

**Домашнее задание №18 (105 группа)**  
**Выполняется к семинару 15 марта**

## 1. ОЧЕНЬ ВАЖНО!!!

- Необходимо скачать и установить программу VESTA на свой ноутбук.  
<https://jp-minerals.org/vesta/en/>
- Принести ноутбук на занятие **4 марта**. Лучше каждому свой. Но можно и один на двоих. Занятие будет проходить в рамках семинара по кристаллохимии.
- Из открытых кристаллографических баз данных скачать следующие файлы со структурной информацией: <http://database.iem.ac.ru/> или <http://www.crystallography.net/cod/> и др. Можно сразу пройти на карточку по интерактивной ссылке:
  - ксонотлит [9008437](#)
  - берилл, например, карточка [9001019](#)
  - ангидрит [9004096](#)
  - циркон [1011265](#)
  - барит [1000037](#)Файл со структурной информацией имеет расширение cif.  
Можно пользоваться другими базами данных.  
Если не получится, можно обратиться в 426а или переписать на занятии

### Индивидуальное задание №18 (105 группа)

1. Построить по структурным данным на миллиметровке чертеж структуры некоторого бинарного соединения (атомы в элементарной ячейке и необходимые для краевых связей атомы соседних ячеек). Пространственная группа  **$P4_2/mnm$** . Катион А занимает позицию  **$a$** , а анион В – позицию  **$f$**  Уайкоффа. Параметр ячейки и параметр позиции  **$x$**  приведены ниже. **Закон размножения для пространственной группы и полезные радиусы – в конце этого файла.**
2. Определить формулу соединения.
3. Выделить на чертеже А-полиэдры, определить характер их соединения.
4. Проанализировать межатомные расстояния, сделать заключение о типе атома А.
5. Дать полное описание структуры, включая словесное.

Буганова Екатерина	$a=4,38 \text{ \AA}, c=2,85 \text{ \AA}$ $x=0,306$ В-кислород	Замотаев Святослаи	$a=4,59 \text{ \AA}, c=2,96 \text{ \AA}$ $x=0,305$ В-кислород
Васильченко Егор	$a=4,15 \text{ \AA}, c=2,65 \text{ \AA}$ $x=0,306$ В-кислород	Усольцева Анна	$a=4,59 \text{ \AA}, c=2,96 \text{ \AA}$ $x=0,305$ В-кислород
Вехтер Кирилл	$a=4,74 \text{ \AA}, c=3,19 \text{ \AA}$ $x=0,306$ В-кислород	Фролова Анфиса	$a=4,62 \text{ \AA}, c=3,05 \text{ \AA}$ $x=0,303$ В-фтор
Голубева Елизавета	$a=4,59 \text{ \AA}, c=2,96 \text{ \AA}$ $x=0,305$ В-кислород	Бушнева Татьяна	$a=4,38 \text{ \AA}, c=2,85 \text{ \AA}$ $x=0,306$ В-кислород
Добрянская Анастасия	$a=4,62 \text{ \AA}, c=3,05 \text{ \AA}$	Мазутский Григорий	$a=4,15 \text{ \AA}, c=2,65 \text{ \AA}$

	$x=0,303$ В-фтор		$x=0,306$ В-кислород
Еремин Денис	$a=4,87 \text{ \AA}, c=3,31 \text{ \AA}$ $x=0,305$ В-фтор	Серов Дмитрий	$a=4,74 \text{ \AA}, c=3,19 \text{ \AA}$ $x=0,306$ В-кислород
	$a=4,38 \text{ \AA}, c=2,85 \text{ \AA}$ $x=0,306,$ В-кислород		$a=4,59 \text{ \AA}, c=2,96 \text{ \AA}$ $x=0,305$ В-кислород

### ПОЛЕЗНЫЕ РАДИУСЫ.

Ион	Радиус, $\text{\AA}$	Ион	Радиус, $\text{\AA}$
$\text{O}^{2-}$	1,35	$\text{Na}^+$	0,98
F	1,33	$\text{Zn}^{2+}$	0,60
$\text{Cu}^+$	0,70	$\text{Ba}^{2+}$	1,35
$\text{K}^+$	1,40	$\text{Ti}^{4+}$	0,63
$\text{Mn}^{2+}$	0,79	$\text{U}^{4+}$	0,91
$\text{Si}^{4+}$	0,45	$\text{A}^{g+}$	1,02
$\text{C}^{4+}$	0,16	$\text{Mg}^{2+}$	0,69
$\text{Sr}^{2+}$	1,2	$\text{Zr}^{4+}$	0,75
$\text{Sn}^{4+}$	0,69	$\text{Ge}^{4+}$	0,53
$\text{S}^{6+}$	0,12		

**Generators selected** (1);  $t(1,0,0)$ ;  $t(0,1,0)$ ;  $t(0,0,1)$ ; (2); (3); (5); (9)

**Positions**

		Coordinates		Reflection conditions		
				General:		
16	$k \quad 1$	(1) $x, y, z$ (5) $\bar{x} + \frac{1}{2}, y + \frac{1}{2}, \bar{z} + \frac{1}{2}$ (9) $\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}$ (13) $x + \frac{1}{2}, \bar{y} + \frac{1}{2}, z + \frac{1}{2}$	(2) $\bar{x}, \bar{y}, z$ (6) $x + \frac{1}{2}, \bar{y} + \frac{1}{2}, \bar{z} + \frac{1}{2}$ (10) $x, y, \bar{z}$ (14) $\bar{x} + \frac{1}{2}, y + \frac{1}{2}, z + \frac{1}{2}$	(3) $\bar{y} + \frac{1}{2}, x + \frac{1}{2}, z + \frac{1}{2}$ (7) $y, x, \bar{z}$ (11) $y + \frac{1}{2}, \bar{x} + \frac{1}{2}, \bar{z} + \frac{1}{2}$ (15) $\bar{y}, \bar{x}, z$	(4) $y + \frac{1}{2}, \bar{x} + \frac{1}{2}, z + \frac{1}{2}$ (8) $\bar{y}, \bar{x}, \bar{z}$ (12) $\bar{y} + \frac{1}{2}, x + \frac{1}{2}, \bar{z} + \frac{1}{2}$ (16) $y, x, z$	$0kl : k + l = 2n$ $00l : l = 2n$ $h00 : h = 2n$
Special: as above, plus						
8	$j \quad \dots m$	$x, x, z$ $\bar{x} + \frac{1}{2}, x + \frac{1}{2}, \bar{z} + \frac{1}{2}$	$\bar{x}, \bar{x}, z$ $x + \frac{1}{2}, \bar{x} + \frac{1}{2}, \bar{z} + \frac{1}{2}$	$\bar{x} + \frac{1}{2}, x + \frac{1}{2}, z + \frac{1}{2}$ $x, x, \bar{z}$	$x + \frac{1}{2}, \bar{x} + \frac{1}{2}, z + \frac{1}{2}$ $\bar{x}, \bar{x}, \bar{z}$	no extra conditions
8	$i \quad m \dots$	$x, y, 0$ $\bar{x} + \frac{1}{2}, y + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$\bar{x}, \bar{y}, 0$ $x + \frac{1}{2}, \bar{y} + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$\bar{y} + \frac{1}{2}, x + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$ $y, x, 0$	$y + \frac{1}{2}, \bar{x} + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$ $\bar{y}, \bar{x}, 0$	no extra conditions
8	$h \quad 2 \dots$	$0, \frac{1}{2}, z$ $0, \frac{1}{2}, \bar{z}$	$0, \frac{1}{2}, z + \frac{1}{2}$ $0, \frac{1}{2}, \bar{z} + \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, 0, \bar{z} + \frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}, 0, z + \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, 0, \bar{z}$ $\frac{1}{2}, 0, z$	$hkl : h + k, l = 2n$
4	$g \quad m \cdot 2m$	$x, \bar{x}, 0$	$\bar{x}, x, 0$ $x + \frac{1}{2}, x + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$\bar{x} + \frac{1}{2}, \bar{x} + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$		no extra conditions
4	$f \quad m \cdot 2m$	$x, x, 0$	$\bar{x}, \bar{x}, 0$ $\bar{x} + \frac{1}{2}, x + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$x + \frac{1}{2}, \bar{x} + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$		no extra conditions
4	$e \quad 2 \cdot mm$	$0, 0, z$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, z + \frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \bar{z} + \frac{1}{2}$	$0, 0, \bar{z}$		$hkl : h + k + l = 2n$
4	$d \quad \bar{4} \dots$	$0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$0, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$	$\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, 0, \frac{3}{2}$	$hkl : h + k, l = 2n$
4	$c \quad 2/m \dots$	$0, \frac{1}{2}, 0$	$0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, 0, 0$	$hkl : h + k, l = 2n$
2	$b \quad m \cdot mm$	$0, 0, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$			$hkl : h + k + l = 2n$
2	$a \quad m \cdot mm$	$0, 0, 0$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$			$hkl : h + k + l = 2n$