

**Дисциплина «Минералогия и  
кристаллография»**

**Решение практических  
задач по  
кристаллохимии**

**доц., к.х.н. Кирсанова С.В.  
доц., к.т.н. Баринова О.П.**

**Москва, 2020 г.**

# Тип 1

Определите категорию, сингонию, вид симметрии, тип трансляционной решетки кристалла с пространственной группой:

$Fm\bar{3}m$ ,

$I4/amd$ ,

$R6_3/mmc$



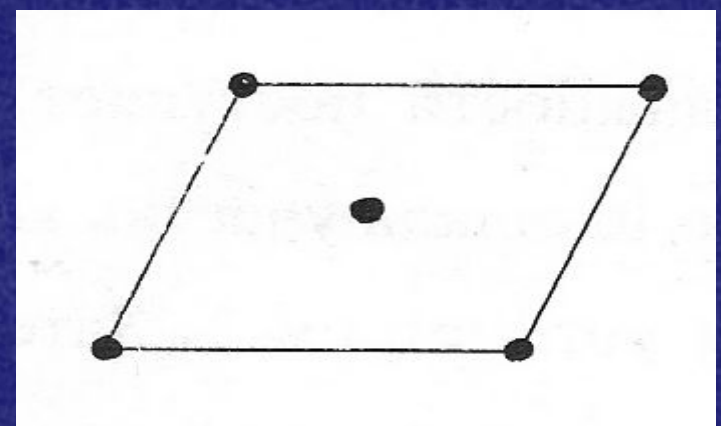
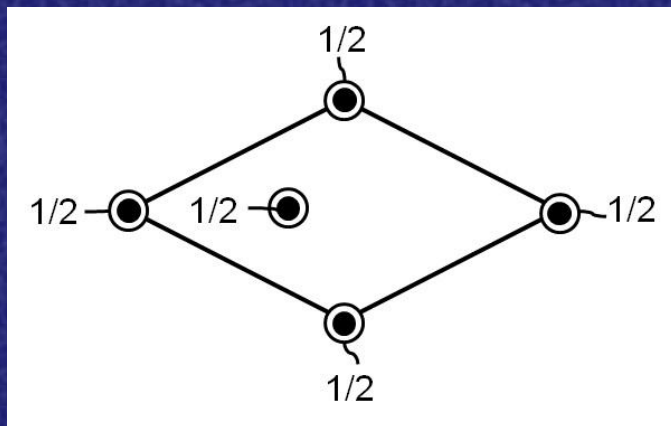
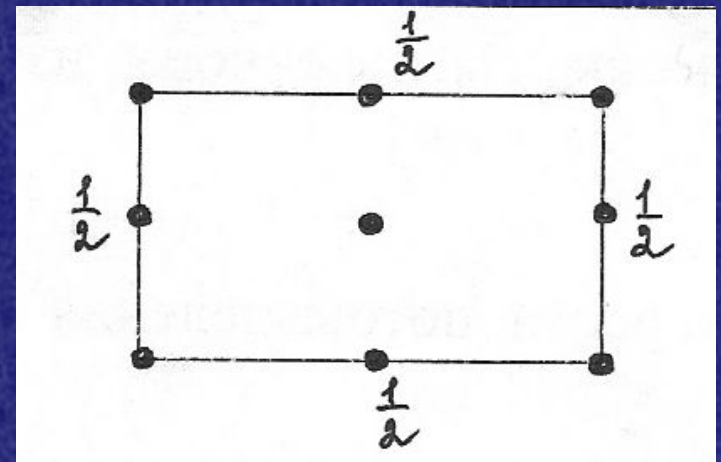
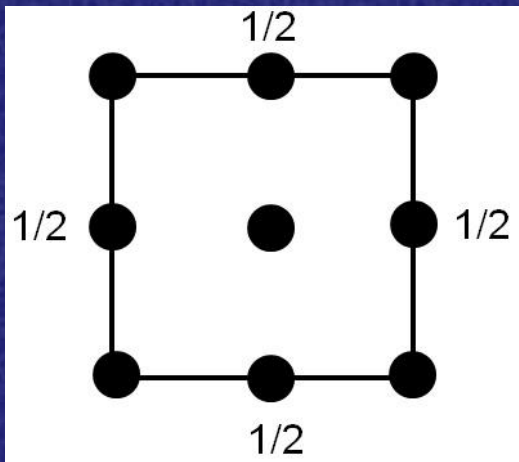
$Fm\bar{3}m$  : категория – высшая,  
сингония – кубическая,  
вид симметрии – планаксиальный,  
тип решетки - примитивная

$I4/amd \rightarrow I4/mmm$ : категория – высшая  
сингония – кубическая,  
вид симметрии – планаксиальный  
тип решетки – объемноцентрированная

$R6_3/mmc \rightarrow R6/mmm$ :  
категория – средняя,  
сингония – гексагональная,  
вид симметрии – планаксиальный,  
тип решетки – примитивная

# Тип 2

Определите тип решетки, если проекция элементарной ячейки имеет вид:





## Тип 3

Определите число формульных единиц  $\text{Cu}_2\text{O}$ . Атомы O – в вершинах и в центре кубической ячейки; атомы Cu – в центре четырёх из восьми октантов в шахматном порядке.

$$\text{Решение: } Z(\text{Cu}) = 4 \cdot 1 = 4;$$

$$Z(\text{O}) = 8 \cdot 1/8 + 1 = 2,$$

$$Z_{\text{Cu}} : Z_{\text{O}} = 4 : 2 = 2 : 1; Z(\text{Cu}_2\text{O}) = 2$$

## Тип 4

Кристаллы хлорида ртути имеют плотность  $\rho = 5,44 \text{ г/см}^3$ .

Установите, является ли этот кристалл хлорид каломелью  $\text{Hg}_2\text{Cl}_2$  или сулемой  $\text{HgCl}_2$

### Справочные данные:

Каломель: тетрагональная ячейка,  
 $a = 4,47 \text{ \AA}$ ,  $c = 10,89 \text{ \AA}$ ,  $z = 2$ ,

Сулема: ромбическая (ортогональная),  
 $a = 5,96 \text{ \AA}$ ,  $b = 12,74 \text{ \AA}$ ,  $c = 4,32 \text{ \AA}$ ,  $z = 4$ .



## Решение:

$$\rho = z \cdot M \cdot A/V; \text{ где } A = 1,66 \cdot 10^{-24} \text{ моль}$$
$$1 \text{ \AA} = 10^{-8} \text{ см.}$$

$$\begin{aligned} \rho(\text{Hg}_2\text{Cl}_2) &= \\ &= 2 \cdot 472,2 \cdot 1,66 \cdot 10^{-24} / (4,47^2 \cdot (10^{-8})^2 \cdot 10,89 \cdot 10^{-8}) = \\ &= 7,2 \text{ г/см}^3 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \rho(\text{HgCl}_2) &= \\ &= 4 \cdot 271,6 \cdot 1,66 \cdot 10^{-24} / (5,96 \\ &\cdot 10^{-8} \cdot 12,74 \cdot 10^{-8} \cdot 4,32 \cdot 10^{-8}) = \\ &= 5,49 \text{ г/см}^3 \end{aligned}$$

**Ответ:** это сулема  $\text{HgCl}_2$  .

## Тип 5

Кристаллы  $\text{CsNiCl}$  имеют следующую структуру: атомы  $\text{Cl}$  и  $\text{Cs}$  совместно образуют двухслойную шаровую упаковку, а атомы  $\text{Ni}$  находятся в октаэдрических пустотах. Определите какая часть октаэдрических пустот заполнена.

Решение:

$$N(\text{T})=2n, N(\text{O})=n, n=2, N(\text{O})=2, \%(\text{Ni}) = (1/2)*100\%=50 \%$$



## Тип 6

В кристаллической структуре состава  $A_xB_yC_9$ , атомы С занимают ПУ, атомы А занимают  $2/3$  тетраэдрических пустот, а атомы В –  $5/9$  октаэдрических пустот.

Определите формулу соединения.

Решение:

$$N(T)=2n, N(O)=n, n=9, N(T)=18, N(O)=9, \\ N(A) = 2/3*18 = 12, N(B) = 5/9*9=5$$

## Тип 7

В кристаллической структуре состава  $A_xB_6C_y$  атомы С образуют плотнейшую упаковку, атомы А занимают  $3/8$  тетраэдрических пустот, атомы В –  $1/2$  октаэдрических пустот. Определите формулу соединения.

Ответ:  $A_9B_6C_{12}$



## Тип 8

В кристаллической структуре состава  $AB_2C_4$  атомы С образуют плотнейшую упаковку, к.ч.(А) = 4, к.ч.(В) = 6. Какой тип занятых пустот? Какая часть пустот заполнена?

Решение:

$n=4$ ,  $N(T) = 2n = 8$ ,  $N(O) = 4$ . Атомы А занимают  $1/8$  тетраэдрических пустот; атомы В занимает  $1/2$  октаэдрических пустот.

## Тип 9

Параметры ромбической ячейки гидрата сульфата цинка  $\text{ZnSO}_4 \cdot x\text{H}_2\text{O}$ :  
 $a=11,85 \text{ \AA}$ ,  $b=12,09 \text{ \AA}$ ,  $c=6,83 \text{ \AA}$ ,  $z=4$ ,  
 $\rho=1,97 \text{ г/см}^3$ . Сколько молекул воды входит в формульную единицу?  
Результат округлите.

Ответ: 7