

Что надо знать и уметь к контрольной работе №3

1. Знать расположение атомов, их координационные числа, тип и число пустот, приходящихся на 1 атом, в примитивной кубической (ПК), примитивной гексагональной (ПГ), ОЦК, ГПУ и ГЦК-структурах металлов.

Уметь вывести связь параметров ячейки и радиусов пустот с радиусами атомов.

Знать два типа обозначения последовательности слоев (А, В, С и g , k) и их связь в плотнейших упаковках металлов.

2. Для перечисленных ниже структурных типов и отдельных веществ уметь изобразить проекции элементарных ячеек, в том числе

а) по их описанию (тип решетки, мотивы расположения атомов и заполнения пустот)

б) по координатам атомов (в долях трансляций **a**, **b** и **c**)

с указанием координационных чисел и координационных многогранников атомов.

Узнавать эти структуры по описанию и по проекции элементарной ячейки, в том числе со сдвигом начала координат

Структурные типы	Вещества
Mg	α -Po
Cu	Hg
α -Fe (α -W)	C, алмаз
Cu ₃ Au	C, α -графит
NaCl	
CsCl	
ZnS (сфалерит, вюрцит)	
NiAs *	
Li ₂ O, CaF ₂ *	
Cu ₂ O *	
ReO ₃ , CaTiO ₃ (кубический)	
Cl ₂	

* возможны два варианта выбора начала координат

Умень рисовать проекцию элементарной ячейки по координатам атомов.
Знать не менее 2-3 примеров соединений для каждого структурного типа.

3. Знать тип упаковки анионов и мотив заполнения пустот катионами для следующих бинарных и тройных соединений :

TiO₂ (рутил), CdI₂ (2-слойный, 4-слойный), CdCl₂, MoS₂, α-Al₂O₃, FeCl₃, перовскиты ABO₃, шпинели AB₂O₄, фуллериды щелочных металлов M₃C₆₀

4. Знать принципы строения или мотивы расположения атомов (плотный трехмерный, 3D-каркасный, слоистый, цепочечный, островной) и их координационное окружение для следующих веществ:

лонсдейлит, фуллерен C₆₀, β-графит, серое олово, белое олово, белый фосфор, черный фосфор (p = 1 бар), серый и желтый мышьяк, ромбическая сера, красный и серый селен, α-N₂, β-N₂, кристаллы инертных газов; BeCl₂, PdCl₂, PtS, HgS (киноварь, метациннабарит), BN (гексагональный, кубический), SiO₂ (β-тридимит, β-кристобалит), водные льды Ih и Ic

5. Уметь определить стехиометрический состав бинарных и тройных соединений по мотиву заполнения пустот в заданном структурном типе.

Основные структурные типы к КР-3

Тип	ПК	ГЦК	ГПУ
CsCl	все куб.	—	—
NaCl	—	все октаэдрич.	—
NiAs	—	—	все октаэдрич.
ZnS сфалерит	—	1/2+1/2+... тетр.	—
ZnS вюрцит	—	—	1/2+1/2+... тетр.
Li ₂ O (анти-CaF ₂)	(1/2 куб.)	все тетраэдрич.	—
TiO ₂ рутил	—	—	1/2+1/2+... окт.
CdI ₂	—	—	1+0+1+... окт.
CdCl ₂ (анти-Cs ₂ O)	—	1+0+1+... окт.	—
α-Al ₂ O ₃	—	—	2/3+2/3+... окт.
ABO ₃ (BaTiO ₃)	—	(уп. A+3O), 1/4 окт.	—
AB ₂ O ₄ (шпинель)	—	1/8 тетр. + 1/2 окт.	—

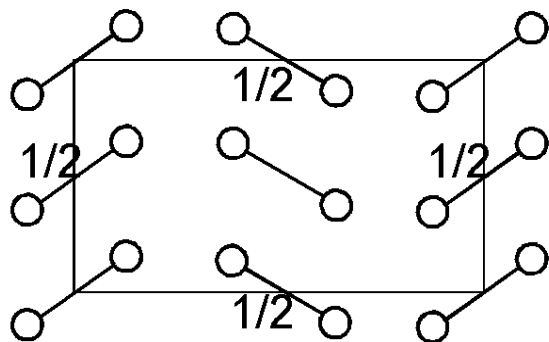
Вариант 3-й контрольной работы

1. В приведенном списке подчеркните вещества, содержащие атомы в **октаэдрическом** и **тетраэдрическом** координационном окружении: **альфа-железо**, **серый селен**, рутил, белый фосфор, кубический нитрид бора, KCl, CaF₂, кристаллический неон, сфалерит, лонсдейлит.

2. В кристаллической структуре некоторого бинарного соединения анионы образуют двуслойную плотнейшую шаровую упаковку, а катионы заполняют половину октаэдрических пустот в каждом межслоевом промежутке. Определите стехиометрический состав соединения. К какому структурному типу оно относится?

MX_n X: ...A B A B A B... 1 окт. пустота на 1 атом X, тип
M: 1/2+1/2+1/2+... заполнены 50% → MX_2 рутила

3. По данной проекции элементарной ячейки определите структурный тип соединения. Приведите примеры веществ, относящихся к этому типу



$$a \neq b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$$