

# Лекция 7

Основные характеристики структуры: координационные числа (КЧ) и координационные многогранники (КМ) (полиэдры), число формульных единиц (Z). План описания кристаллической структуры.

Зная модель кристаллической структуры, т.е. пространственное расположение атомов относительно элементов симметрии в элементарной ячейке - их координаты, а следовательно, и характеристики правильных систем точек, которые занимают атомы, можно сделать ряд кристаллохимических выводов, используя достаточно простые приемы описания структур.

Необходимы характеристики, позволяющие однозначно описать индивидуальные особенности каждой кристаллической структуры. К таким характеристикам, дающим представление о геометрическом характере структуры, относятся: *координационные числа (КЧ), координационные многогранники (КМ), или полиэдры (КП), и число формульных единиц (Z).*


























Прежде всего, по модели можно решить вопрос о *химической формуле* рассматриваемого соединения, т.е. установить количественное соотношение атомов в структуре.

## План описания кристаллических структур

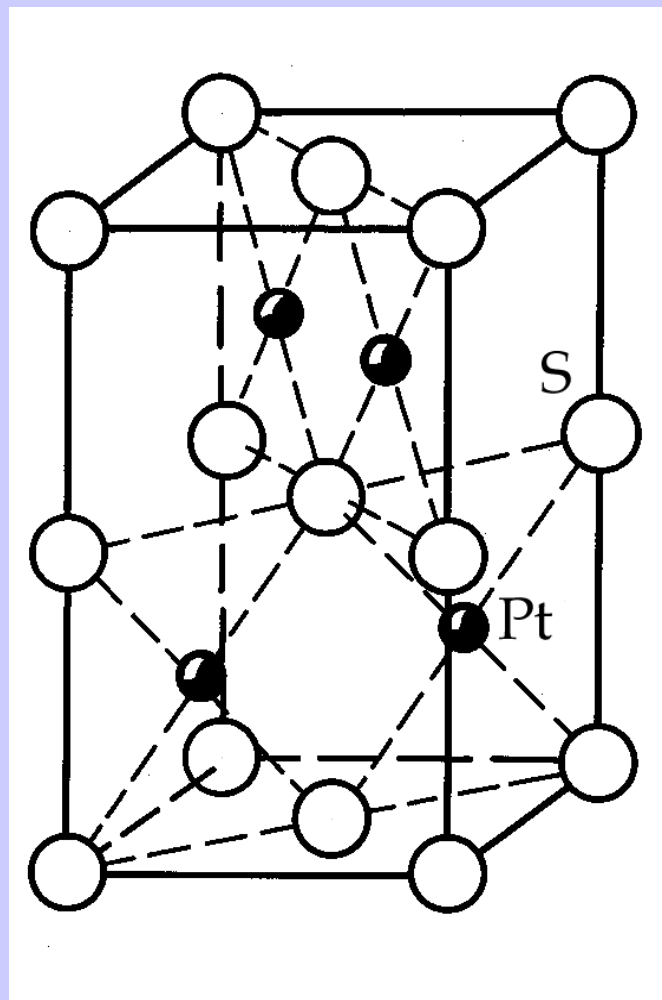
1. Выделить в структуре ячейку Браве.
2. Определить тип решетки Браве. Записать ее константы.
3. Сосчитать сколько атомов различных типов приходится на одну ячейку Браве.
4. Определить (или подтвердить) тип формулы соединения .
5. Рассчитать число формульных единиц ( $Z$ ).
6. Определить координационные числа (КЧ) атомов каждого сорта.
7. Назвать координационный многогранник (КМ).
8. Проверить формулу соединения по взаимной координации атомов.
9. Дать словесное описание структуры; если возможно, то описание дать в терминах плотнейших упаковок (указать слойность упаковки и мотив заполнения в ней тех или иных пустот).
10. Выделив координационные многогранники вокруг атомов, указать характер их сочленения.
11. По приведенному описанию нарисовать кристаллическую структуру в плане, выделив контуры элементарной ячейки и обозначив высоты (координаты  $z$ ) атомов

Оригинал:

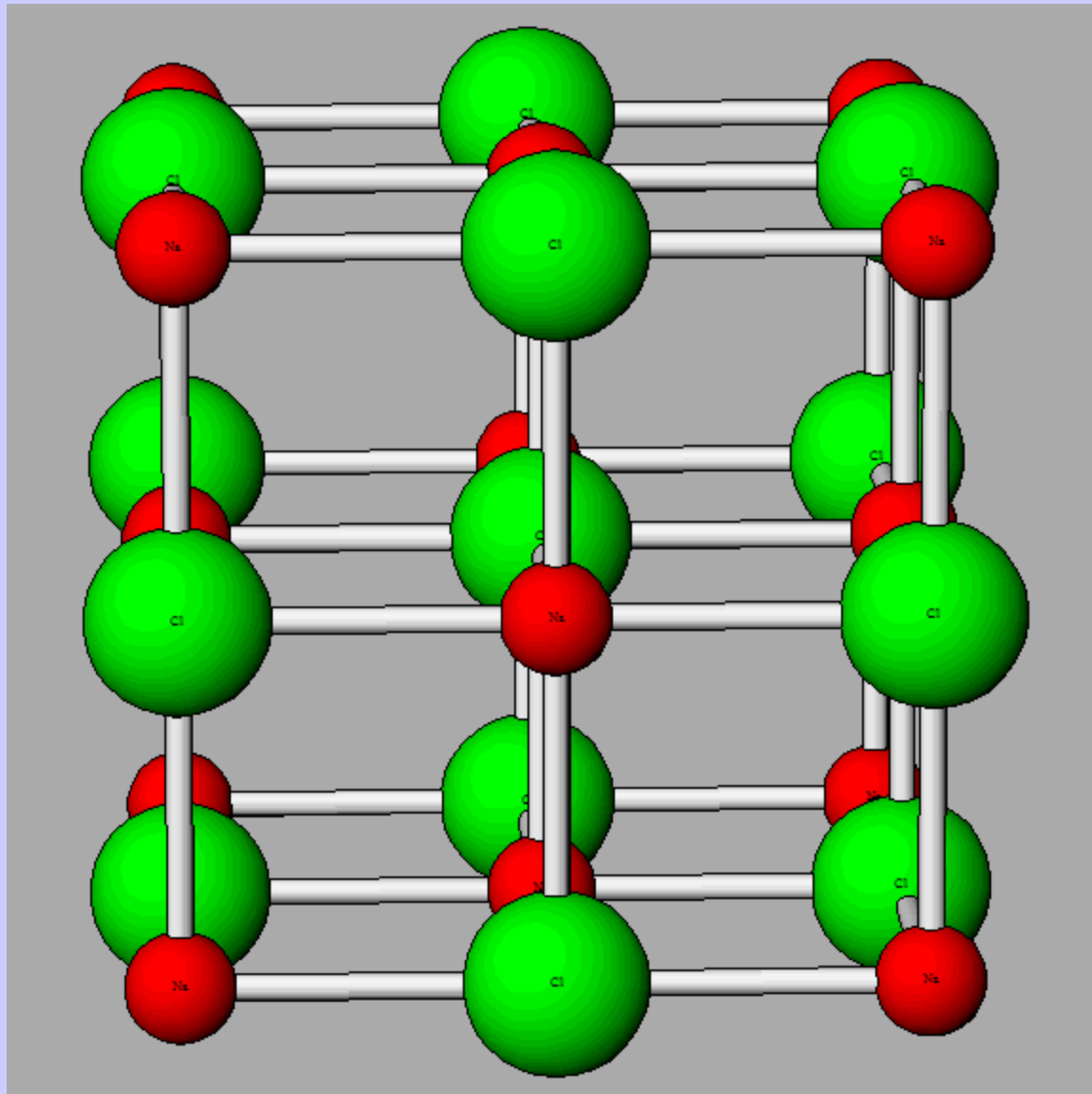
<http://cryst.geol.msu.ru/appliances/pics/polyhedra.jpg>

КЧ	Координационные многогранники			
1				
2	 гантель			
3	 треугольник	 треугольный зонтичный полиэдр		
4	 квадрат	 тетраэдр		
5	 тригональная бипирамида	 тетрагональная пирамида	 тетрагональная пирамида (половина октаэдра)	
6	 октаэдр	 тригональная призма		
7	 пентагональная бипирамида	 одношапочный октаэдр	 одношапочная тригональная призма	
8	 куб	 куб Томпсона (квадратная антипризма)	 дисфеноид	 двухшапочная тригональная призма
9	 одношапочный томпсоновский куб	 трёхшапочная тригональная призма		
10				
11				
12	 кубооктаэдр	 гексагональный аналог кубооктаэдра	 икосаэдр	

\*При составлении таблицы использовалась книга А.Уэлса Структурная неорганическая химия Т1-3, 1987, а также программа Balls&Sticks v.1.47



Кристаллическая структура куперита  $\text{PtS}$ :  $\text{КЧ}_{\text{Pt/S}} = 4$ ,  $\text{КЧ}_{\text{S/Pt}} = 4$ .  
Координационные многогранники – разные: квадрат – для Pt,  
тетраэдр – для S



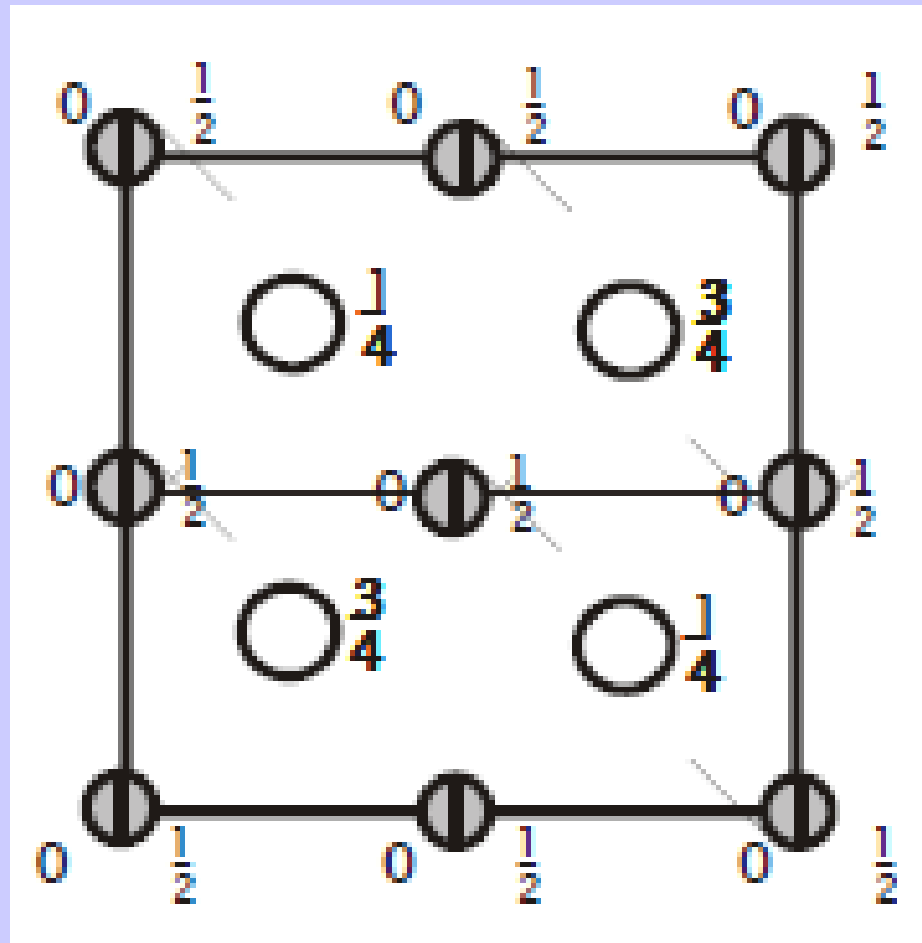
Даем полное описание кристаллической структуры NaCl по приведенному плану

## План описания кристаллических структур

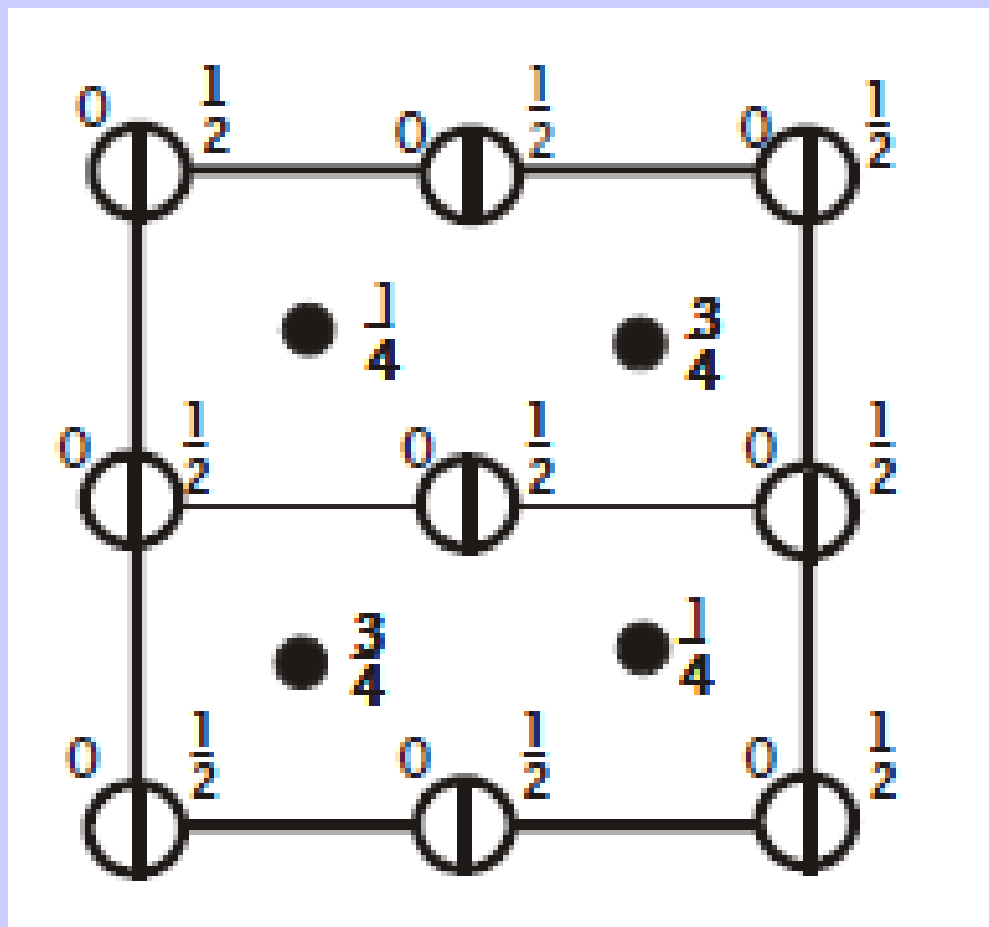
1. Выделить в структуре ячейку Браве.
2. Определить тип решетки Браве. Записать ее константы.
3. Сосчитать сколько атомов различных типов приходится на одну ячейку Браве.
4. Определить (или подтвердить) тип формулы соединения .
5. Рассчитать число формульных единиц ( $Z$ ).
6. Определить координационные числа (КЧ) атомов каждого сорта.
7. Назвать координационный многогранник (КМ).
8. Проверить формулу соединения по взаимной координации атомов.
9. Дать словесное описание структуры; если возможно, то описание дать в терминах плотнейших упаковок (указать слойность упаковки и мотив заполнения в ней тех или иных пустот).
10. Выделив координационные многогранники вокруг атомов, указать характер их сочленения.
11. По приведенному описанию нарисовать кристаллическую структуру в плане, выделив контуры элементарной ячейки и обозначив высоты (координаты  $z$ ) атомов



Даем полное описание кристаллической структуры по чертежу



Даем полное описание кристаллической структуры по чертежу



Даем полное описание кристаллической структуры по чертежу

