

1. Построить по структурным данным на миллиметровке чертеж структуры (рекомендуемый масштаб:  $1\text{Å} = 2\text{см}$ ).
2. Нанести все атомы в элементарной ячейке и участвующие в краевых связях.
3. Определить формулу соединения.
4. Выделить на чертеже А-полиэдры, определить характер их соединения.
5. Проанализировав межатомные расстояния, сделать заключение о типе атома "А", если предположить, что "В" – кислород.
6. Дать полное описание структуры, включая словесное.

### Структурные данные.

Группа:  $P4_2/m n t$       Параметры ячейки:  $a=4,737\text{ Å}$ ,  $c=3,189\text{ Å}$ ,

### Позиции атомов:

А (катион) 0,0 0,0 0,0

В (анион) 0,306 0,306 0,0

$P4_2/mnm$

$D_{4h}^{14}$

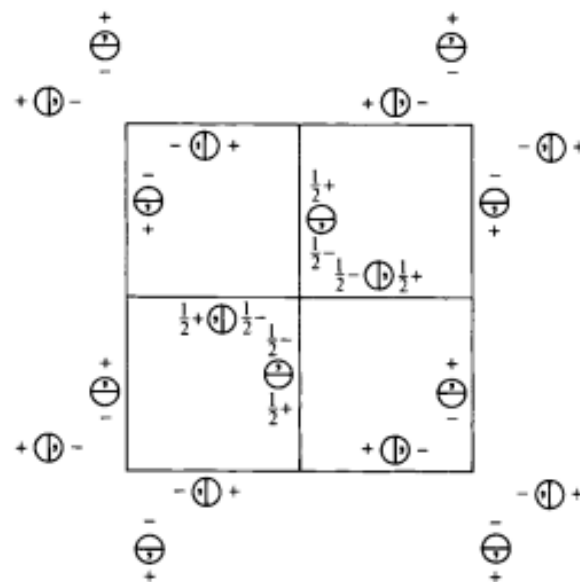
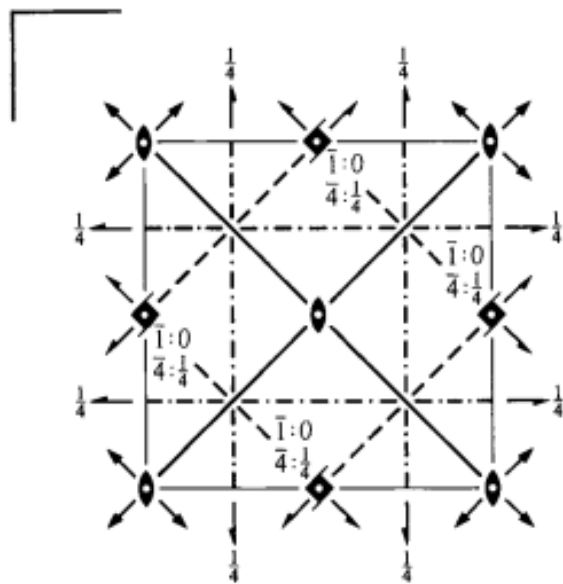
$4/mmm$

Tetragonal

No. 136

$P 4_2/m 2_1/n 2/m$

Patterson symmetry  $P4/mmm$



## Positions

Multiplicity,  
Wyckoff letter,  
Site symmetry

Coordinates

Reflection conditions

Multiplicity, Wyckoff letter, Site symmetry	Coordinates	Reflection conditions
16 <i>k</i> 1	(1) $x, y, z$ (2) $\bar{x}, \bar{y}, z$ (3) $\bar{y} + \frac{1}{2}, x + \frac{1}{2}, z + \frac{1}{2}$ (4) $y + \frac{1}{2}, \bar{x} + \frac{1}{2}, z + \frac{1}{2}$ (5) $\bar{x} + \frac{1}{2}, y + \frac{1}{2}, \bar{z} + \frac{1}{2}$ (6) $x + \frac{1}{2}, \bar{y} + \frac{1}{2}, \bar{z} + \frac{1}{2}$ (7) $y, x, \bar{z}$ (8) $\bar{y}, \bar{x}, \bar{z}$ (9) $\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}$ (10) $x, y, \bar{z}$ (11) $y + \frac{1}{2}, \bar{x} + \frac{1}{2}, \bar{z} + \frac{1}{2}$ (12) $\bar{y} + \frac{1}{2}, x + \frac{1}{2}, \bar{z} + \frac{1}{2}$ (13) $x + \frac{1}{2}, \bar{y} + \frac{1}{2}, z + \frac{1}{2}$ (14) $\bar{x} + \frac{1}{2}, y + \frac{1}{2}, z + \frac{1}{2}$ (15) $\bar{y}, \bar{x}, z$ (16) $y, x, z$	General: $Ok_l : k + l = 2n$ $00l : l = 2n$ $h00 : h = 2n$

Special: as above, plus

8 <i>j</i> $. . m$	$x, x, z$ $\bar{x} + \frac{1}{2}, x + \frac{1}{2}, \bar{z} + \frac{1}{2}$	$\bar{x}, \bar{x}, z$ $x + \frac{1}{2}, \bar{x} + \frac{1}{2}, \bar{z} + \frac{1}{2}$	$\bar{x} + \frac{1}{2}, x + \frac{1}{2}, z + \frac{1}{2}$ $x, x, \bar{z}$	$x + \frac{1}{2}, \bar{x} + \frac{1}{2}, z + \frac{1}{2}$ $\bar{x}, \bar{x}, \bar{z}$	no extra conditions
8 <i>i</i> $m . .$	$x, y, 0$ $\bar{x} + \frac{1}{2}, y + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$\bar{x}, \bar{y}, 0$ $x + \frac{1}{2}, \bar{y} + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$\bar{y} + \frac{1}{2}, x + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$ $y, x, 0$	$y + \frac{1}{2}, \bar{x} + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$ $\bar{y}, \bar{x}, 0$	no extra conditions
8 <i>h</i> $2 . .$	$0, \frac{1}{2}, z$ $0, \frac{1}{2}, \bar{z}$	$0, \frac{1}{2}, z + \frac{1}{2}$ $0, \frac{1}{2}, \bar{z} + \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, 0, \bar{z} + \frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}, 0, z + \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, 0, \bar{z}$ $\frac{1}{2}, 0, z$	$hkl : h + k, l = 2n$
4 <i>g</i> $m . 2m$	$x, \bar{x}, 0$	$\bar{x}, x, 0$	$x + \frac{1}{2}, x + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$\bar{x} + \frac{1}{2}, \bar{x} + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	no extra conditions
4 <i>f</i> $m . 2m$	$x, x, 0$	$\bar{x}, \bar{x}, 0$	$\bar{x} + \frac{1}{2}, x + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$x + \frac{1}{2}, \bar{x} + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	no extra conditions
4 <i>e</i> $2 . mm$	$0, 0, z$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, z + \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \bar{z} + \frac{1}{2}$	$0, 0, \bar{z}$	$hkl : h + k + l = 2n$
4 <i>d</i> $\bar{4} . .$	$0, \frac{1}{2}, \frac{1}{4}$	$0, \frac{1}{2}, \frac{3}{4}$	$\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{4}$	$\frac{1}{2}, 0, \frac{3}{4}$	$hkl : h + k, l = 2n$
4 <i>c</i> $2/m . .$	$0, \frac{1}{2}, 0$	$0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, 0, 0$	$hkl : h + k, l = 2n$
2 <i>b</i> $m . mm$	$0, 0, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$			$hkl : h + k + l = 2n$
2 <i>a</i> $m . mm$	$0, 0, 0$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$			$hkl : h + k + l = 2n$

## Позиции атомов:

A (катион) 0,0 0,0 0,0

B (анион) 0,306 0,306 0,0