

Домашнее задание №15 (112 группа)

1. ОЧЕНЬ ВАЖНО!!!

- Необходимо скачать и установить программу VESTA на свой ноутбук.
<https://jp-minerals.org/vesta/en/>
- Принести ноутбук на занятие **16 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 №15 (112 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/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.

АНДРИАНОВА АНАСТАСИЯ	$a=4,38 \text{ \AA}, c=2,85 \text{ \AA}$ $x= 0,306,$ В-кислород	КРОТОВА АНАСТАСИЯ	$a=4,59 \text{ \AA}, c=2,96 \text{ \AA}$ $x= 0,305$ В-кислород
АФАНАСОГЛУ КИРИЛЛ	$a=4,15 \text{ \AA}, c=2,65 \text{ \AA}$ $x= 0,306$ В-кислород	МАЛЬЦЕВ АЛЕКСАНДР	$a=4,59 \text{ \AA}, c=2,96 \text{ \AA}$ $x= 0,305$ В-кислород
ВАСЬКОВА ЕЛИЗАВЕТА	$a=4,74 \text{ \AA}, c=3,19 \text{ \AA}$ $x= 0,306$ В-кислород	МЯГКОВ АРТЁМ	$a=4,62 \text{ \AA}, c=3,05 \text{ \AA}$ $x= 0,303$ В-фтор
КАРТАШЕВ СЕРГЕЙ	$a=4,59 \text{ \AA}, c=2,96 \text{ \AA}$ $x= 0,305$ В-кислород	НЕДЕЛЯЕВА ЕЛЕНА	$a=4,38 \text{ \AA}, c=2,85 \text{ \AA}$ $x= 0,306,$ В-кислород
КОТЕЛЕВСКАЯ ЕКАТЕРИНА	$a=4,62 \text{ \AA}, c=3,05 \text{ \AA}$ $x= 0,303$ В-фтор	САМОЛИНОВ ГЕОРГИЙ	$a=4,15 \text{ \AA}, c=2,65 \text{ \AA}$ $x= 0,306$ В-кислород

КОРТУНКОВА СОФЬЯ	$a=4,87 \text{ \AA}, c=3,31 \text{ \AA}$ $x=0,305$ В-фтор	ШЕВЧУКОВА МАРИЯ	$a=4,74 \text{ \AA}, c=3,19 \text{ \AA}$ $x=0,306$ В-кислород
------------------	---	-----------------	---

ПОЛЕЗНЫЕ РАДИУСЫ.

Ион	Радиус, \AA	Ион	Радиус, \AA
O^{2-}	1,35	Na^+	0,98
F ⁻	1,33	Zn^{2+}	0,60
Cu^+	0,70	Ba^{2+}	1,35
K^+	1,40	Ti^{4+}	0,63
Mn^{2+}	0,79	U^{4+}	0,91
Si^{4+}	0,45	A^{g+}	1,02
C^{4+}	0,16	Mg^{2+}	0,69
Sr^{2+}	1,2	Zr^{4+}	0,75
Sn^{4+}	0,69	Ge^{4+}	0,53
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	$a \quad m \cdot mm$	$0, 0, 0$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$			$hkl : h + k + l = 2n$