

Материалы для подготовки к контрольной 3

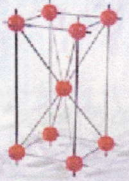
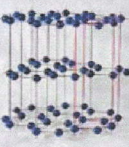
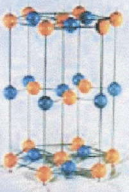
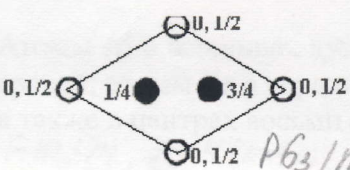
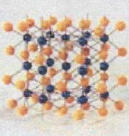
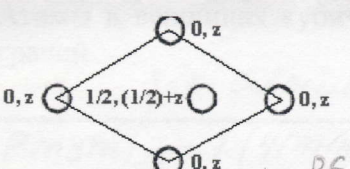
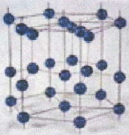
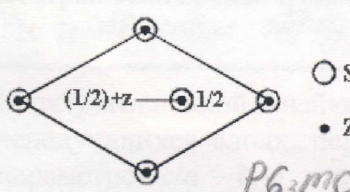

Описание некоторых простых кристаллических структур ("джентльменский набор")



α-Po	<p>Атомы в вершинах кубической ячейки плотн. слои наклонно. плотными слоями $Pm\bar{3}m, Z=1(m\bar{3}m)$</p>	
α-Fe	<p>$a\sqrt{3}=4r'$ ← объемная диагональ Атомы в вершинах и в центре кубической ячейки $Fm\bar{3}m$ статие слоев, располож. плотнейшими слоями; $I\bar{m}3m, Z=2(m\bar{3}m)$ $K4=8$</p>	
Fe₃Al	<p>Атомы Al в вершинах кубической ячейки и в центрах всех ее граней; атомы Fe в серединах всех ребер ячейки, в ее центре, а также в центрах восьми октантов¹⁾ $Fm\bar{3}m, Z=4(m\bar{3}m, \bar{4}3m, m\bar{3}m)$</p>	
Cu	<p>$Fm\bar{3}m, Z=4(m\bar{3}m); a\sqrt{2}=4r$ Атомы в вершинах кубической ячейки и в центрах всех ее граней плотнейшие слои 3-х слойные ПШУ; $K4=12$</p>	
Cu₃Au	<p>$Pm\bar{3}m, Z=1(4/m\bar{3}m, m\bar{3}m)$ Атомы Au в вершинах кубической ячейки; атомы Cu в центрах всех граней ячейки Cu и Au свои слои 3-х слойн ПШУ</p>	
CuAu	<p>В тетрагональной ячейке атомы Au и Cu расположены в чередующихся слоях, перпендикулярных оси 4. Отношение параметров $c/a=1,41$; $P4/mmm, Z=1(4/mmm, 4/mmm)$</p>	
Mg $P6_3/mmc, Z=2(6/m2)$	<p>Атомы в вершинах гексагональной ячейки и в центре одной из двух тригональных призм, на которые делится гексагональный параллелепипед плоскостью, проходящей через малые объемные диагонали ячейки. Отношение параметров $c/a=1,62$ $2^{x} ПШУ; K4=12; a=2r$</p>	
CsCl	<p>$Pm\bar{3}m, Z=1(m\bar{3}m; m\bar{3}m)$ Атомы Cl в вершинах кубической ячейки; атом Cs в ее центре $K4Cs=8; a\sqrt{3}=4r'; r'$-радиусе с попер. по ах.</p>	

NaCl	<p>Тетрагональн. иониты; $Fm\bar{3}m, z=4(m\bar{3}m, m\bar{3}m)$</p> <p>Атомы Na в вершинах кубической ячейки и в центрах всех граней; атомы Cl в центре ячейки и в серединах всех ее ребер $3 \times \text{сл. ПЦУ}; K4M2=6$</p>	
CaF2	<p>Моноклин. иониты, $Fm\bar{3}m, z=4(m\bar{3}m, \bar{4}3m)$</p> <p>Атомы Ca в вершинах кубической ячейки и в центрах всех ее граней; атомы F в центрах всех восьми октантов</p>	
Алмаз	<p>Моноклин. (ковал.)</p> <p>Атомы C в вершинах кубической ячейки, в центрах ее граней и в центрах четырех из восьми октантов (в шахматном порядке) $Fd\bar{3}m, z=6(\bar{4}3m)$</p>	
ZnS (сфалерит)	<p>$F\bar{4}3m, z=4(\bar{4}3m, \bar{4}3m)$</p> <p>Атомы S в вершинах кубической ячейки и в центрах ее граней; атомы Zn в центрах четырех из восьми октантов (в шахматном порядке) $3 \times \text{сл. ПЦУ}$</p>	
Cu2O	<p>$Pn\bar{3}m, z=2(\bar{3}m, \bar{4}3m)$</p> <p>Атомы O в вершинах и в центре кубической ячейки; атомы Cu в центрах четырех из восьми октантов (в шахматном порядке) $1 \text{ ат. } z_0 = \frac{a\sqrt{3}}{4}, a = \frac{4(z_0 + z_0)}{\sqrt{3}}, \rho = \frac{166 \cdot M \cdot z}{64(z_0 + z_0)^3}$</p>	
ReO3	<p>$Pm\bar{3}m, z=1(m\bar{3}m, 4/mmm)$</p> <p>Атомы Re в вершинах кубической ячейки; атомы O в серединах всех ее ребер Не опис. в терм. ПЦУ, ПЦК</p>	
CaTiO3	<p>$Pm\bar{3}m, z=1(m\bar{3}m, m\bar{3}m, 4/mmm)$</p> <p>Атомы Ti в вершинах кубической ячейки, атом Ca в ее центре; атомы O в серединах всех ребер ячейки ПЦУ отраз. ат. O²⁻ и Ca²⁺ 3-х слоев.</p>	
AlB2	<p>Атомы Al в вершинах гексагональной ячейки, атомы B в центрах обеих тригональных призм, на которые делится гексагональный параллелепипед плоскостью, проходящей через малые объемные диагонали ячейки. Отношение параметров $c/a = 1,08$ $P6/mmm, z=1(6/mmm, \bar{6}m2)$</p> <p>$\rho = \frac{166 \cdot M \cdot z}{a^2 c \cdot \frac{\sqrt{3}}{2}}$ $\frac{12 \cdot 6 + 3}{24}$</p>	
Hg	<p>Атомы в вершинах гексагональной ячейки; еще два атома на большой объемной диагонали ячейки (они делят эту диагональ на три равные части). Отношение параметров $c/a = 1,92$. $R\bar{3}m, z=3(\bar{3}m)$</p>	

Zn свои шараобраз. (по тем устр. Mg, но стр. радиусы в бр. ос. выш. на.)
плотнейший ш. слой
Re $6/mmm$ шара - родо $z=1(6/mmm)$

In	<p>Атомы в вершинах и в центре тетрагональной ячейки. Отношение параметров $c/a = 1,08$. <i>$I41mmm; Z = 2 (41mmm)$</i></p>	
α-графит	<p>Атомы С образуют слои, состоящие из сопряженных правильных шестиугольников. Слои налагаются по закону ...АВАВАВ...; слой В сдвинут относительно слоя А на величину вектора, равного связи С-С. Отношение параметров $c/a = 2,72$. <i>$P6_3/mmc; Z = 4 (6m2)^2$</i></p>	
BN	<p>Атомы В и N, чередуясь (атом В окружен атомами N, атом N окружен атомами В), образуют слои, состоящие из сопряженных правильных шестиугольников. Слои налагаются так, что шестичленные циклы находятся друг над другом (атомы В над атомами N, атомы N над атомами В). Отношение параметров $c/a = 2,66$. <i>$P6m2; Z = 2 (6m2; 6m2)$</i></p>	
NiAs <i>Структ. типа NiAs</i>	<p>Гексагональная ячейка с отношением параметров $c/a = 1,39$. <i>2x сл. NiAs</i></p>  <p>Координаты атомов: Ni: 0, 0, 0; 0, 0, 1/2 As: 2/3, 1/3, 1/4; 1/3, 2/3, 3/4 <i>$P6_3/mmc; Z = 2 (3m; 6m2)$</i></p>	
Лонсдейлит	<p>Гексагональная ячейка с отношением параметров $c/a = 1,63$.</p>  <p>Координаты атомов: 0, 0, 0; 0, 0, z; 1/3, 2/3, 1/2; 1/3, 2/3, (1/2)+z, где $z \approx 3/8$ <i>$P6_3/mmc; Z = 4 (3m)$</i></p>	
ZnS (вюрцит)	<p>Гексагональная ячейка с отношением параметров $c/a = 1,64$. <i>2x слои NiAs</i></p>  <p>Координаты атомов: S: 0, 0, 0; 1/3, 2/3, 1/2 Zn: 0, 0, z; 1/3, 2/3, (1/2)+z, где $z \approx 3/8$ <i>$P6_3mc; Z = 2 (3m; 3m)$</i></p>	
β-Po	<p>Структура α-Po (см. выше), немного сжатая вдоль оси 3. Отношение параметров $c/a = 1,50$. <i>$P3m; Z = 3 (3m)$</i></p>	

1) Октантами здесь и ниже называются восемь малых кубов, на которые кубическая ячейка делится плоскостями, проходящими через ее центр параллельно граням.