

Общее задание
Представить «миллиметровку» со структурой барита (с семинара)

Индивидуальное задание №4

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.

Алимов Эхсон Мирзомуинович	$a=4,38 \text{ \AA}, c=2,85 \text{ \AA}$ $x= 0,306$ В-кислород	Ромизи Тоир	$a=4,59 \text{ \AA}, c=2,96 \text{ \AA}$ $x= 0,305$ В-кислород
Икромова Азиза Махмадалиевна	$a=4,15 \text{ \AA}, c=2,65 \text{ \AA}$ $x= 0,306$ В-кислород	Фузайлова Шахноза Хикматовна	$a=4,59 \text{ \AA}, c=2,96 \text{ \AA}$ $x= 0,305$ В-кислород
Мамаджонов Фахриддин Толибжонович	$a=4,74 \text{ \AA}, c=3,19 \text{ \AA}$ $x= 0,306$ В-кислород	Хаёлов Мухаммадджон Донишович	$a=4,62 \text{ \AA}, c=3,05 \text{ \AA}$ $x= 0,303$ В-фтор
Мардонов Джонон Рустамович	$a=4,59 \text{ \AA}, c=2,96 \text{ \AA}$ $x= 0,305$ В-кислород	Хакёров Фаридун Ибодуллоевич	$a=4,38 \text{ \AA}, c=2,85 \text{ \AA}$ $x= 0,306$ В-кислород
Махмудов Бузургмехр Халимович	$a=4,62 \text{ \AA}, c=3,05 \text{ \AA}$ $x= 0,303$ В-фтор	Ходжахонов Шамсиддин Идрисович	$a=4,15 \text{ \AA}, c=2,65 \text{ \AA}$ $x= 0,306$ В-кислород
Мухамедова Ганджина Махмуджоновна	$a=4,87 \text{ \AA}, c=3,31 \text{ \AA}$ $x= 0,305$ В-фтор	Худойдодова Шахрихон Тоджиддиновна	$a=4,74 \text{ \AA}, c=3,19 \text{ \AA}$ $x= 0,306$ В-кислород
Низамов Амиржон Хакимжонович	$a=4,38 \text{ \AA}, c=2,85 \text{ \AA}$ $x= 0,306$ В-кислород	Шукуров Ахлиддин Бахтиёрович	$a=4,59 \text{ \AA}, c=2,96 \text{ \AA}$ $x= 0,305$ В-кислород
	$a=4,15 \text{ \AA}, c=2,65 \text{ \AA}$ $x= 0,306$ В-кислород		$a=4,62 \text{ \AA}, c=3,05 \text{ \AA}$ $x= 0,303$ В-фтор

ПОЛЕЗНЫЕ РАДИУСЫ.

Ион	Радиус, Å	Ион	Радиус, Å
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^{6+}	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

CONTINUED

No. 136

$P4_2/mnm$

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

Positions

Multiplicity,
Wyckoff letter,
Site symmetry

Coordinates

Reflection conditions

16	k	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	General: $0kl : k + l = 2n$ $00l : l = 2n$ $h00 : h = 2n$
----	-----	---	---	--	--	--	--

Special: as above, plus

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