

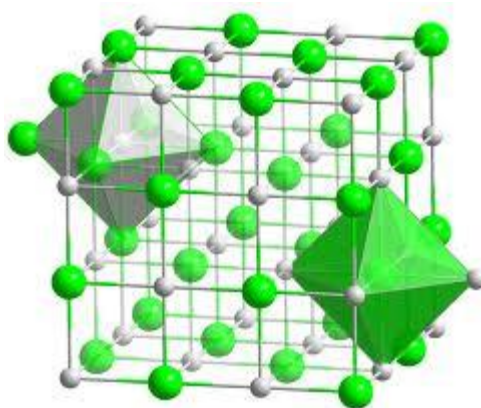
Волинський національний університет імені Лесі Українки
Факультет хімії, екології та фармації
Кафедра хімії та технологій

О. М. Строк

КРИСТАЛОХІМІЯ

Методичні вказівки до лабораторного практикуму

Частина II



Луцьк – 2020

Рекомендовано до друку науково-методичною радою Волинського національного університету імені Лесі Українки (протокол № 2 від 21 жовтня 2020 р.)

Рецензенти:

Гулай Л. Д., завідувач кафедри екології та охорони навколишнього середовища Волинського національного університету імені Лесі Українки, д.х.н., професор;

Шемет В. Я., доцент кафедри матеріалознавства Луцького національного технічного університету, к. х. н., доцент.

О. М. Строк

М 54 Кристалохімія: Метод. вказівки до лабораторного практикуму. Частина II. Видання третє, перероблене, доповнене / Оксана Мар'янівна Строк. – Луцьк, 2020. – 28 с.

Методичний посібник містить план лабораторного практикуму, опис виконання лабораторних робіт, список рекомендованої літератури, додатки, в яких наводяться зображення елементарних комірок кристалів усіх сингоній та кристалічних ґраток основних структурних типів. До кожної теми подано питання та вправи для самопідготовки, сформульовано мету роботи. Видання третє, перероблене, доповнене.

Для студентів II курсу підготовки бакалавра, галузей знань – 10 «Природничі науки» та 01 «Освіта», спеціальностей – 014 Середня освіта (Хімія), 102 «Хімія», за освітньою програмою «Хімія», викладачів та лаборантів, які проводять лабораторні заняття.

ЗМІСТ

Пояснювальна записка	4
План проходження лабораторного практикуму	5
<u>Лабораторна робота № 6.</u> Ґратки Браве. Вивчення моделей кристалічних ґраток	6
<u>Лабораторна робота № 7.</u> Просторові групи симетрії. Розв'язування типових задач	7
<u>Лабораторна робота № 8.</u> Найщільніші упаковки. Розв'язування типових задач	13
<u>Лабораторна робота № 9.</u> Основні структурні типи. Розв'язування типових задач	17
Список рекомендованої літератури	20
<u>Додаток А.</u> Розподіл 14 комірок Браве за сингоніями	22
<u>Додаток Б.</u> Основні структурні типи	24

Пояснювальна записка

За своїм змістом навчальна дисципліна „Кристалохімія”, що читається студентам II-го курсу факультету хімії, екології та фармації, підготовки бакалавра, галузей знань – 10 «Природничі науки» та 01 «Освіта», спеціальностей – 014 Середня освіта (Хімія), 102 «Хімія», за освітньою програмою «Хімія», передбачає вивчення симетрії зовнішніх форм та внутрішньої будови речовин, основних відомостей про кристалічну будову простих і складних речовин. Сприяє поглибленню теоретичних знань з хімії шляхом більш детального вивчення закономірностей будови кристалічних тіл і є ключем до вивчення основ методів дослідження таких речовин.

Згідно з навчальним планом, на її вивчення відводиться 54 аудиторні години: 26 год. лекційних, 28 год. лабораторних. Форма контролю – залік. Практикум укладено відповідно до сучасного розвитку хімічної науки і державних вимог до підготовки бакалаврів-хіміків.

Організація лабораторної роботи повинна сприяти розвитку хімічного мислення, просторової уяви, формувати розуміння атомної будови кристалічних тіл, її взаємозв'язок із зовнішньою огранкою кристалів тощо. Мета роботи – вивчити типи ґраток Браве, їх характеристики, ознайомитись з моделями кристалічних структур та розглянути основні структурні типи, навчитись розшифровувати символи просторових груп симетрії, ПСТ тощо. До кожної теми наведено низку запитань, відповідаючи на які студент зможе якісно засвоїти матеріал. Вони розраховані на самостійну роботу студента, яка є невід'ємною частиною навчального процесу. У кінці методичного посібника подано список літератури для самостійної роботи та додатки з зображенням ґраток Браве та основних структурних типів.

Пропущені лабораторні заняття, незалежно від причини пропуску, повинні бути відпрацьовані. Відпрацювання їх проводиться у позаурочний час у присутності викладача за раніше узгодженим графіком.

План
проходження лабораторного практикуму
з кристалохімії
для студентів 2-го курсу факультету хімії, екології та фармації

№ заняття	Теми лабораторних робіт	К-ть годин
6.	Ґратки Браве. Вивчення моделей кристалічних ґраток	4
7.	Просторові групи симетрії. Розв'язування типових задач	2
8.	Найщільніші упаковки. Розв'язування типових задач	2
9.	Основні структурні типи. Розв'язування типових задач	4
Модульна контрольна робота № 2		

Лабораторна робота № 6

Тема: Гратки Браве. Вивчення моделей кристалічних ґраток

Мета роботи: розглянути моделі кристалічних ґраток, навчитись визначати тип комірки Браве, сингонію; підраховувати кількість формульних одиниць у елементарній комірці; визначати координаційне число та форму координаційного многогранника.

1. План лабораторної роботи:

1. Розгляд моделей структур простих речовин та складних речовин.
2. Розбір просторової моделі за схемою:
 - 2.1. Визначення типу ґратки Браве, сингонії.
 - 2.2. Визначення кількості атомів (формульних одиниць) у елементарній комірці.
 - 2.3. Визначення координаційного числа, координаційного многогранника.

2. Питання для самопідготовки:

1. Що таке просторова ґратка? Яка різниця між просторовою ґраткою та структурою кристалу?
2. Які умови вибору елементарного паралелепіпеда (умови Браве)?
3. Які типи комірок Браве існують? Скільки атомів припадає на кожену комірку?
4. Вказати 14 типів комірок Браве.
5. Доведіть неможливість існування в кристалічних многогранниках і структурах осей симетрії 5-го порядку.
6. Доведіть неможливість існування в кристалічних многогранниках і структурах осей симетрії 7-го і вищих порядків.

7. Доведіть неможливість існування комірки, центрованої по двох парах граней.
8. Чому не існує тетрагональних базоцентрованої та гранецентрованої комірок? Відповідь аргументувати.
9. Чому не існує кубічної базоцентрованої комірки? Відповідь аргументувати.
10. Що таке координаційне число, координаційний многогранник?
11. Що таке формульна одиниця та як її розрахувати? Що називають базисом комірки?
12. Що називається гвинтовою віссю симетрії? Охарактеризувати гвинтову вісь 4_1 .
13. Що називається площиною ковзного відбиття? Які типи цих площин існують?

Лабораторна робота № 7

Тема: Просторові групи симетрії. Розв'язування типових задач

Мета роботи: навчитись розшифровувати символи просторових груп симетрії.

1. Питання та вправи для самопідготовки:

1. Що називається просторовою групою симетрії, скільки їх є?
2. Які правила запису символів просторових груп симетрії?
3. Вкажіть елементи симетрії, тип комірки Браве, сингонію та параметри елементарного паралелепіпеда таких просторових груп: а) $P2/c$; б) $Cmma$; в) $I4cm$; г) $F4_232$. Відповідь аргументуйте.

4. Вкажіть елементи симетрії, тип комірки Браве, сингонію та параметри елементарного паралелепіпеда таких просторових груп: а) $P1$; б) $Pna2_1$; в) $R\bar{3}c$; г) $P6/mmm$. Відповідь аргументуйте.
5. Вкажіть елементи симетрії, тип комірки Браве, сингонію та параметри елементарного паралелепіпеда таких просторових груп: а) $B2/m$; б) $P622$; в) $P4_2/nbc$; г) $I2_13$. Відповідь аргументуйте.
6. Вкажіть елементи симетрії, тип комірки Браве, сингонію та параметри елементарного паралелепіпеда таких просторових груп: а) $P6_3mc$; б) $P31m$; в) $I\bar{4}c2$; г) $Am2$. Відповідь аргументуйте.
7. Вкажіть елементи симетрії, тип комірки Браве, сингонію та параметри елементарного паралелепіпеда таких просторових груп: а) $Fd3m$; б) $R32$; в) $P6_3/mmc$; г) $Aba2$. Відповідь аргументуйте.
8. Вкажіть елементи симетрії, тип комірки Браве, сингонію та параметри елементарного паралелепіпеда таких просторових груп: а) $Im3m$; б) $P4_21_2$; в) $R3m$; г) $Fmm2$. Відповідь аргументуйте.
9. Вкажіть елементи симетрії, тип комірки Браве, сингонію та параметри елементарного паралелепіпеда таких просторових груп: а) $P2_12_12$; б) $I422$; в) $P6cc$; г) $F432$. Відповідь аргументуйте.
10. Вкажіть елементи симетрії, тип комірки Браве, сингонію та параметри елементарного паралелепіпеда таких просторових груп: а) $Im3$; б) $C2$; в) $Am2$; г) $P6_522$. Відповідь аргументуйте.
11. Вкажіть елементи симетрії, тип комірки Браве, сингонію та параметри елементарного паралелепіпеда таких просторових груп: а) $P\bar{3}1c$; б) $P23$; в) $I\bar{4}2$; г) $Fmmm$. Відповідь аргументуйте.
12. Вкажіть елементи симетрії, тип комірки Браве, сингонію та параметри елементарного паралелепіпеда таких просторових груп: а) $Pcca$; б) $Fd3c$; в) $P6_222$; г) $I4_1md$. Відповідь аргументуйте.
13. Вкажіть елементи симетрії, тип комірки Браве, сингонію та параметри елементарного паралелепіпеда таких просторових груп: а) $F23$; б) $I\bar{4}m2$; в) $R3c$; г) $P2/c$. Відповідь аргументуйте.

14. Вкажіть елементи симетрії, тип комірки Браве, сингонію та параметри елементарного паралелепіпеда таких просторових груп: а) $Cmcm$; б) $P\bar{1}$; в) $F\bar{4}3n$; г) $I4_1/a$. Відповідь аргументуйте.
15. Вкажіть елементи симетрії, тип комірки Браве, сингонію та параметри елементарного паралелепіпеда таких просторових груп: а) $Fddd$; б) $I4mm$; в) $P3_2$; г) Cc . Відповідь аргументуйте.
16. Вкажіть елементи симетрії, тип комірки Браве, сингонію та параметри елементарного паралелепіпеда таких просторових груп: а) $P2_1$; б) $I222$; в) $R32$; г) $Fm3m$. Відповідь аргументуйте.
17. Вкажіть елементи симетрії, тип комірки Браве, сингонію та параметри елементарного паралелепіпеда таких просторових груп: а) $Fm3$; б) $I4_1/amd$; в) $P6_322$; г) $Cmc2_1$. Відповідь аргументуйте.
18. Вкажіть елементи симетрії, тип комірки Браве, сингонію та параметри елементарного паралелепіпеда таких просторових груп: а) $P1$; б) $C2/m$; в) $Immm$; г) $F4_232$. Відповідь аргументуйте.
19. Вкажіть елементи симетрії, тип комірки Браве, сингонію та параметри елементарного паралелепіпеда таких просторових груп: а) $Pm3m$; б) $I4/m$; в) $Fdd2$; г) $C2/c$. Відповідь аргументуйте.
20. Вкажіть елементи симетрії, тип комірки Браве, сингонію та параметри елементарного паралелепіпеда таких просторових груп: а) $P2/c$; б) $C222_1$; в) $I4cm$; г) $Fm3c$. Відповідь аргументуйте.
21. Вкажіть елементи симетрії, тип комірки Браве, сингонію та параметри елементарного паралелепіпеда таких просторових груп: а) $F\bar{4}3m$; б) $I\bar{4}2m$; в) $P\bar{6}$; г) $Abm2$. Відповідь аргументуйте.
22. Вкажіть елементи симетрії, тип комірки Браве, сингонію та параметри елементарного паралелепіпеда таких просторових груп: а) $F222$; б) $Ia3d$; в) $P6_3/mcm$; г) $Ama2$. Відповідь аргументуйте.
23. Вкажіть елементи симетрії, тип комірки Браве, сингонію та параметри елементарного паралелепіпеда таких просторових груп: а) $R\bar{3}$; б) $I4/mmm$; в) $Pm3$; г) $Ccca$.

24. Вкажіть елементи симетрії, тип комірки Браве, сингонію та параметри елементарного паралелепіпеда таких просторових груп: а) Cm ; б) $P4_2/n$; в) $Imma$; г) $F4_132$. Відповідь аргументуйте.
25. Вкажіть елементи симетрії, тип комірки Браве, сингонію та параметри елементарного паралелепіпеда таких просторових груп: а) $I2_13$; б) $F\bar{4}3c$; в) $P6_3$; г) $P2$. Відповідь аргументуйте.
26. Вкажіть елементи симетрії, тип комірки Браве, сингонію та параметри елементарного паралелепіпеда таких просторових груп: а) $P2/m$; б) $C222$; в) $I4/mcm$; г) $Fd\bar{3}$. Відповідь аргументуйте.
27. Вкажіть тип комірки Браве, сингонію та параметри елементарного паралелепіпеда таких просторових груп: а) $Pn3n$; б) $I4_1/acd$; в) $P\bar{6}2m$ г) $Cmc2_1$. Відповідь аргументуйте.
28. Вкажіть елементи симетрії, тип комірки Браве, сингонію та параметри елементарного паралелепіпеда таких просторових груп: а) $Fmm2$; б) Pm ; в) $P1$; г) $I23$. Відповідь аргументуйте.
29. Вкажіть елементи симетрії, тип комірки Браве, сингонію та параметри елементарного паралелепіпеда таких просторових груп: а) $P\bar{6}c2$; б) $I\bar{4}3m$; в) $P3m1$; г) $Cscm$. Відповідь аргументуйте.
30. Вкажіть тип комірки Браве, сингонію та параметри елементарного паралелепіпеда таких просторових груп: а) $P\bar{3}$; б) $Cmca$; в) $I4_1$; г) $F432$. Відповідь аргументуйте.
31. Вкажіть елементи симетрії, тип комірки Браве, сингонію та параметри елементарного паралелепіпеда таких просторових груп: а) $F432$; б) $P6/mcc$; в) $I4_2/mbc$; г) $Pban$. Відповідь аргументуйте.
32. Вкажіть елементи симетрії, тип комірки Браве, сингонію та параметри елементарного паралелепіпеда таких просторових груп: а) $C222_1$; б) $P4mm$; в) Cc ; г) $I4_132$. Відповідь аргументуйте.
33. β - $AgInS_2$ кристалізується у пр. гр. $P6_3mc$ з параметрами елементарного паралелепіпеда: $a=4,129 \text{ \AA}$, $c=6,688 \text{ \AA}$. До якої сингонії належить комірка речовини? Відповідь аргументуйте.

34. $\text{Ag}_{10}\text{Si}_3\text{S}_{11}$ кристалізується у пр. гр. $P\bar{1}$ з параметрами елементарного паралелепіпеда: $a=12,414 \text{ \AA}$, $b=13,476 \text{ \AA}$, $c=6,459 \text{ \AA}$, $\alpha=78,92^\circ$, $\beta=77,61^\circ$, $\gamma=68,71^\circ$. До якої сингонії належить комірка речовини? Відповідь аргументуйте.
35. $\text{Ag}_2\text{P}_2\text{S}_6$ кристалізується у пр. гр. $B2/m$ з параметрами елементарного паралелепіпеда: $a=11,210 \text{ \AA}$, $b=6,731 \text{ \AA}$, $c=6,998 \text{ \AA}$, $\gamma=126,84^\circ$. До якої сингонії належить комірка речовини? Відповідь аргументуйте.
36. $\text{Ag}_4\text{P}_2\text{S}_6$ кристалізується у пр. гр. $P2_1/c$ з параметрами елементарного паралелепіпеда: $a=6,522 \text{ \AA}$, $b=11,797 \text{ \AA}$, $c=19,616 \text{ \AA}$, $\beta=93,58^\circ$. До якої сингонії належить комірка речовини? Відповідь аргументуйте.
37. $\text{Ca}_2\text{P}_2\text{S}_6$ кристалізується у пр. гр. $P2_1/c$ з параметрами елементарного паралелепіпеда: $a=6,53 \text{ \AA}$, $b=7,29 \text{ \AA}$, $c=11,13 \text{ \AA}$, $\beta=124,5^\circ$. До якої сингонії належить комірка речовини? Відповідь аргументуйте.
38. $\text{Pb}_6\text{Sb}_{14}\text{S}_{27}$ кристалізується у пр. гр. $P6_3$ з параметрами елементарного паралелепіпеда: $a=22,148 \text{ \AA}$, $c=4,333 \text{ \AA}$. До якої сингонії належить комірка речовини? Відповідь аргументуйте.
39. $\text{Pb}_4\text{Sb}_6\text{S}_{13}$ кристалізується у пр. гр. $P1$ з параметрами елементарного паралелепіпеда: $a=16,56 \text{ \AA}$, $b=17,69 \text{ \AA}$, $c=3,982 \text{ \AA}$, $\alpha=91,09^\circ$, $\beta=96,46^\circ$, $\gamma=96,77^\circ$. До якої сингонії належить комірка речовини? Відповідь аргументуйте.
40. $\text{Pb}_7\text{Sb}_8\text{S}_{19}$ кристалізується у пр. гр. $C2/c$ з параметрами елементарного паралелепіпеда: $a=13,628 \text{ \AA}$, $b=11,943 \text{ \AA}$, $c=21,285 \text{ \AA}$, $\beta=90,90^\circ$. До якої сингонії належить комірка речовини? Відповідь аргументуйте.
41. HgGa_2Se_4 кристалізується у пр. гр. $I\bar{4}$ з параметрами елементарного паралелепіпеда: $a=5,693 \text{ \AA}$, $c=10,826 \text{ \AA}$. До якої сингонії належить комірка речовини? Відповідь аргументуйте.
42. LiAlS_2 кристалізується у пр. гр. $Pna2_1$ з параметрами елементарного паралелепіпеда: $a=6,484 \text{ \AA}$, $b=7,875 \text{ \AA}$, $c=6,188 \text{ \AA}$. До якої сингонії належить комірка речовини? Відповідь аргументуйте.

43. LiAl_5S_8 кристалізується у пр. гр. $Fd\bar{3}m$ з параметром елементарного паралелепіпеда: $a=9,996 \text{ \AA}$. До якої сингонії належить комірка речовини? Відповідь аргументуйте.
44. LiGeTe_2 кристалізується у пр. гр. $P1$ з параметрами елементарного паралелепіпеда: $a=7,255 \text{ \AA}$, $b=9,132 \text{ \AA}$, $c=11,340 \text{ \AA}$, $\alpha=75,75^\circ$, $\beta=77,11^\circ$, $\gamma=70,77^\circ$. До якої сингонії належить комірка речовини? Відповідь аргументуйте.
45. LiSbTe_2 кристалізується у пр. гр. $Fm\bar{3}m$ з параметром елементарного паралелепіпеда: $a=6,051 \text{ \AA}$. До якої сингонії належить комірка речовини? Відповідь аргументуйте.
46. $\text{Na}_2\text{Cu}_4\text{S}_3$ кристалізується у пр. гр. $C2/m$ з параметрами елементарного паралелепіпеда: $a=15,633 \text{ \AA}$, $b=3,862 \text{ \AA}$, $c=10,332 \text{ \AA}$, $\beta=121,31^\circ$. До якої сингонії належить комірка речовини? Відповідь аргументуйте.
47. NaCuSe кристалізується у пр. гр. $P4/nmm$ з параметрами елементарного паралелепіпеда: $a=4,10 \text{ \AA}$, $c=6,82 \text{ \AA}$. До якої сингонії належить комірка речовини? Відповідь аргументуйте.
48. Ag_3AsSe_3 кристалізується у пр. гр. $R\bar{3}m$ з параметрами елементарного паралелепіпеда: $a=7,143 \text{ \AA}$, $\alpha=104,22^\circ$. До якої сингонії належить комірка речовини? Відповідь аргументуйте.
49. $\text{Na}_4\text{Si}_4\text{S}_{10}$ кристалізується у пр. гр. $Stct$ з параметрами елементарного паралелепіпеда: $a=12,861 \text{ \AA}$, $b=12,720 \text{ \AA}$, $c=10,364 \text{ \AA}$. До якої сингонії належить комірка речовини?
50. NaInTe_2 кристалізується у пр. гр. $I4/mcm$ з параметрами елементарного паралелепіпеда: $a=8,33 \text{ \AA}$, $c=7,27 \text{ \AA}$. До якої сингонії належить комірка речовини? Відповідь аргументуйте.
51. Na_2GeSe_3 кристалізується у пр. гр. $P2_1/c$ з параметрами елементарного паралелепіпеда: $a=6,952 \text{ \AA}$, $b=15,230 \text{ \AA}$, $c=5,720 \text{ \AA}$, $\beta=115,24^\circ$. До якої сингонії належить комірка речовини? Відповідь аргументуйте.

52. Na_4SeS_4 кристалізується у пр. гр. $C2/m$ з параметрами елементарного паралелепіпеда: $a=19,81 \text{ \AA}$, $b=29,25 \text{ \AA}$, $c=10,96 \text{ \AA}$, $\beta=106,0^\circ$. До якої сингонії належить комірка речовини? Відповідь аргументуйте.
53. $\text{Na}_4\text{Ge}_4\text{S}_{10}$ кристалізується у пр. гр. $Cmcm$ з параметрами елементарного паралелепіпеда: $a=12,847 \text{ \AA}$, $b=12,901 \text{ \AA}$, $c=10,476 \text{ \AA}$. До якої сингонії належить комірка речовини? Відповідь аргументуйте.
54. $\text{Na}_6\text{Ge}_2\text{Se}_6$ кристалізується у пр. гр. $P2_1/c$ з параметрами елементарного паралелепіпеда: $a=8,367 \text{ \AA}$, $b=11,924 \text{ \AA}$, $c=8,158 \text{ \AA}$, $\beta=118,63^\circ$. До якої сингонії належить комірка речовини? Відповідь аргументуйте.
55. K_2GeTe_4 кристалізується у пр. гр. $P2_1/c$ з параметрами елементарного паралелепіпеда: $a=12,70 \text{ \AA}$, $b=8,68 \text{ \AA}$, $c=9,829 \text{ \AA}$, $\beta=104,8^\circ$. До якої сингонії належить комірка речовини? Відповідь аргументуйте.
56. KSnS_2 кристалізується у пр. гр. $R3$ з параметрами елементарного паралелепіпеда: $a=3,67 \text{ \AA}$, $c=25,61 \text{ \AA}$. До якої сингонії належить комірка речовини? Відповідь аргументуйте.
57. $\text{K}_6\text{Ge}_2\text{Te}_6$ кристалізується у пр. гр. $C2/m$ з параметрами елементарного паралелепіпеда: $a=16,010 \text{ \AA}$, $b=13,619 \text{ \AA}$, $c=9,713 \text{ \AA}$, $\beta=95,19^\circ$. До якої сингонії належить комірка речовини? Відповідь аргументуйте.

Лабораторна робота № 8

Тема: Найщільніші упаковки. Розв'язування типових задач

Мета роботи: навчитись розв'язувати задачі на щільні упаковки куль, складати n-шарові упаковки та записувати їх символами Ягодзінського

1. Питання та задачі для самопідготовки:

1. Які типи найщільніших упаковок куль відомі? Які їх ознаки?

2. Які порожнини утворюються між шарами щільно упакованих куль? Які їх розміри, кількість?
1. Складіть формулу 6-шарових упаковок за допомогою позначена ABC. Запишіть її за допомогою позначень Вікофа – Ягодзінського.
 2. Складіть формулу 4-шарової упаковки за допомогою позначена ABC. Запишіть її за допомогою позначень Вікофа – Ягодзінського.
 3. Складіть формулу 7-шарових упаковок за допомогою позначена ABC. Запишіть її за допомогою позначень Вікофа – Ягодзінського.
 4. Складіть формулу 5-шарової упаковки за допомогою позначена ABC. Запишіть її за допомогою позначень Вікофа – Ягодзінського.
 5. Доведіть, що існує лише одна чотирьохшарова упаковка.
 3. Доведіть, що існує лише одна п'ятишарова упаковка
 4. У сполучці A_mX_n атоми X утворюють найщільнішу кубічну упаковку. Визначити склад формульної одиниці та структурний тип, якщо атоми A займають: а) всі октаедричні пустоти; б) усі тетраедричні пустоти; в) половину тетраедричних пустот.
 5. У кристалічній структурі складу AB_2C_4 атоми C утворюють найщільнішу упаковку. Координаційне число атомів A становить 4, а атомів B – 6. Які пустоти зайняті? Яка частина пустот заповнена?
 6. У кристалічній структурі складу $A_xB_yC_9$ атоми C утворюють найщільнішу упаковку. Атоми A займають $2/3$ тетраедричних пустот, а атоми B – $5/9$ октаедричних. Знайти x і y.
 7. У кристалічній структурі складу $A_xB_2C_y$ атоми A і C разом утворюють найщільнішу упаковку, а атоми B займають $1/8$ октаедричних пустот. У іншій структурі такого ж складу упаковку утворюють атоми B і C, а атоми A займають $1/2$ тетраедричних пустот. Знайти x і y.
 8. У кристалічній структурі складу $A_xB_2C_y$ атоми C утворюють найщільнішу упаковку. Атоми A займають $1/4$ тетраедричних пустот, а атоми B – усі октаедричні пустоти. Знайти x і y.

9. У кристалічній структурі складу $A_xB_yC_2$ атоми С утворюють найщільнішу упаковку. Атоми А займають $\frac{3}{4}$ тетраедричних пустот, а атоми В – $\frac{1}{2}$ октаедричних. Знайти x і y .
10. У кристалічній структурі складу $A_xB_2C_y$ атоми С утворюють найщільнішу упаковку. Атоми А займають $\frac{1}{4}$ тетраедричних пустот, а атоми В – усі октаедричні пустоти. Знайти x і y .
11. У кристалічній структурі складу $A_xB_3C_y$ атоми С утворюють найщільнішу упаковку. Атоми А займають $\frac{3}{8}$ тетраедричних пустот, а атоми В – $\frac{1}{2}$ октаедричних. Знайти x і y .
12. Кристали $CsNiCl_3$ мають таку структуру: атоми Cl і Cs утворюють разом двошарову найщільнішу упаковку. Атоми Ni знаходяться в октаедричних пустотах. Знайти, яка частина октаедричних пустот заповнена.
13. У кристалічній структурі складу A_xBC_y атоми С утворюють найщільнішу упаковку. Атоми А займають половину тетраедричних пустот, а атоми В – $\frac{1}{4}$ октаедричних. Знайти x і y .
14. У кристалічній структурі складу A_xBC_y атоми С утворюють найщільнішу упаковку. Атоми А займають $\frac{3}{4}$ тетраедричних пустот, а атоми В – $\frac{1}{2}$ октаедричних. Знайти x і y .
15. У кристалічній структурі складу $A_xB_2C_y$ атоми С утворюють найщільнішу упаковку. Атоми А займають $\frac{1}{4}$ тетраедричних пустот, а атоми В – усі октаедричні. Знайти x і y .
16. У кристалічній структурі складу $A_xB_yC_9$ атоми С утворюють найщільнішу упаковку. Атоми А займають $\frac{1}{3}$ тетраедричних пустот, а атоми В – $\frac{4}{9}$ октаедричних. Знайти x і y .
17. У кристалічній структурі складу $A_7B_xC_y$ атоми А утворюють найщільнішу упаковку. Атоми В займають $\frac{3}{14}$ тетраедричних пустот, а атоми С – $\frac{2}{7}$ октаедричних. Знайти x і y .

18. У кристалічній структурі складу $A_xB_8C_y$ атоми В утворюють найщільнішу упаковку. Атоми А займають $3/4$ тетраедричних пустот, а атоми С – $3/8$ октаедричних. Знайти x і y .
19. У кристалічній структурі складу $A_7B_xC_y$ атоми А утворюють найщільнішу упаковку. Атоми В займають $3/7$ тетраедричних пустот, а атоми С – усі октаедричні. Знайти x і y .
20. У кристалічній структурі складу A_xBC_y атоми С утворюють найщільнішу упаковку. Атоми А займають половину тетраедричних пустот, а атоми В – $1/3$ октаедричних. Знайти x і y .
21. У кристалічній структурі складу $A_xB_yC_{12}$ атоми С утворюють найщільнішу упаковку. Атоми А займають $3/8$ тетраедричних пустот, а атоми В – $2/3$ октаедричних. Знайти x і y .
22. Бінарна сполука кристалізується у просторовій групі $Fm\bar{3}m$. Атоми А займають положення (000) і утворюють найщільнішу упаковку, атоми Х займають усі октаедричні та тетраедричні положення. Визначте склад формульної одиниці сполуки та вкажіть, яка їх кількість припадає на елементарну комірку.
23. До складу сполуки входять атоми Y, Cu, S. Атоми Сульфуру утворюють двошарову найщільнішу упаковку. Атоми Ітрію займають половину октаедричних пустот, а атоми Купруму – четвертину тетраедричних пустот. Яка формульна одиниця сполуки?
24. Атоми Оксигену утворюють найщільнішу тришарову упаковку. Атоми металу займають усі тетраедричні порожнини. Визначте склад формульної одиниці сполуки та вкажіть, яка їх кількість припадає на елементарну комірку.
25. До складу сполуки входять атоми Tm, Cu, Te. Атоми Телуру утворюють двошарову найщільнішу упаковку. Атоми Тулію займають $1/3$ октаедричних порожнин, а атоми Купруму – половину тетраедричних. Яка формула сполуки?

26. У кристалічній структурі складу $A_xB_4C_y$, атоми С утворюють найщільнішу упаковку. Атоми А займають $1/8$ октаедричних пустот, а атоми В – $1/4$ тетраедричних. Знайти x і y .

Лабораторна робота № 9

Тема: Основні структурні типи. Розв'язування типових задач

1. План лабораторної роботи:

1. Розгляд моделей структур простих речовин та складних речовин.
2. Визначення типу ґратки Браве, сингонії.
3. Визначення кількості атомів (формульних одиниць) у елементарній комірці.
4. Визначення координаційного числа, координаційного многогранника.

1. Питання та задачі для самопідготовки:

1. Фактори, що визначають стійкість структури. Правила Гольдшмідта, Полінга, Юм-Розері.
1. Поляризація іонів. Вплив різних факторів на поляризацію. Правила Фаянса.
2. Геометричні межі стійкості структур з різними координаційними числами.
3. Теорія найщільніших упаковок куль однакового розміру. Дво- та тришарові упаковки. Типи пустот. Коефіцієнт зайнятості простору. Буквенні способи позначень щільних упаковок.
4. Явище ізоморфізму. Досконалий та недосконалий ізоморфізм. Правило Вегарда.
5. Ізоморфізм. Умови виникнення ізоморфізму.
6. Тверді розчини. Типи твердих розчинів.

7. Поліморфізм і морфотропія. Поліморфні перетворення.
8. Структурна класифікація поліморфізму.
9. Знайти період b ромбічної базоцентрованої комірки, якщо періоди a і c дорівнюють відповідно 4 \AA та 6 \AA . Густина речовини становить $1,66 \text{ г/см}^3$. Відносна молекулярна маса речовини становить 60.
10. Кристали меркурій хлориду мають густину $5,44 \text{ г/см}^3$. Встановити, чи є цей хлорид каломеллю Hg_2Cl_2 , чи сулемою HgCl_2 , якщо періоди тетрагональної комірки каломелі: $a=4,47$, $c=10,89 \text{ \AA}$, $Z=2$; періоди ромбічної комірки сулеми $a=5,96$, $b=12,74$, $c=4,32 \text{ \AA}$, $Z=4$.
11. Період ідентичності елементарної комірки $\alpha\text{-Fe}$ (ОЦК комірка) становить $2,866 \text{ \AA}$. Яка густина заліза? Якої довжини буде ланцюг, укладений з елементарних комірок, що містяться в 100 г речовини?
12. Знайти молекулярну масу речовини, що кристалізується в структурному типі CaF_2 ($Z=4$), якщо період елементарної комірки дорівнює 10 \AA , а густина речовини становить $1,66 \text{ г/см}^3$.
13. Знайти період b ромбічної базоцентрованої комірки, якщо періоди a і c дорівнюють відповідно 4 \AA та 6 \AA . Густина речовини становить $1,66 \text{ г/см}^3$. Відносна молекулярна маса речовини становить 60.
14. Знайти молекулярну масу речовини, що кристалізується в структурному типі сфалериту ($Z=4$), якщо період елементарної комірки дорівнює 6 \AA , а густина речовини становить $1,66 \text{ г/см}^3$.
15. Період ідентичності елементарної комірки $\alpha\text{-Fe}$ (ОЦК комірка) становить $2,866 \text{ \AA}$. Яка густина заліза? Якої довжини буде ланцюг, укладений з елементарних комірок, що містяться в 100 г речовини?
16. Розрахувати густину платини, якщо вона кристалізується в структурному типі міді з періодом елементарної комірки $a=0,392 \text{ нм}$. ($Z=4$).
17. Розрахувати число атомів, що припадає на елементарну комірку свинцю, якщо він кристалізується у кубічній гранецентрованій комірниці Браве при періоді $a=5 \text{ \AA}$ та густині речовини $11,48 \text{ г/см}^3$.

18. Знайти період a елементарної комірки речовини, що кристалізується у структурному типі сфалериту, якщо густина речовини становить $3,32 \text{ г/см}^3$, а відносна молекулярна маса становить 32. ($Z=4$).
19. Знайти період a елементарної комірки речовини (структурний тип флюориту, $Z=4$), якщо густина речовини становить $3,32 \text{ г/см}^3$, а молекулярна маса дорівнює 500 а.о.м.
20. Знайти період b ромбічної гранецентрованої комірки, якщо період $a=4 \text{ \AA}$, період $c=6 \text{ \AA}$, густина речовини становить $1,66 \text{ г/см}^3$, а відносна молекулярна маса становить 48 а.о.м.
21. Знайти період c ромбічної примітивної комірки речовини, якщо період $a=5 \text{ \AA}$, $b=4 \text{ \AA}$, густина речовини дорівнює $1,66 \text{ г/см}^3$, а відносна молекулярна маса рівна 60 а.о.м.
22. Знайти атомну масу простої речовини (стр. тип $\alpha\text{-Fe}$, $Z=2$), якщо радіус атома становить $1,5 \text{ \AA}$, а густина – $1,66 \text{ г/см}^3$.
23. Знайти об'єм елементарної комірки речовини (стр. тип магнію, $Z=2$), якщо густина становить $1,66 \text{ г/см}^3$, а відносна молекулярна маса дорівнює 24 а.о.м.
24. Розрахувати густину срібла, яке кристалізується у структурному типі міді ($Z=4$), якщо період елементарної комірки $a=0,404 \text{ нм}$.
25. Знайти період c тетрагональної об'ємноцентрованої комірки, якщо період $a=3 \text{ \AA}$, густина речовини – $1,66 \text{ г/см}^3$, а відносна молекулярна маса становить 18 а.о.м.
26. Знайти параметр a елементарної комірки речовини із структурою алмазу ($Z=8$), якщо густина дорівнює $3,32 \text{ г/см}^3$, $M=250$ а.о.м.
27. Знайти відносну молекулярну масу речовини (стр. тип алмазу, $Z=8$), якщо густина дорівнює $1,66 \text{ г/см}^3$, а період елементарної комірки становить 8 \AA .
28. Кристали ртуті хлориду мають густину $5,44 \text{ г/см}^3$. Встановити, чи є цей хлорид каломеллю Hg_2Cl_2 , чи сулемою HgCl_2 , якщо періоди

тетрагональної комірки каломелі: $a=4,47$, $c=10,89$ Å, $Z=2$; періоди ромбічної комірки сулеми $a=5,96$, $b=12,74$, $c=4,32$ Å, $Z=4$.

29. Кубічна модифікація HgS має параметр комірки $a=5,84$ Å, $Z=4$; для гексагональної модифікації $a=4,16$ та $c=9,54$ Å, $Z=3$. Якою модифікацією є кристали HgS, якщо їх густина становить $7,73$ г/см³?

30. Насичений вуглеводень має густину $0,93$ г/см³ і параметри ромбічної комірки: $a=7,452$, $b=4,965$, $c=81,60$ Å. Вважаючи, що комірка містить 4 молекули, знайти формулу вуглеводню.

31. Параметри ортогональної комірки однієї з селітр: $a=5,31$, $b=9,17$, $c=6,45$ Å, $Z=4$; густина становить $2,109$ г/см³. Визначити, яка це селітра – чилійська (KNO₃), індійська (NaNO₃) чи англійська (NH₄NO₃).

32. Параметри ортогональної комірки гідрату цинк сульфату ZnSO₄·xH₂O: $a=11,85$, $b=12,09$, $c=6,83$ Å, $Z=4$; густина становить $1,97$ г/см³. Скільки молекул води входить до складу формульної одиниці? Результат заокруглити до цілого.

33. Параметри тетрагональної комірки гідрату берилій сульфату BeSO₄·xH₂O: $a=8,02$, $c=10,75$ Å, $Z=4$. Скільки молекул води міститься у формульній одиниці, якщо густина кристалів становить $1,713$ г/см³? Відповідь заокруглити.

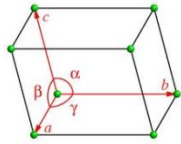
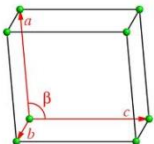
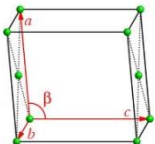
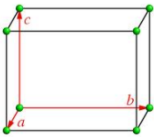
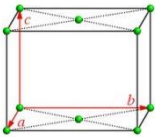
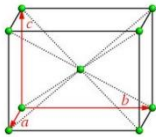
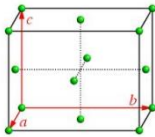
34. Параметр кубічної комірки алюмокалієвих галунів KAl(SO₄)₂·xH₂O становить $12,13$ Å, $Z=4$. Густина кристалів – $1,75$ г/см³. Знайти x . Результат заокруглити.

Список рекомендованої літератури

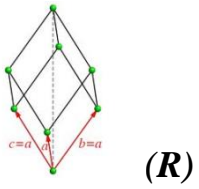
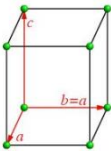
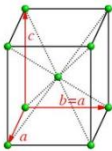
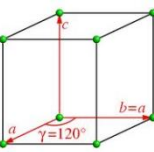
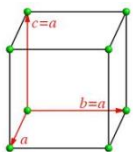
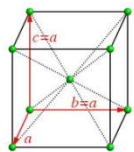
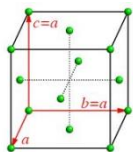
1. Бокий Г.Б. Кристаллохимия / Г.Б. Бокий. – М.: Наука, 1971. – 400с.
2. Попов Г.М. Кристаллография / Г.М. Попов, І.І. Шафрановський. – Вид. Львів. ун-ту, 1959. – 338с.
3. Шаскольская М.П. Кристаллография / М.П. Шаскольская. – М.: Высш. шк., 1976. – 391с.

4. Шевченко Л.Л. Кристалохімія / Л.Л. Шевченко. – К.: Вища шк., 1993. – 174с.
5. Ворошилов Ю.В. Основы кристаллографии и кристаллохимии. Рентгенография кристаллов: Учебник / Ю.В. Ворошилов, В.И. Павлишин. – К.: КНТ, 2011. – 568с.
6. Зиман З.З. Основы структурної кристаллографії: Навчальний посібник для студентів вищих навчальних закладів / З.З. Зиман. – Х.: ХНУ імені В. Н. Каразіна, 2008. – 212с.
7. Зоркий П.М. Симметрия молекул и кристаллических структур / П.М. Зоркий. – М.: Изд-во МГУ, 1986. – 232с.
8. Костов И. Кристаллография / И. Костов. – М.: Мир, 1965. – 516с.
9. Кребс Г. Основы кристаллографии неорганических соединений / Г. Кребс. – М.: Мир, 1971. – 304с.
10. Ормонт Б.Ф. Введение в физическую химию и кристаллохимию полупроводников / Б.Ф. Ормонт. – М.: Высш. шк., 1982. – 528с.
11. Парте Е. Елементи неорганічної структурної хімії / Е. Парте. – Львів: Світ, 1993. – 104с.
12. Пирсон У. Кристаллохимия и физика металлов и сплавов. Ч. I., Ч. II. / У. Пирсон. – М.: Мир, 1971. – 471с.
13. Сколоздра О.Є. Кристаллографія, кристалохімія і мінералогія. –Луцьк: ЛДТУ, 1999. – 76с.
14. Урусов В.С. Теоретическая кристаллохимия / В.С. Урусов. – М.: Изд-во МГУ, 1987. – 275с.

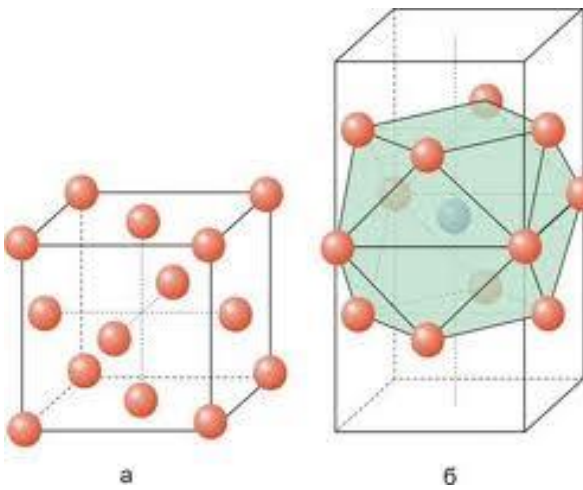
Додаток А
Розподіл 14 комірок Браве за сингоніями

<i>Сингонія</i>	<i>Тип комірки</i>			
	<i>Примітивна (P)</i>	<i>Базоцентрована (C, A, B)</i>	<i>Об'ємноцентрована (I)</i>	<i>Гранецентрована (F)</i>
<i>1</i>	<i>2</i>	<i>3</i>	<i>4</i>	<i>5</i>
<i>Триклінна</i>		—	—	—
<i>Моноклінна</i>			—	—
<i>Ромбічна</i>				

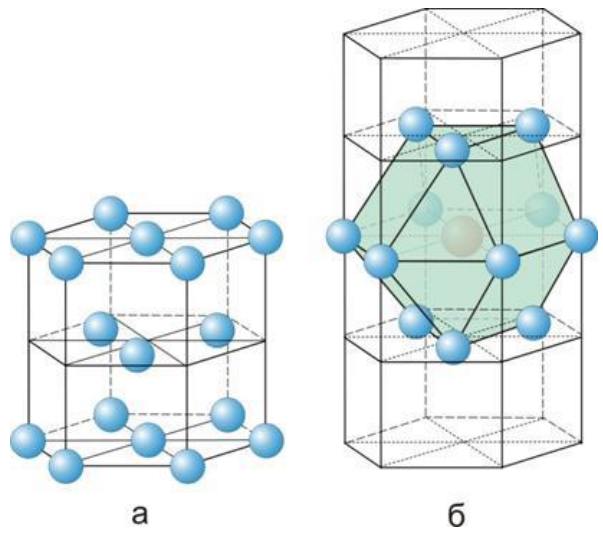
Продовження додатку А

1	2	3	4	5
<p><i>Тригональна (Ромбоедрична)</i></p>		<p>—</p>	<p>—</p>	<p>—</p>
<p><i>Тетрагональна</i></p>		<p>—</p>		<p>—</p>
<p><i>Гексагональна (Тригональна)</i></p>		<p>—</p>	<p>—</p>	<p>—</p>
<p><i>Кубічна</i></p>		<p>—</p>		

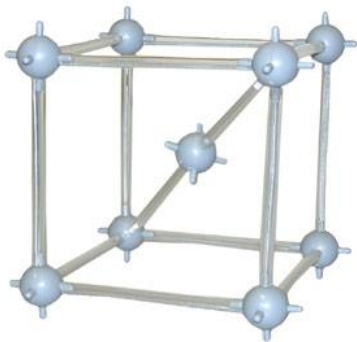
Додаток Б
Основні структурні типи



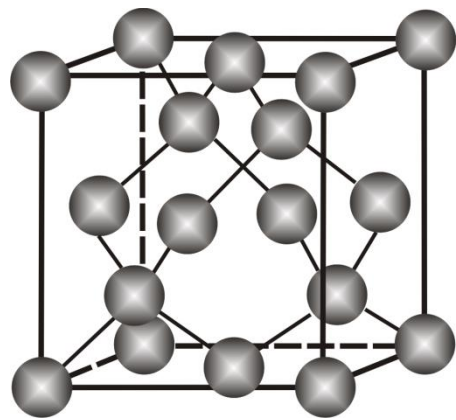
Cu



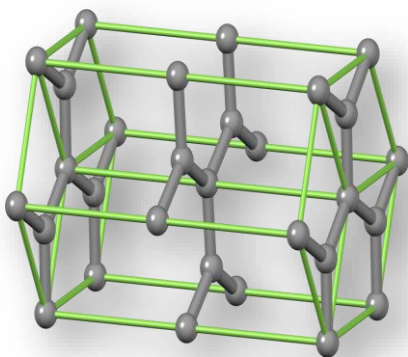
Mg



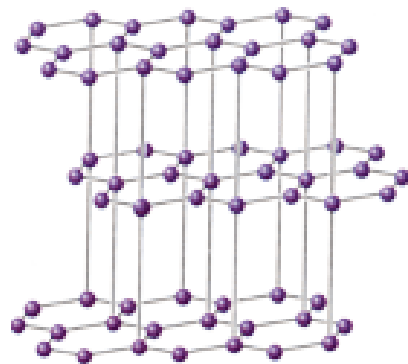
α -Fe (W)

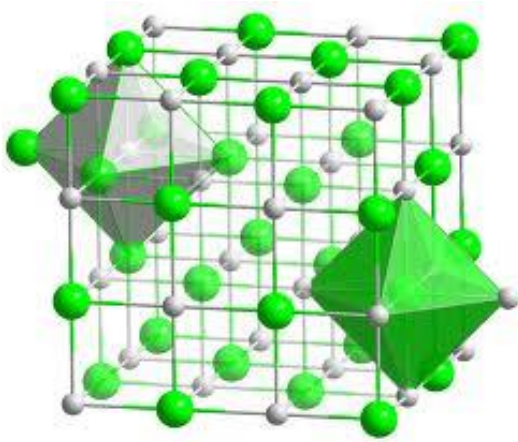


С (алмаз)

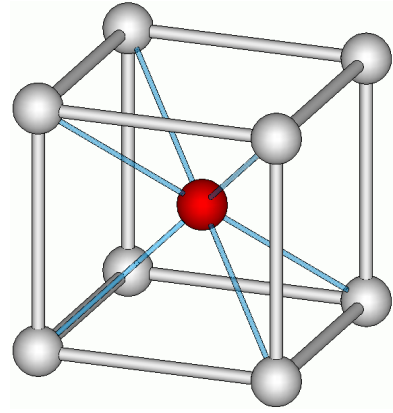


С (графіт)

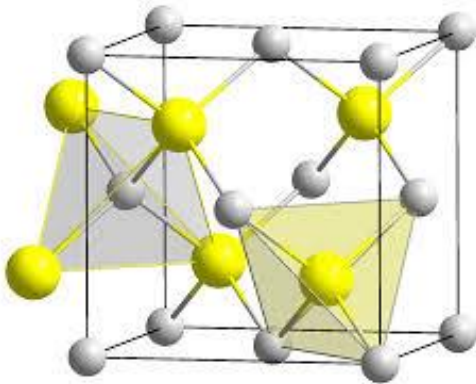




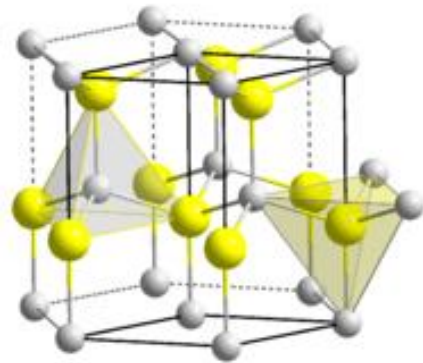
NaCl



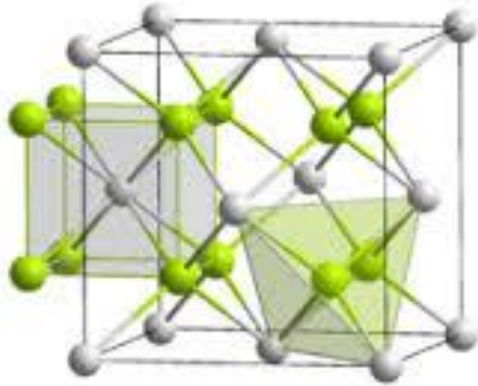
CsCl



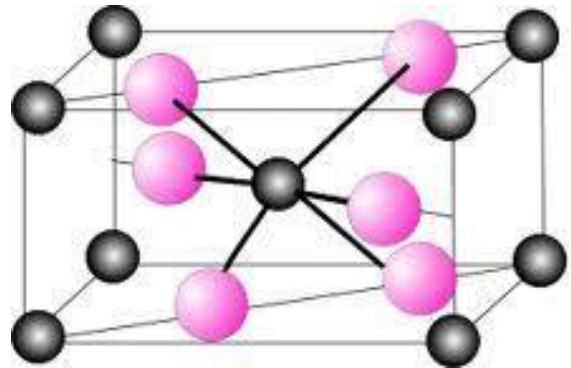
ZnS (сфалерит)



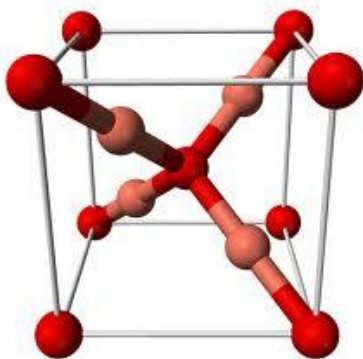
ZnS (вюрцит)



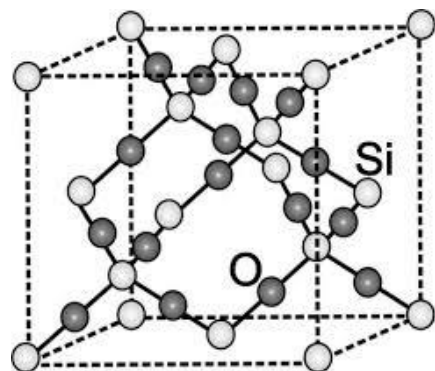
CaF₂ (флюорит)



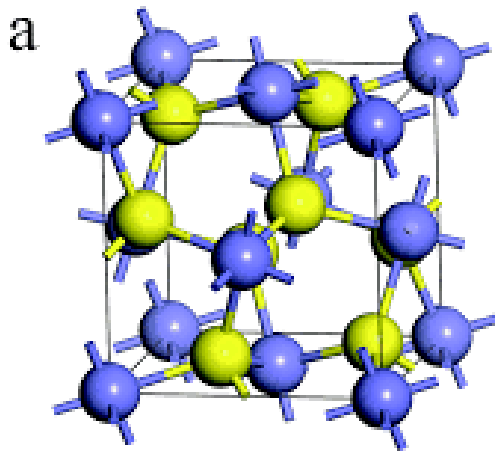
TiO₂ (рутил)



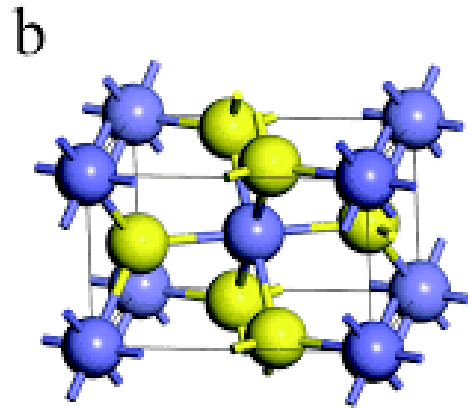
Cu₂O (куприт)



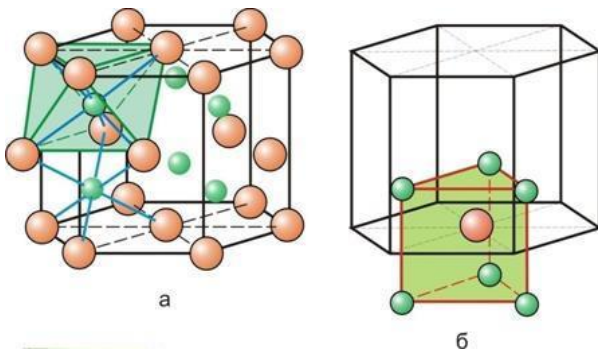
β -SiO₂ (кристобаліт)



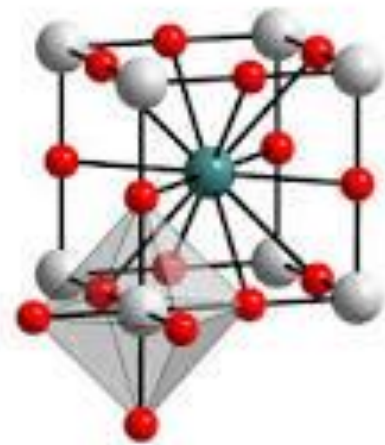
FeS₂ (пірит)



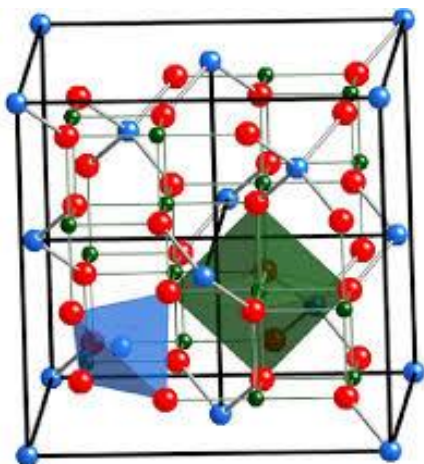
FeS₂ (марказит)



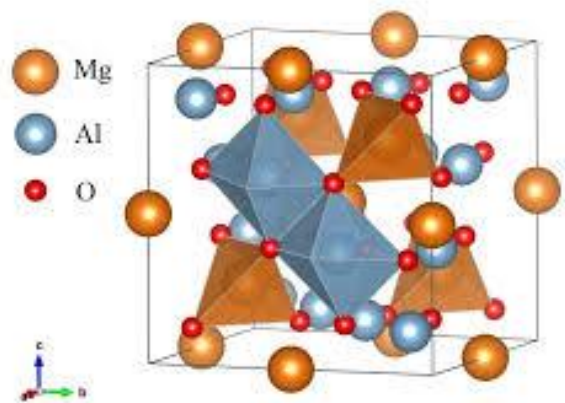
NiAs (нікелін)

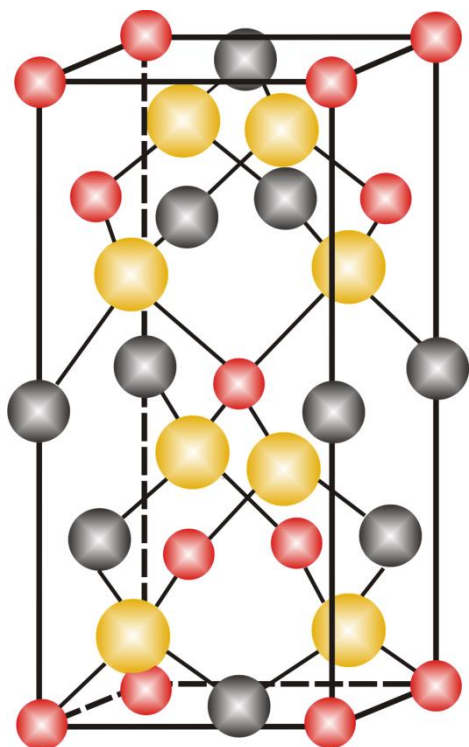


CaTiO₃ (перовскіт)

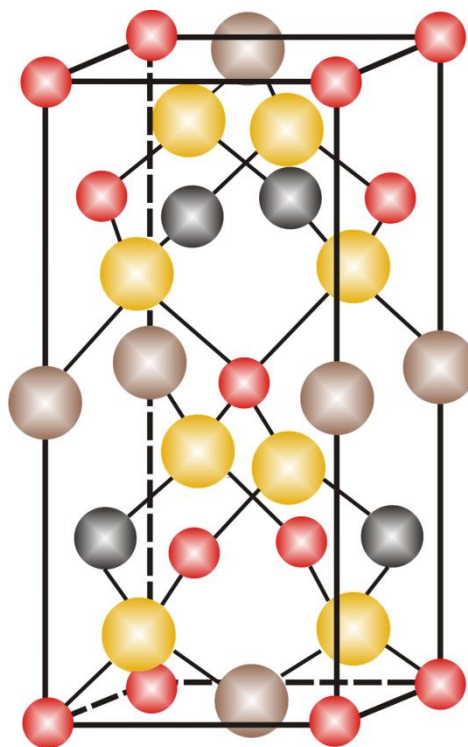



MgAl₂O₄ (шпінель)

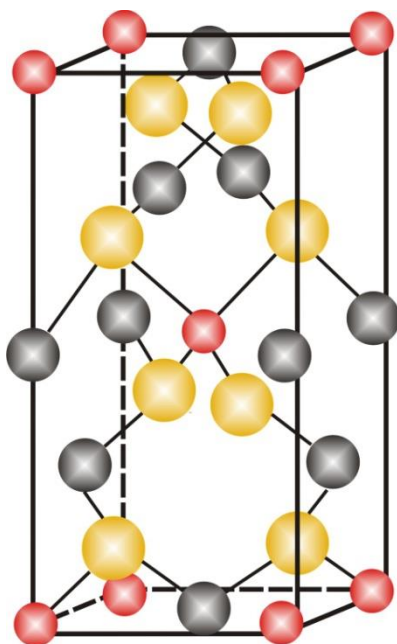




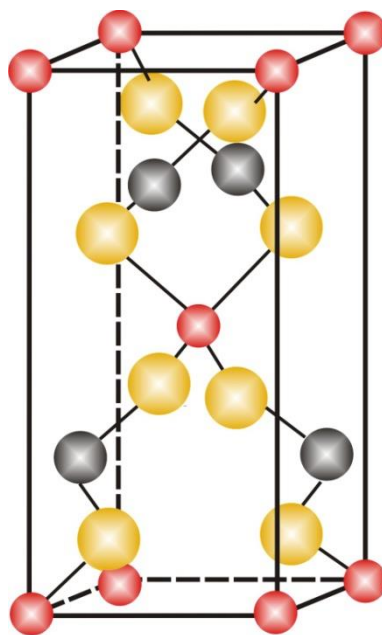

Cu Fe S
 Халькопірит CuFeS_2

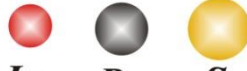



Cu Fe Sn S
 Станін $\text{Cu}_2\text{FeSnS}_4$




Cd Ga S
 CdGa_2S_4




In P S
 InPS_4

Навчально-методичне видання

Оксана Мар'янівна Строк

Кристалохімія

Методичні вказівки до лабораторного практикуму

Частина II

Друкується в авторській редакції