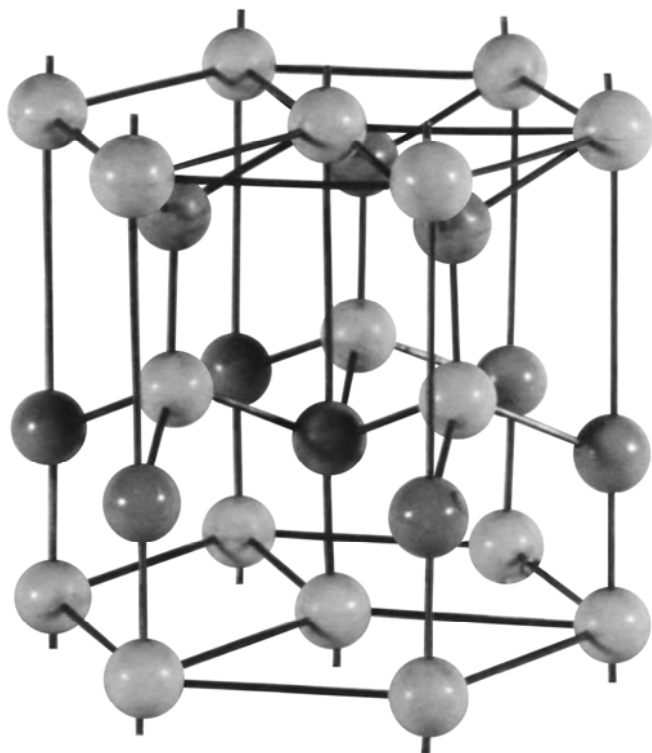


Рис.17. Модель кристаллической структуры вюрцита

18. Борид алюминия (AlB_2). Атомы Al в вершинах гексагональной ячейки, атомы B в центрах обеих тригональных призм, на которые делится гексагональный параллелепипед плоскостью, проходящей через малые объемные диагонали ячейки. Отношение параметров $c/a = 1,08$.

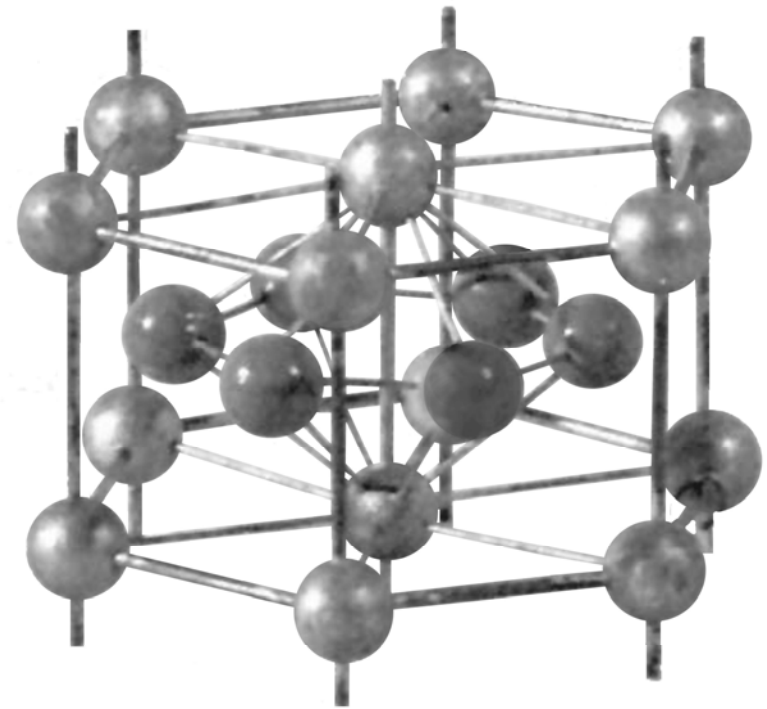


Рис.18. Модель кристаллической структуры AlB_2

19. Нитрид бора (BN). Атомы В и N, чередуясь (атом В окружен атомами N, атом N окружен атомами В), образуют слои, состоящие из сопряженных правильных шестиугольников. Слои налагаются так, что шестичленные циклы находятся друг над другом (атомы В над атомами N, атомы N над атомами В). Отношение параметров $c/a = 2,66$.

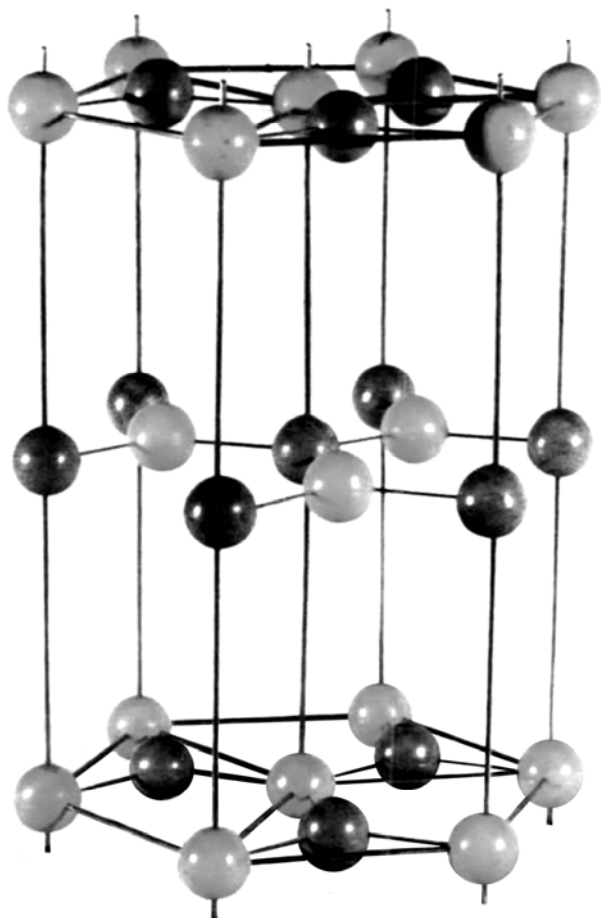
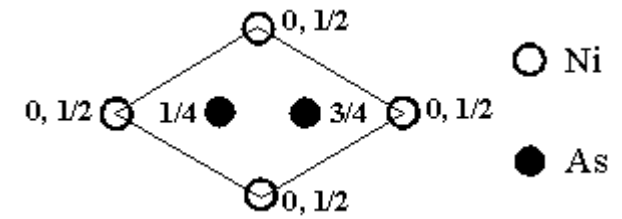


Рис.19. Модель кристаллической структуры BN

20. Арсенид никеля (NiAs). Гексагональная ячейка с отношением параметров $c/a = 1,39$.



Координаты атомов:

Ni: 0, 0, 0; 0, 0, 1/2

As: 2/3, 1/3, 1/4; 1/3, 2/3, 3/4.

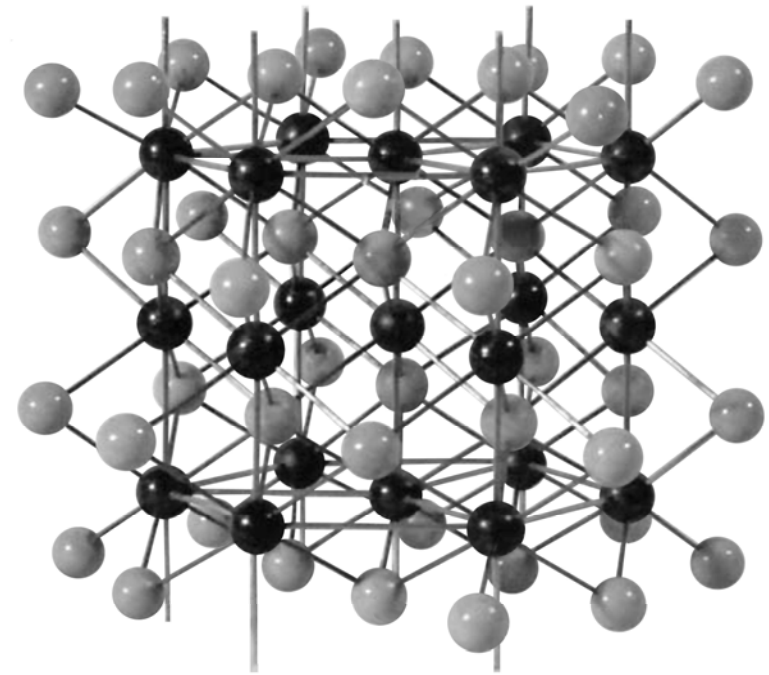


Рис.20. Модель кристаллической структуры NiAs

21. Оксид меди (Cu_2O). Атомы O в вершинах и в центре кубической ячейки; атомы Cu в центрах четырех из восьми октантов (в шахматном порядке).

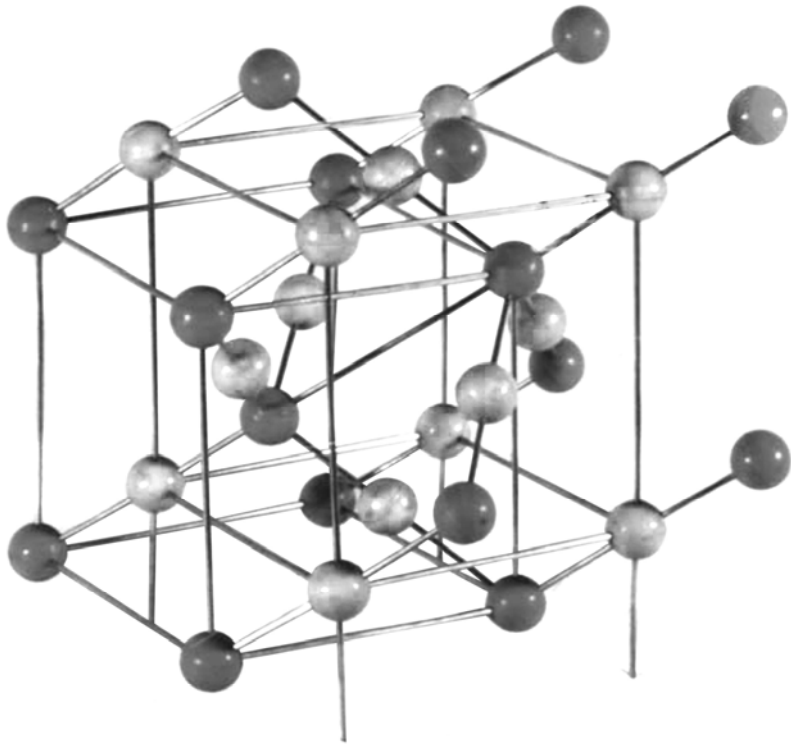


Рис.21. Модель кристаллической структуры Cu_2O

22. Оксид рения (ReO_3). Атомы Re в вершинах кубической ячейки; атомы O в серединах всех ее ребер

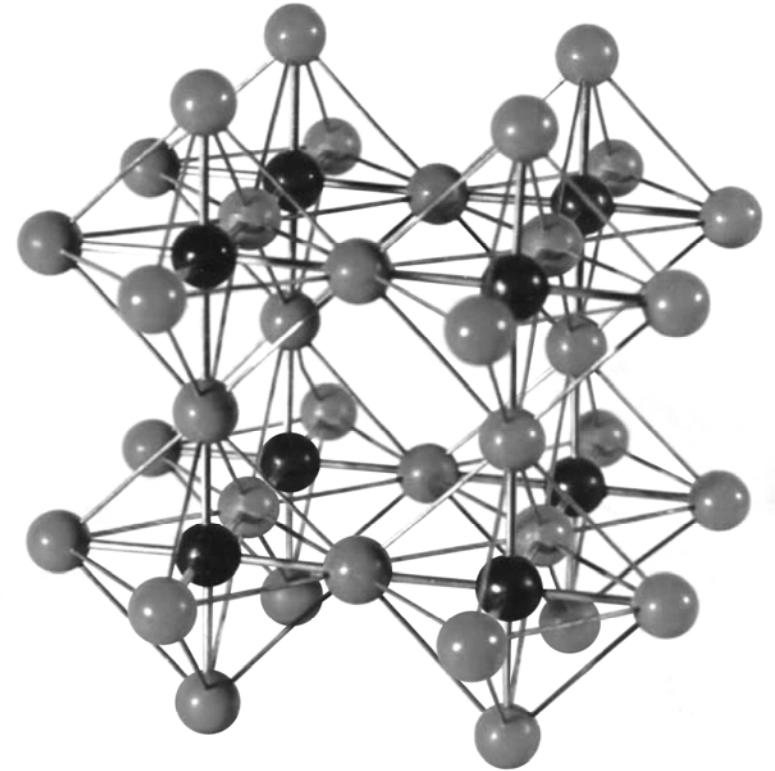


Рис.22. Модель кристаллической структуры ReO_3

23. Перовскит (CaTiO_3). Атомы Ti располагаются в вершинах кубической ячейки, атомы Ca – в ее центре, атомы O – в серединах всех ребер ячейки.

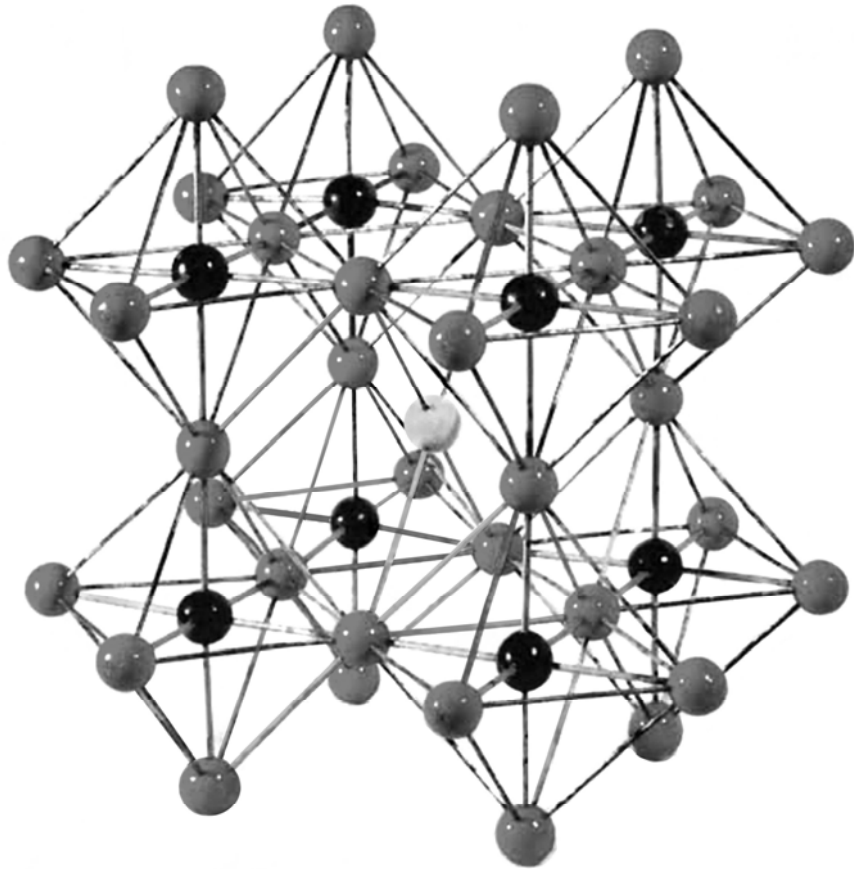


Рис.23. Модель кристаллической структуры перовскита

ИЛЛЮСТРАЦИИ К КУРСУ ЛЕКЦИЙ

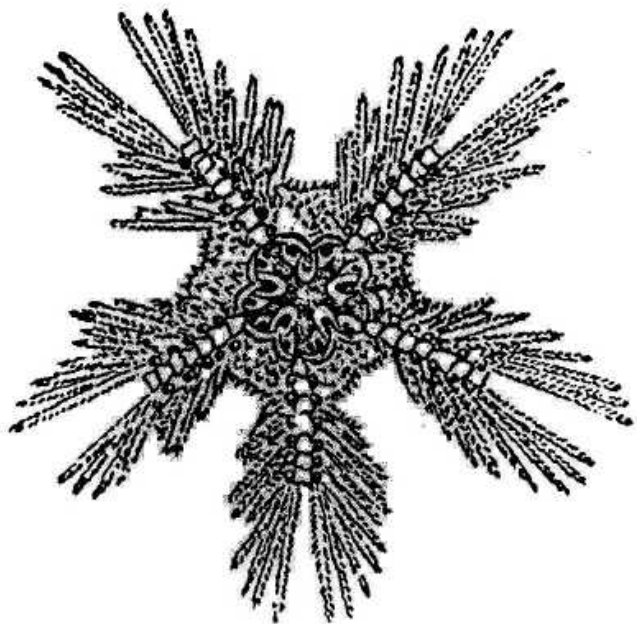


Рис. 24. Морская звезда с симметрией 5m

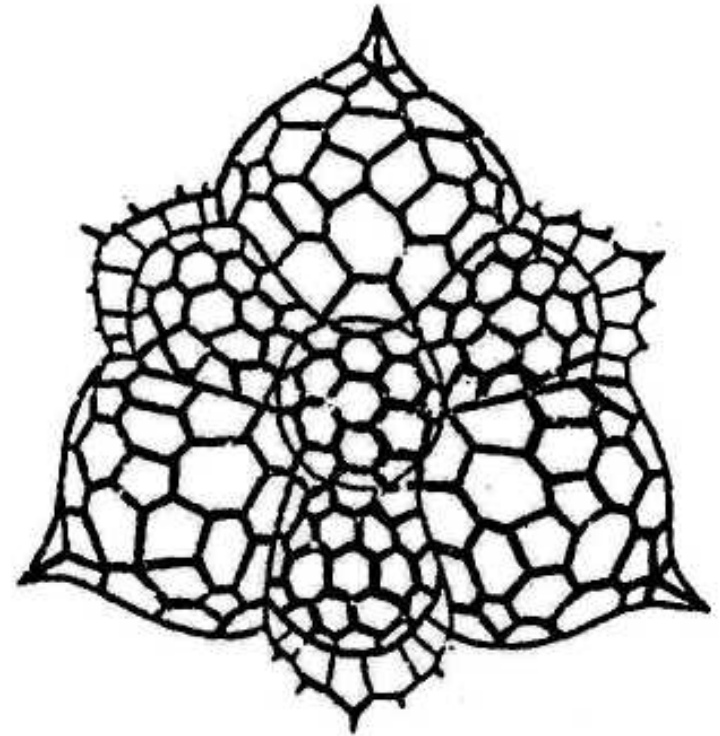


Рис. 25. Пример организма с симметрией $3m$



Рис. 26. Альпийский цветок с симметрией $5m$

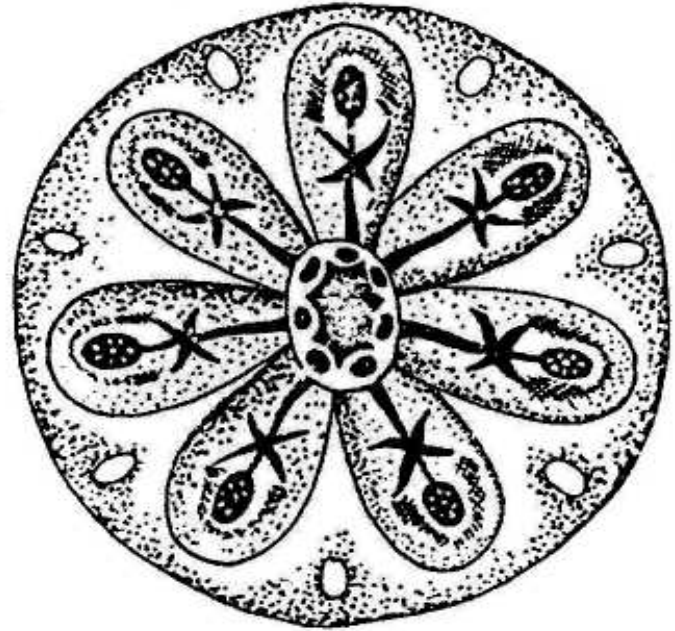


Рис. 27. Пример организма с симметрией 7m

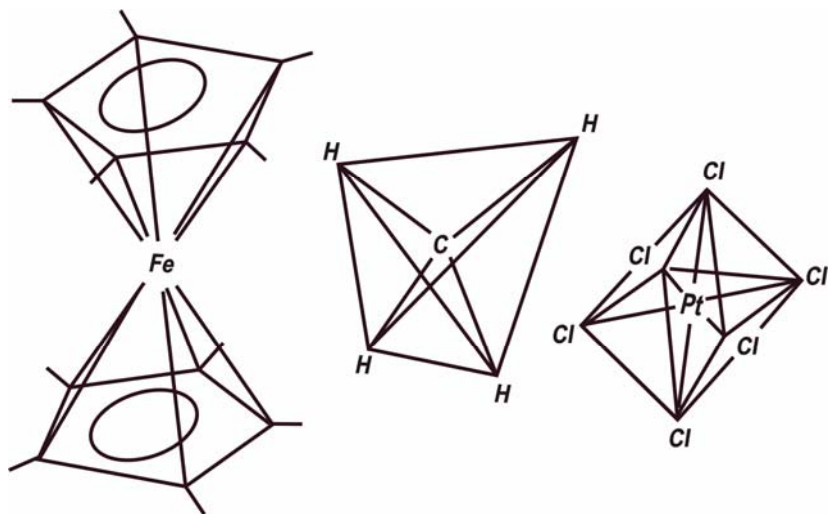


Рис. 28. Молекулы ферроцена $\text{Fe}(\text{C}_5\text{H}_5)_2$ с осью $\bar{5}$;
 метана CH_4 с осью $\bar{4}$;
 аниона PtCl_6^{2-} с осями 4 и $\bar{4}$ одновременно

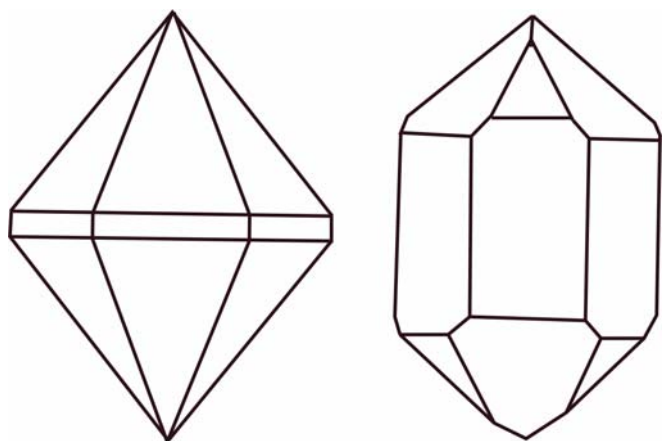


Рис. 29. Кристаллы кварца без видимых признаков
 энантиоморфизма

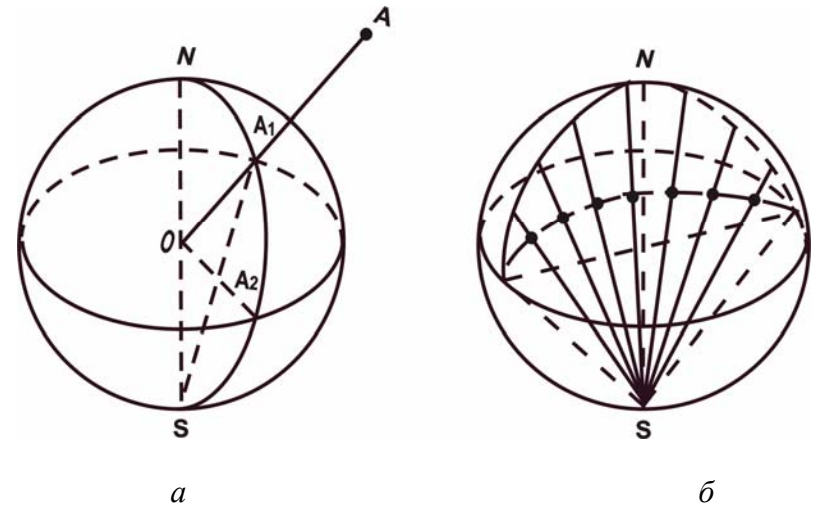


Рис. 30. Стереографическая проекция: а – прямой; б – плоскости

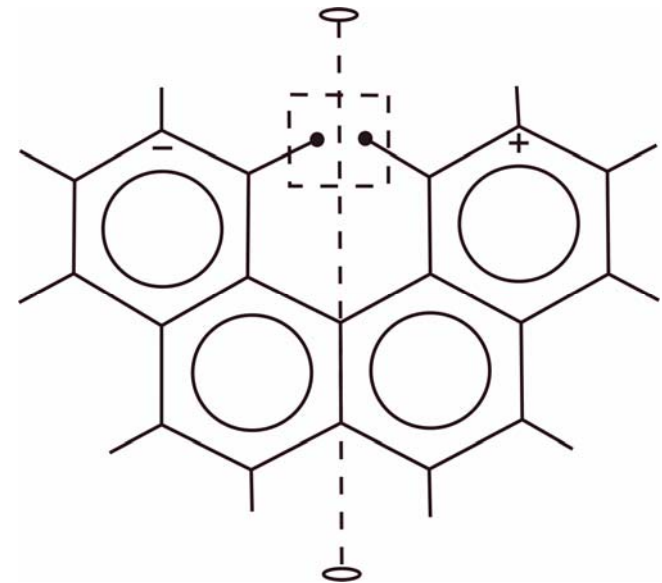


Рис. 31. Молекула бензофенантрена (точечная группа 2).
 Plusом отмечены части молекулы, приподнятые над плоскостью чертежа, минусом – опущенные

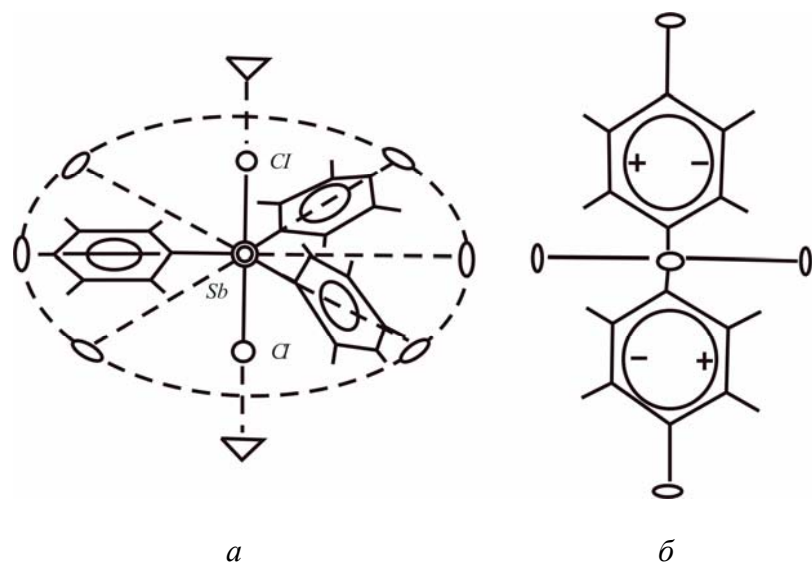


Рис. 32. Молекулы, симметрия которых описывается группами семейства скрученного цилиндра:
 а – молекула $\text{Sb}(\text{C}_6\text{H}_5)_3\text{Cl}_2$ (группа 32);
 б – молекула дифенила в газовой фазе (группа 222)

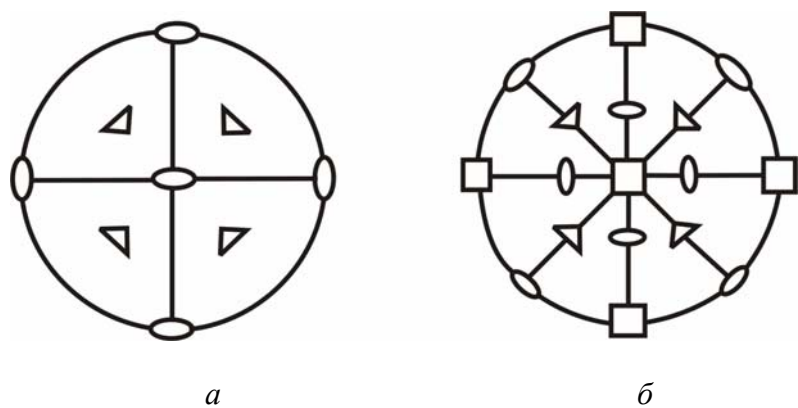


Рис. 33. Точечные группы семейства шара с вращающимися точками поверхности: а – группа 23; б – группа 432

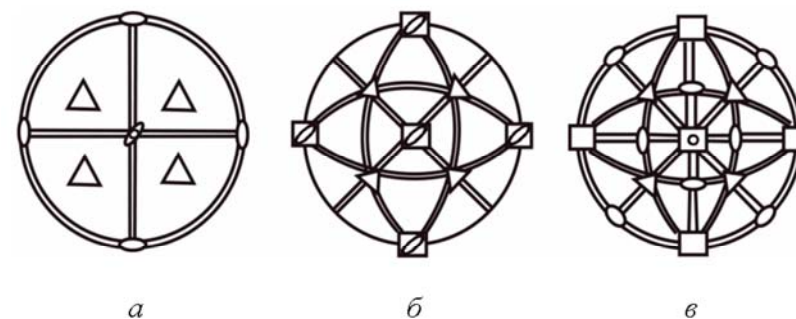


Рис. 34. Точечные группы семейства шара: а – группа $m\bar{3}$;
 Группа $\bar{4}3m$; в – группа $m\bar{3}m$

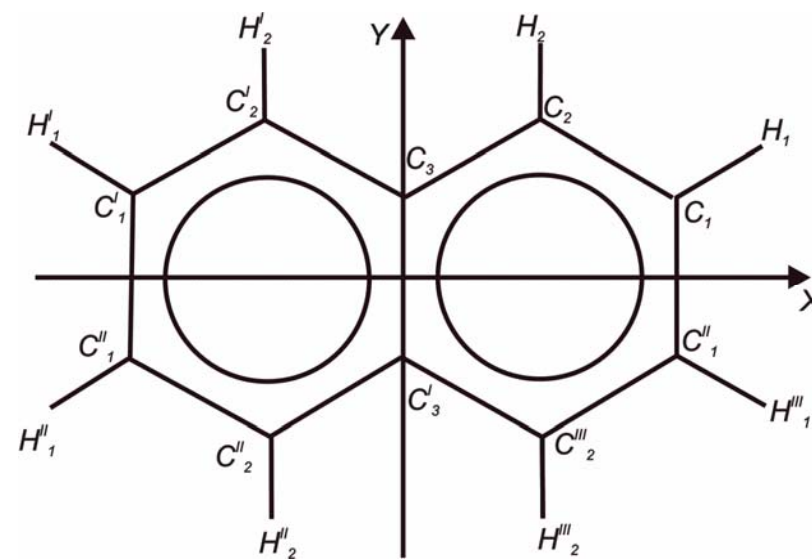


Рис. 35. Нумерация атомов в молекуле нафталина. Обозначения атомов, занимающих одинаковые эквивалентные позиции, имеют одинаковый нижний индекс

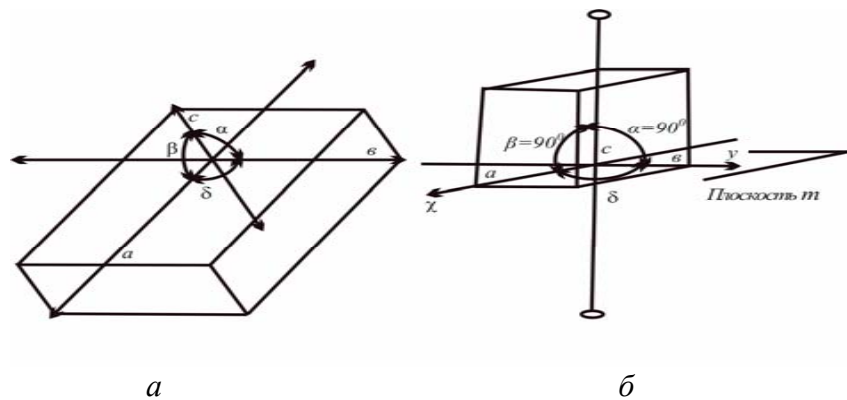


Рис. 36. Координатный крест и элементарная ячейка для
 а – триклинной системы координат;
 б – моноклинной системы координат

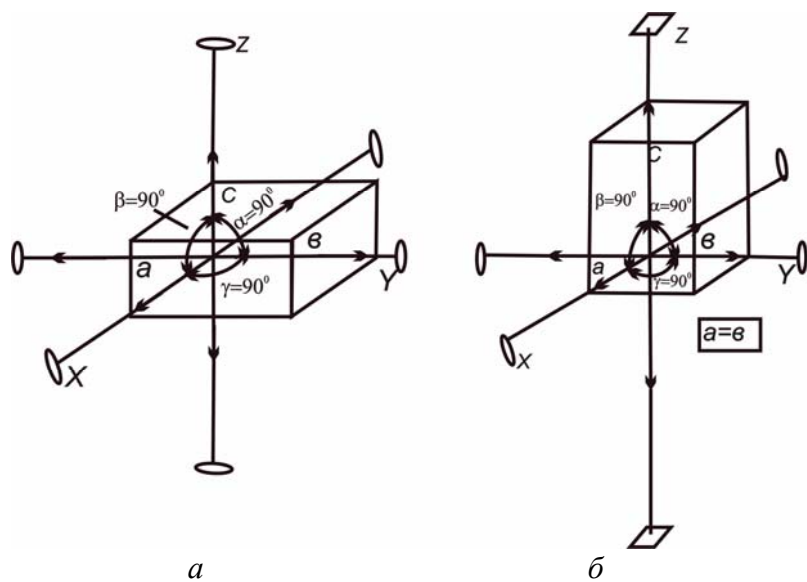


Рис. 37. Координатный крест и элементарная ячейка для
 а – ортогональной системы;
 б – тетрагональной системы

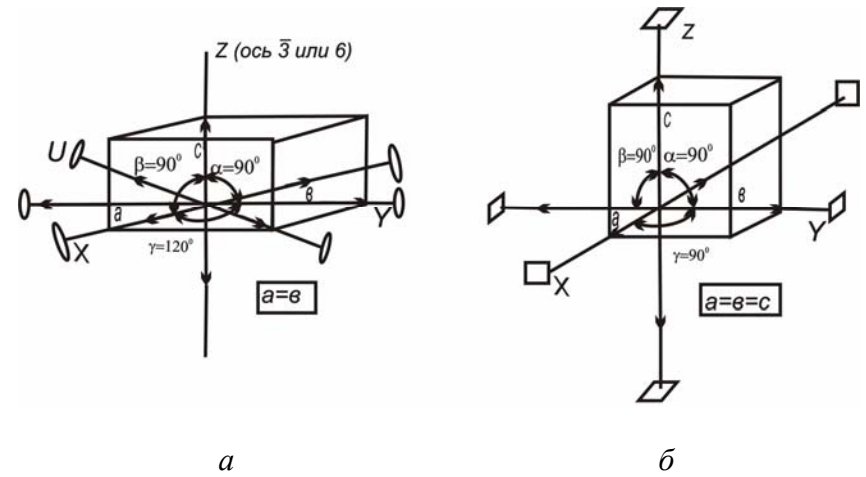


Рис. 38. Координатный крест и элементарная ячейка для
 а – гексагональной системы;
 б – кубической системы

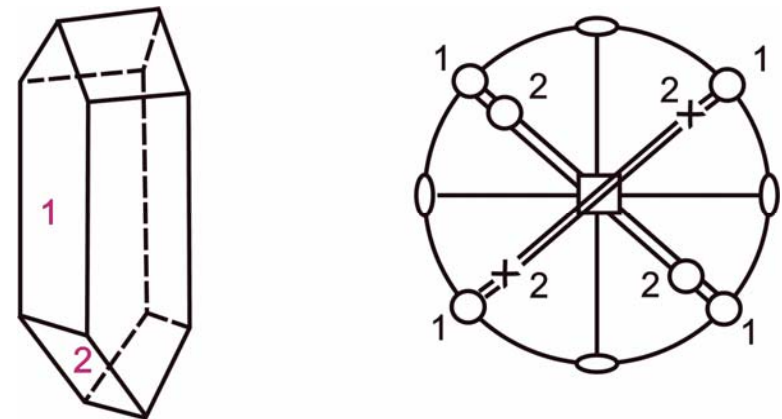


Рис. 39. Кристалл карбамида $\text{CO}(\text{NH}_2)_2$:
 а – общий вид;
 б – стереографическая проекция нормалей к граням

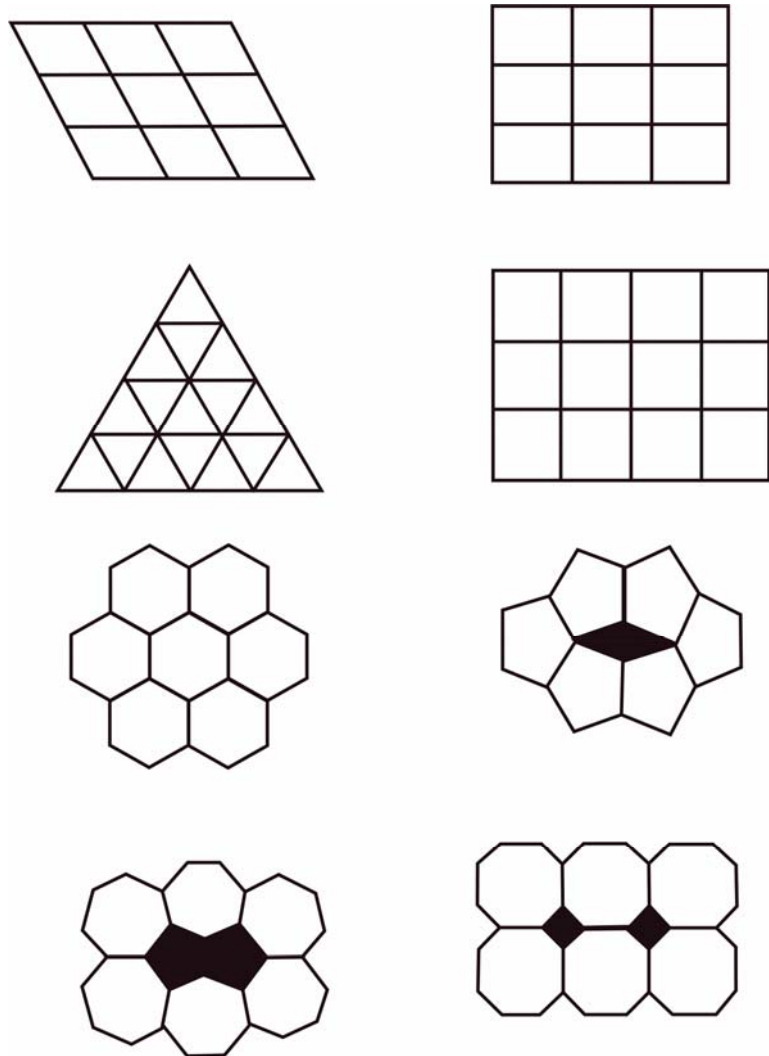


Рис. 40. Плоские сетки, составленные из многогранников с осями 1–8 порядков

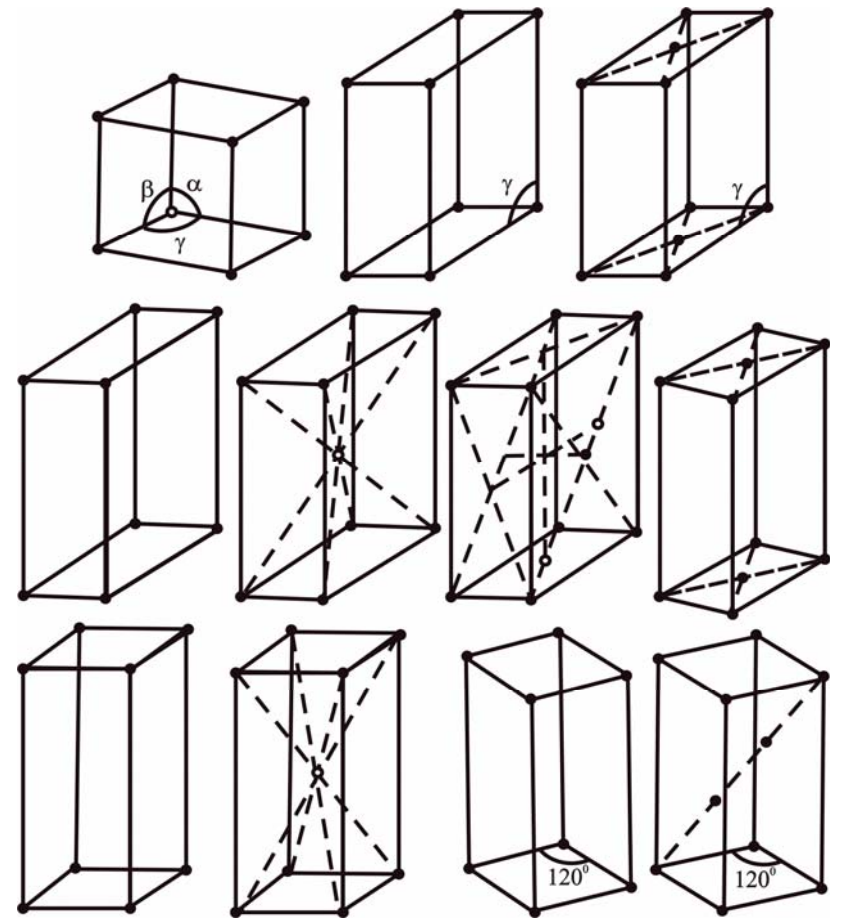


Рис. 41. Четырнадцать типов элементарных ячеек

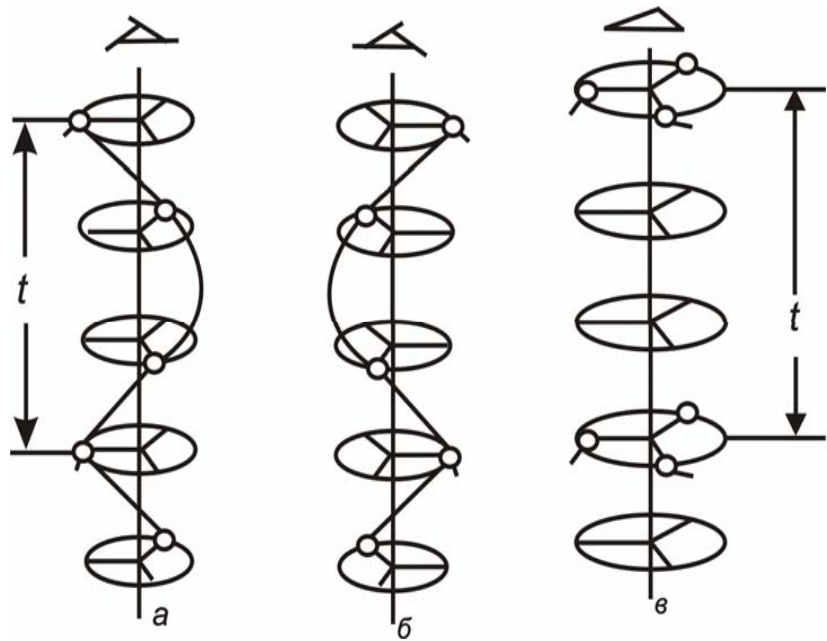


Рис. 42. Фигуры с винтовыми осями третьего порядка:
 а – ось 3_1 ; б – ось 3_2 ; в – ось 3_0

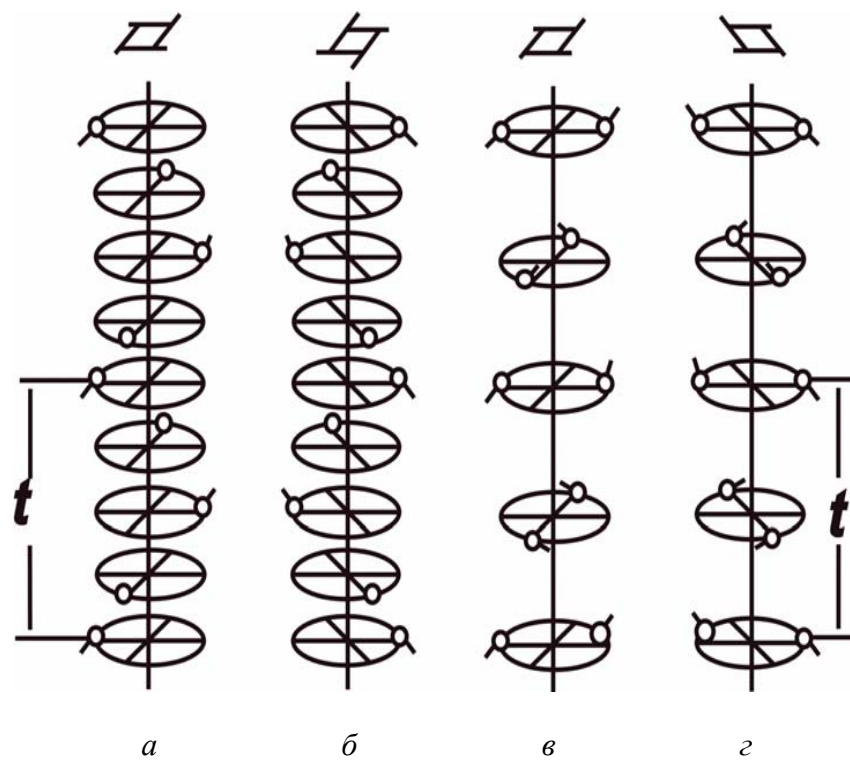


Рис. 43. Фигуры с винтовыми осями четвертого порядка:
 а, б – оси 4_1 и 4_3 энантимерны;
 в, г – ось 4_2 автоэнантимерна

Открытые элементы симметрии							
Символ	Изображение на чертеже			Символ	Изображение на чертеже		
	вертик	горизонт	наклон		вертик	горизонт	наклон
Винтовые оси				Плоскости скользящего отражения			
2 ₁				a			
3 ₁					e		
3 ₂							
4 ₁				c			
4 ₂							
4 ₃							
6 ₁				n			
6 ₂							
6 ₃							
6 ₄				d			
6 ₅							

Рис. 44. Графическое изображение открытых элементов симметрии

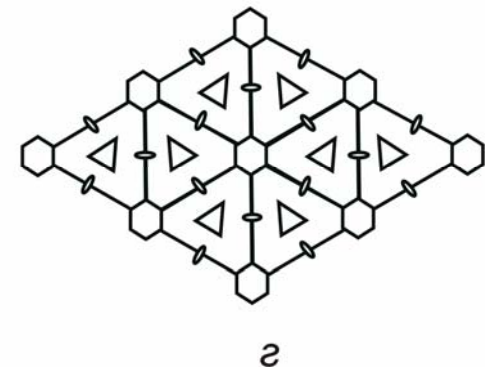
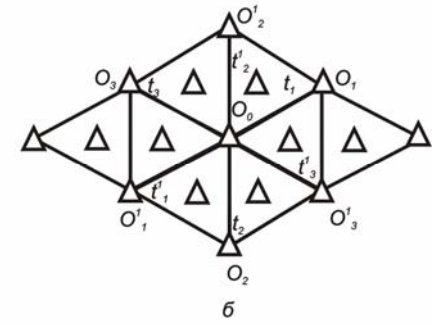
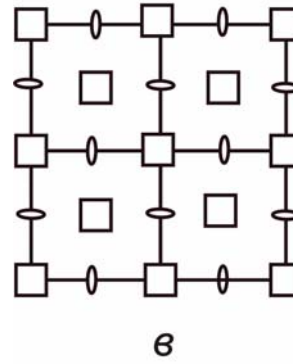
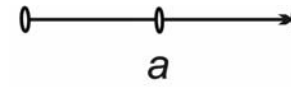


Рис. 45. Действие перпендикулярной трансляции на поворотные оси: а – ось 2; б – ось 3; в – ось 4; г – ось 6

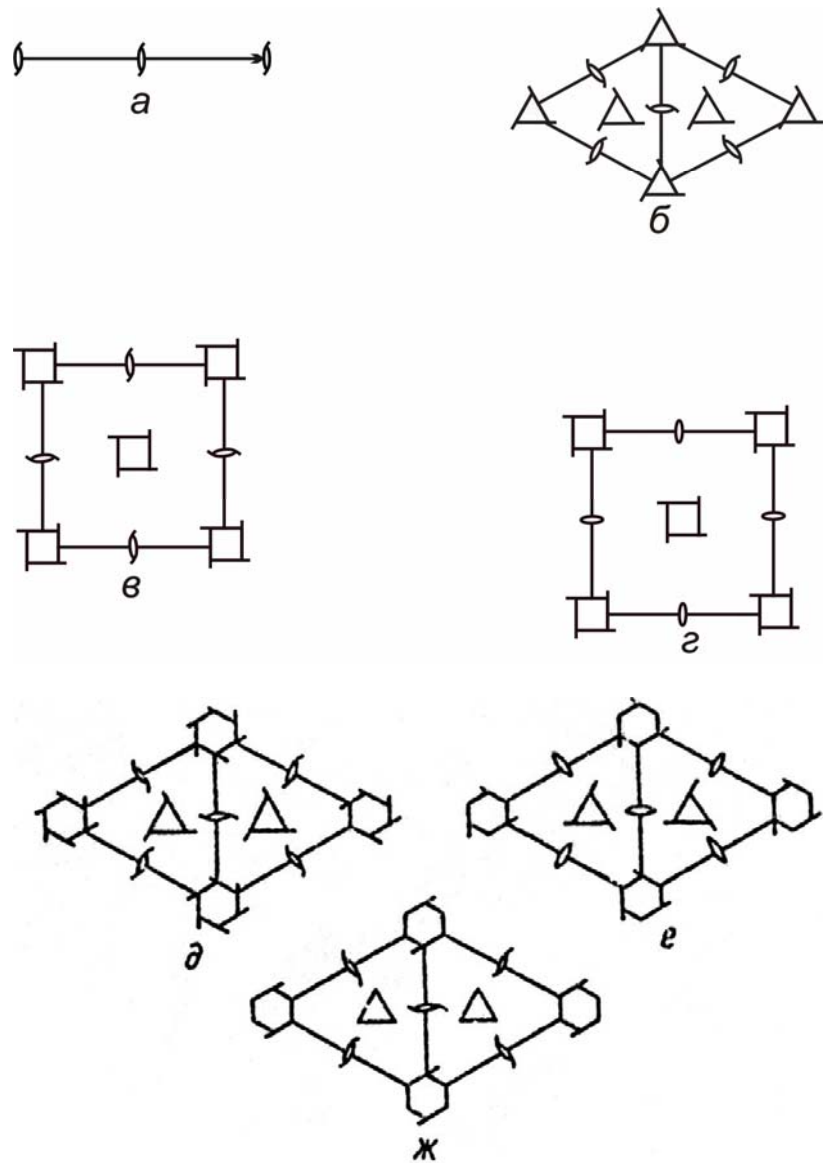


Рис. 46. Действие перпендикулярной трансляции на винтовые оси: а – ось 2_1 ; б – ось 3_1 ; в – ось 4_1 ; г – ось 4_2 ; д – ось 6_1 ; е – ось 6_2 ; ж – ось 6_3

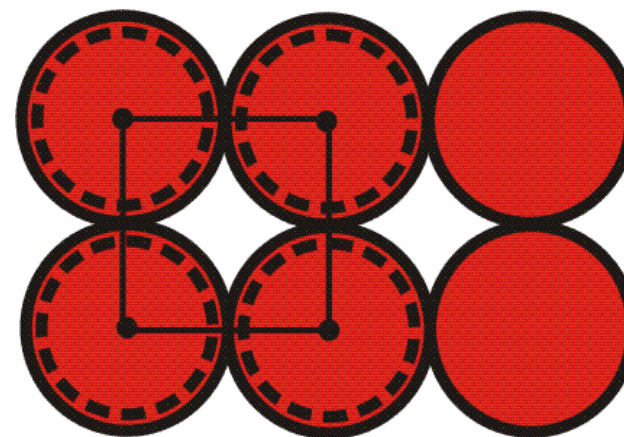


Рис. 47. Простая кубическая кладка

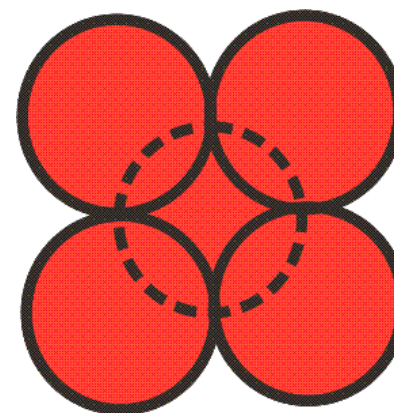


Рис. 48. Кубическая объемноцентрированная кладка

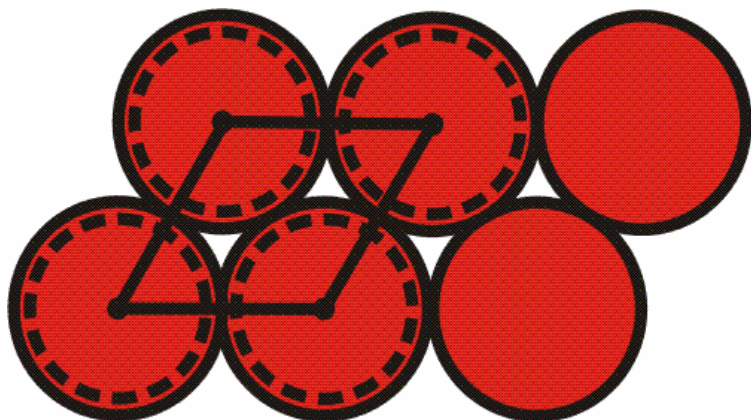


Рис. 49. Простая гексагональная кладка

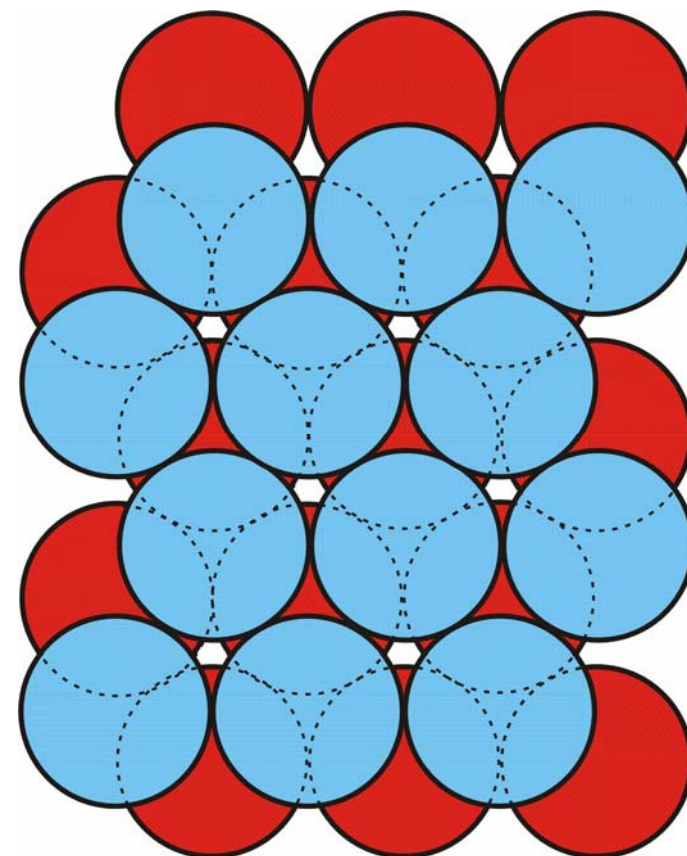


Рис. 50. Плотнейшая упаковка двух слоев шаров

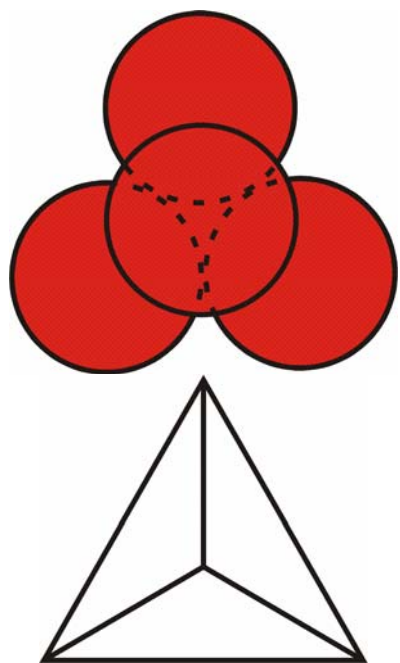


Рис. 51. Тетраэдрические пустоты плотнейшей упаковки

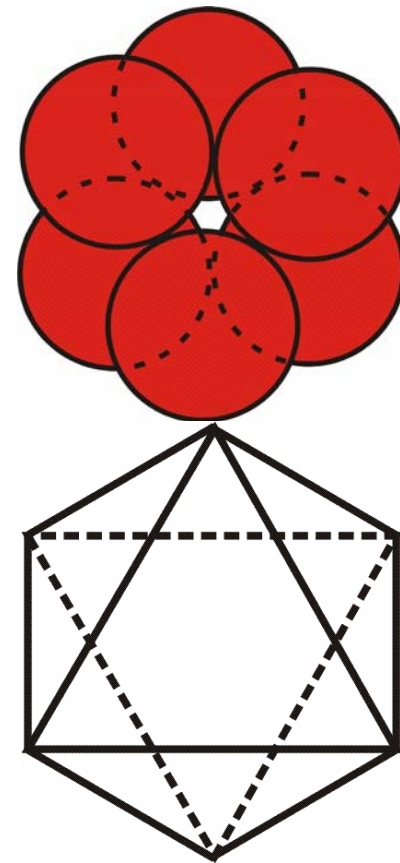


Рис. 52. Октаэдрические пустоты плотнейшей упаковки

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Кан Р., Дермер О. Введение в химическую номенклатуру. – М.: Химия, 1983. – 223 с.
2. Зоркий П.М. Симметрия молекул и кристаллических структур. – М.: Изд-во МГУ, 1986. – 288 с.
3. Харгитгаи И., Харгитгаи М. Симметрия глазами химика. – М.: Мир, 1989. – 467 с.
4. Бокий Г.Б. Кристаллохимия. – М.: Наука, 1971. – 400 с.
5. Порай-Кошиц М.А. Основы структурного анализа химических соединений. – М.: Высшая школа, 1982. – 151 с.
6. Урусов В.С. Теоретическая кристаллохимия. – М.: Изд-во МГУ, 1987. – 273 с.
7. Уэллс А. Структурная неорганическая химия. Т.1–3. – М.: Мир, 1987. – 1089 с.
8. Кребс Г. Основы кристаллохимии неорганических соединений. – М.: Мир, 1971. – 292 с.
9. Пенкаля Т. Очерки кристаллохимии – Л.: Химия, 1974. – 496с.
10. Шаскольская М.П. Кристаллография. – М.: Высшая школа, 1976. – 391 с.
11. Бацанов С.С. Структурная химия. Факты и зависимости. – М.: Диалог-МГУ, 2000. – 292 с.
12. Конвей Дж., Слоэн Н. Упаковки шаров, решетки и группы. Т.1.– М.: Мир, 1990. – 415 с.

Маргарита Кондратьевна Котванова

КРИСТАЛЛОХИМИЯ

Учебное пособие

Оригинал-макет подготовлен РИЦ ЮГУ

Подписано в печать 31.01.2008 Формат 60x84/16.

Усл. п. л. 7,25. Гарнитура Times New Roman.

Тираж 55 экз. Заказ № 806.

Редакционно-издательский центр ЮГУ,
628012, Ханты-Мансийский автономный округ,
г. Ханты-Мансийск, ул. Чехова, 16