

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:** $a=4,59\text{Å}$, $c=2,959\text{Å}$,

Позиции атомов: А (катион) – позиция a , В (анион) – позиция f ($x=0,306$)

(рекомендуемый масштаб: $1\text{Å} = 2\text{см}$)

Полезные радиусы:

ОН	1,35 Å	О	1,35 Å	F	1,33 Å	C-	1,60 Å
I-	2,20 Å	Cl-	1,81 Å	Br-	1,96 Å		
Cu+	0,70 Å	Li+	0,60 Å	Na+	0,98 Å	Ag+	1,02 Å
K+	1,40 Å	Be ²⁺	0,30 Å	Zn ²⁺	0,60 Å	Mg ²⁺	0,70 Å
Fe ²⁺	0,78 Å	Ca ²⁺	1,00 Å	Ba ²⁺	1,35 Å	Sr ²⁺	1,20 Å
Si ⁴⁺	0,45 Å	Ge ⁴⁺	0,56 Å	Ti ⁴⁺	0,63 Å	Sn ⁴⁺	0,70 Å

$P4_2/mnm$

D_{4h}^{14}

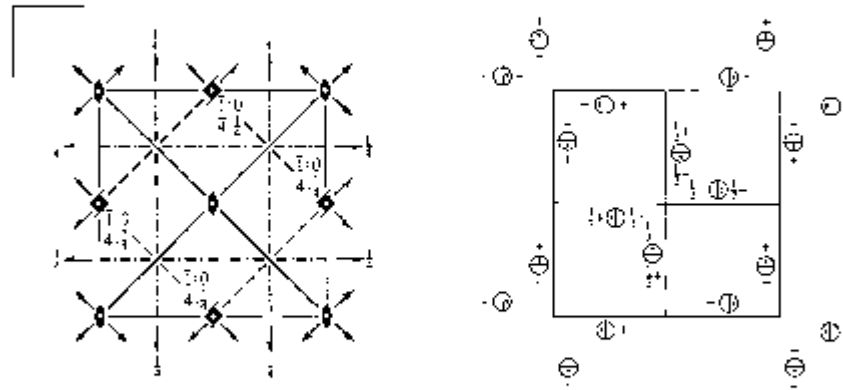
$4/mmm$

Tetragonal

No. 136

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

Patterson symmetry $P4/mmm$



Origin at centre (mmm) at $2/m12/m$

Asymmetric unit $0 \leq x \leq \frac{1}{2}$; $0 \leq y \leq \frac{1}{2}$; $0 \leq z \leq \frac{1}{2}$; $x \leq y$

Symmetry operations

- | | | | |
|---|---|---|---|
| (1) 1 | (2) $2 \ 0,0,z$ | (3) $4^+(0,0,\frac{1}{2}) \ 0,\frac{1}{2},z$ | (4) $4^-(0,0,\frac{1}{2}) \ \frac{1}{2},0,z$ |
| (5) $2(0,\frac{1}{2},0) \ \frac{1}{2},y,\frac{1}{2}$ | (6) $2(\frac{1}{2},0,0) \ x,\frac{1}{2},\frac{1}{2}$ | (7) $2 \ x,x,0$ | (8) $2 \ x,x,0$ |
| (9) $i \ 0,0,0$ | (10) $m \ x,y,0$ | (11) $4^+ \ \frac{1}{2},0,z; \ \frac{1}{2},0,\frac{1}{2}$ | (12) $4^- \ 0,\frac{1}{2},z; \ 0,\frac{1}{2},\frac{1}{2}$ |
| (13) $n(\frac{1}{2},0,\frac{1}{2}) \ x,\frac{1}{2},z$ | (14) $n(0,\frac{1}{2},\frac{1}{2}) \ \frac{1}{2},y,z$ | (15) $m \ x,x,z$ | (16) $m \ x,x,z$ |

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

Symmetry of special projections

Along $[001]$ $p4gm$
 $a' = a$ $b' = b$
Origin at $0, \frac{1}{2}, z$

Along $[100]$ $c2mm$
 $a' = b$ $b' = c$
Origin at $x, 0, 0$

Along $[110]$ $p2mm$
 $a' = \frac{1}{2}(-a+b)$ $b' = c$
Origin at $x, x, 0$

Maximal non-isomorphic subgroups

I	[2] $P\bar{4}n2$ (118)	1; 2; 7; 8; 11; 12; 13; 14
	[2] $P\bar{4}2_1m$ (113)	1; 2; 5; 6; 11; 12; 15; 16
	[2] $P4_2nm$ (102)	1; 2; 3; 4; 13; 14; 15; 16
	[2] $P4_22_2$ (94)	1; 2; 3; 4; 5; 6; 7; 8
	[2] $P4_2/m11$ ($P4_2/m$, 84)	1; 2; 3; 4; 9; 10; 11; 12
	[2] $P2/m12/m$ ($Cmmm$, 65)	1; 2; 7; 8; 9; 10; 15; 16
	[2] $P2/m2_1/n1$ ($Pnmm$, 58)	1; 2; 5; 6; 9; 10; 13; 14

IIa none

IIb none

Maximal isomorphic subgroups of lowest index

IIc [3] $P4_2/mnm$ ($c' = 3c$) (136); [9] $P4_2/mnm$ ($a' = 3a, b' = 3b$) (136)

Minimal non-isomorphic supergroups

I none

II [2] $C4_2/mcm$ ($P4_2/mmc$, 131); [2] $I4/mmm$ (139); [2] $P4/mbm$ ($c' = \frac{1}{2}c$) (127)