

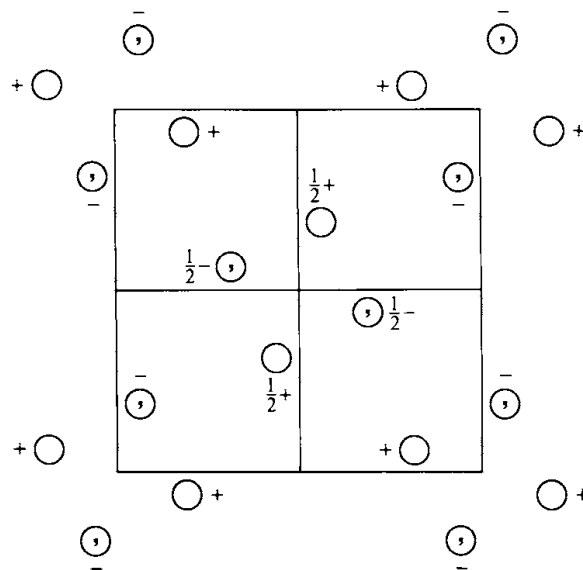
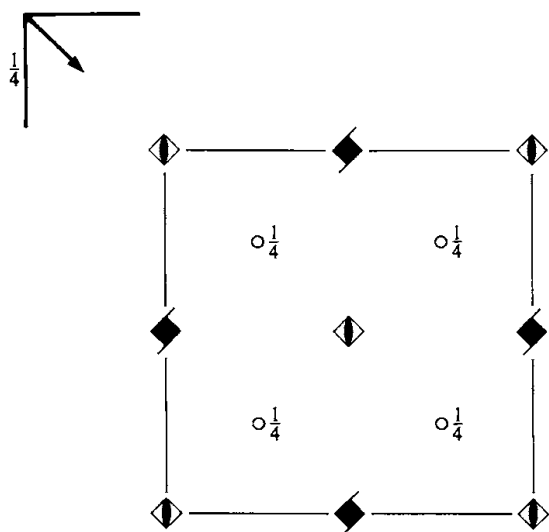
Домашнее задание №21.

Напоминаем, что допуском к контрольной работе 22(предварительно) апреля является сдача всех домашних работ и атласа.

ЗАДАНИЕ №1

Составить квадрат Кейли для пространственной группы  $4_2/n$ .

График пространственной группы рисовали на семинаре. Можно воспользоваться рисунком с семинара, можно предлагаемым ниже.



квадрат Кейли для пространственной группы  $4_2/n$

1	$4_2^1$	$4_2^2 (=2, \bar{4}^2)$	$4_2^3$	$\bar{4}^1$	$\bar{4}^3$	$n_z$	$\bar{1}$
$4_2^1$	2	$4_2^3$	1	$\bar{1}$	$n_z$	$\bar{4}^1$	$\bar{4}^3$
$4_2 (=2, \bar{4}^2)$							
$4_2^3$							
$m_z$							
$\bar{4}^1$							
$\bar{4}^3$							
$\bar{1}$							

В качестве примера: 4/m

1	$4^1$	$4_2 (=2, \bar{4}^2)$	$4^3$	$\bar{4}^1$	$\bar{4}^3$	$m_z$	$\bar{1}$
$4^1$	2	$4^3$	1	$m_z$	$\bar{1}$	$\bar{4}^3$	$\bar{4}^1$
$4_2 (=2, \bar{4}^2)$	$4^3$	1	$4^1$	$\bar{4}^3$	$\bar{4}^1$	$\bar{1}$	$m_z$
$4^3$	1	$4^1$	$4_2 (=2, \bar{4}^2)$	$\bar{1}$	$m_z$	$\bar{4}^1$	$\bar{4}^3$
$\bar{4}^1$	$m_z$	$\bar{4}^3$	$\bar{1}$	$4_2 (=2, \bar{4}^2)$	1	$4^3$	$4^1$
$\bar{4}^3$	$\bar{1}$	$\bar{4}^1$	$m_z$	1	$4_2 (=2, \bar{4}^2)$	$4^1$	$4^3$
$m_z$	$\bar{4}^3$	$\bar{1}$	$\bar{4}^1$	$4^3$	$4^1$	1	$4_2 (=2, \bar{4}^2)$
$\bar{1}$	$\bar{4}^1$	$m_z$	$\bar{4}^3$	$4^1$	$4^3$	$4_2 (=2, \bar{4}^2)$	1

### ЗАДАНИЕ №2

1. На чертеже структуры рутила (делали на семинаре) выделить А-полиэдры, определить характер их соединения.
2. Проанализировать межатомные расстояния, сделать заключение о типе атома А.
3. Дать полное описание структуры, включая словесное.

Михайлов Артем	$a=4,38 \text{ \AA}, c=2,85 \text{ \AA}$ $x= 0,306,$ В-кислород	Каменева Василиса	$a=4,59 \text{ \AA}, c=2,96 \text{ \AA}$ $x= 0,305$ В-кислород
Свижевская Мария	$a=4,15 \text{ \AA}, c=2,65 \text{ \AA}$ $x= 0,306$ В-кислород	Селезнева Вероника	$a=4,59 \text{ \AA}, c=2,96 \text{ \AA}$ $x= 0,305$ В-кислород
Сокольников Максим	$a=4,74 \text{ \AA}, c=3,19 \text{ \AA}$ $x= 0,306$ В-кислород	Апиянц София	$a=4,62 \text{ \AA}, c=3,05 \text{ \AA}$ $x= 0,303$ В-фтор
Знаменская Елена	$a=4,59 \text{ \AA}, c=2,96 \text{ \AA}$ $x= 0,305$ В-кислород	Медникова Яна	$a=4,38 \text{ \AA}, c=2,85 \text{ \AA}$ $x= 0,306,$ В-кислород
Геншприг Арсений	$a=4,62 \text{ \AA}, c=3,05 \text{ \AA}$ $x= 0,303$ В-фтор	Козлова Мария	$a=4,15 \text{ \AA}, c=2,65 \text{ \AA}$ $x= 0,306$ В-кислород
Окладников Дмитрий	$a=4,87 \text{ \AA}, c=3,31 \text{ \AA}$ $x= 0,305$ В-фтор	Тимашов Даниил	$a=4,74 \text{ \AA}, c=3,19 \text{ \AA}$ $x= 0,306$ В-кислород
Кузин Мстислав	$a=4,38 \text{ \AA}, c=2,85 \text{ \AA}$ $x= 0,306,$ В-кислород	Захваткин Владимир	$a=4,59 \text{ \AA}, c=2,96 \text{ \AA}$ $x= 0,305$ В-кислород
Гуляева Екатерина	$a=4,15 \text{ \AA}, c=2,65 \text{ \AA}$ $x= 0,306$ В-кислород		

Базаева Евгения	$a=4,38 \text{ \AA}, c=2,85 \text{ \AA}$ $x= 0,306,$ В-кислород		
-----------------	---	--	--

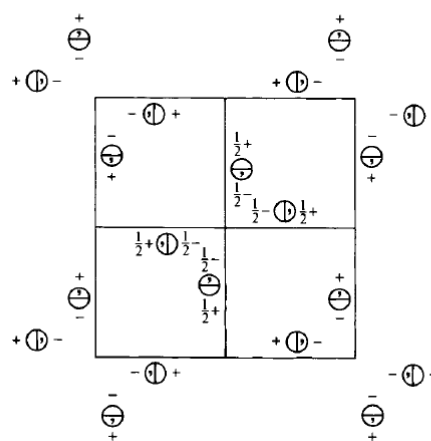
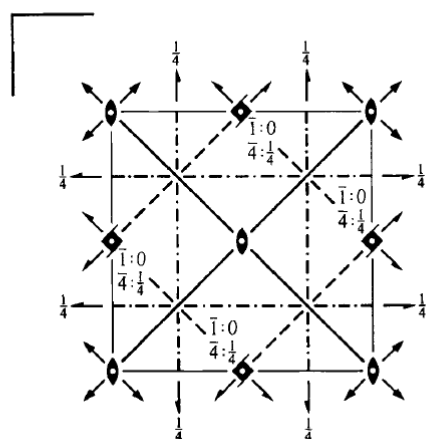
**ПОЛЕЗНЫЕ РАДИУСЫ.**

Ион	Радиус, $\text{\AA}$	Ион	Радиус, $\text{\AA}$
$\text{O}^{2-}$	1,35	$\text{Na}^+$	0,98
$\text{F}^-$	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	$\text{A}^{\text{g}+}$	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

No. 136

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

Patterson symmetry  $P4/mmm$



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

**Positions**

		Coordinates				Reflection conditions
						General:
Multiplicity,						
Wyckoff letter,						
Site symmetry						
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) $y, x, z$	$0kl : k + l = 2n$ $00l : l = 2n$ $h00 : h = 2n$
Special: as above, plus						
8	$j\ \dots m$	$x, x, z$ $\bar{x} + \frac{1}{2}, x + \frac{1}{2}, \bar{z} + \frac{1}{2}$	$\bar{x}, \bar{x}, z$ $x + \frac{1}{2}, \bar{x} + \frac{1}{2}, \bar{z} + \frac{1}{2}$	$\bar{x} + \frac{1}{2}, x + \frac{1}{2}, z + \frac{1}{2}$ $x, x, \bar{z}$	$x + \frac{1}{2}, \bar{x} + \frac{1}{2}, z + \frac{1}{2}$ $\bar{x}, \bar{x}, \bar{z}$	no extra conditions
8	$i\ m\dots$	$x, y, 0$ $\bar{x} + \frac{1}{2}, y + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$\bar{x}, \bar{y}, 0$ $x + \frac{1}{2}, \bar{y} + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$\bar{y} + \frac{1}{2}, x + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$ $y, x, 0$	$y + \frac{1}{2}, \bar{x} + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$ $\bar{y}, \bar{x}, 0$	no extra conditions
8	$h\ 2\dots$	$0, \frac{1}{2}, z$ $0, \frac{1}{2}, \bar{z}$	$0, \frac{1}{2}, z + \frac{1}{2}$ $0, \frac{1}{2}, \bar{z} + \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, 0, \bar{z} + \frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}, 0, z + \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, 0, \bar{z}$ $\frac{1}{2}, 0, z$	$hkl : h + k, l = 2n$
4	$g\ m \cdot 2m$	$x, \bar{x}, 0$	$\bar{x}, x, 0$	$x + \frac{1}{2}, x + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$\bar{x} + \frac{1}{2}, \bar{x} + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	no extra conditions
4	$f\ m \cdot 2m$	$x, x, 0$	$\bar{x}, \bar{x}, 0$	$\bar{x} + \frac{1}{2}, x + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$x + \frac{1}{2}, \bar{x} + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	no extra conditions
4	$e\ 2 \cdot mm$	$0, 0, z$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, z + \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \bar{z} + \frac{1}{2}$	$0, 0, \bar{z}$	$hkl : h + k + l = 2n$
4	$d\ \bar{4}\dots$	$0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$0, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$	$\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, 0, \frac{3}{2}$	$hkl : h + k, l = 2n$
4	$c\ 2/m\dots$	$0, \frac{1}{2}, 0$	$0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, 0, 0$	$hkl : h + k, l = 2n$
2	$b\ m \cdot mm$	$0, 0, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$			$hkl : h + k + l = 2n$
2	$a\ m \cdot mm$	$0, 0, 0$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$			$hkl : h + k + l = 2n$