

Михаил Владимирович Морозов  
кафедра минералогии, кристаллографии и петрографии  
Санкт-Петербургский горный институт

 morozov.minsoc.ru 

## Кристаллохимия

лекция 7.  
Z.  
Работа со структурными данными.  
Главные структурные типы  
(простые вещества).

специальность «Прикладная геохимия, минералогия, петрология», 3 семестр  
2011

## Z

число формульных единиц в элементарной ячейке

**Формульная единица** – группа атомов, входящих в состав немолекулярного вещества, соответствующая простейшей формуле этого вещества.

пример: сера  
S – простейшая формула = формульная единица  
S<sub>8</sub> – молекулярная формула (в ней 8 ф.ед.)

НЕ ПУТАТЬ формульную единицу с формульным коэффициентом:  
H<sub>2</sub>O – ф.к.(H) = 2 – это НЕ формульная единица!

## Z

число формульных единиц в элементарной ячейке

пример: соединение AB<sub>2</sub> в группе Pmm2

атом	кратность ПСТ	в эл. в ячейке	формула
A	2	2A	AB <sub>2</sub>
B	4	4B	

в э.я.: A<sub>2</sub>B<sub>4</sub> → 2(AB<sub>2</sub>) → Z = 2

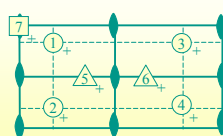
## Z

а если формула A<sub>2</sub>B<sub>5</sub> или A<sub>2</sub>B<sub>7</sub>?

вывод: B занимает более, чем одну позицию!

в нашем примере Pmm2 (кратность м.б. 1, 2, или 4) для A<sub>2</sub>B<sub>5</sub>:

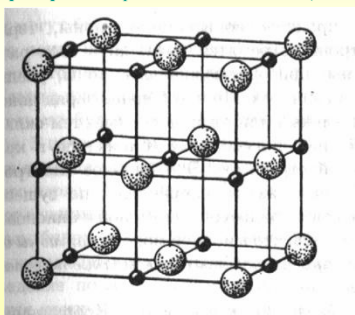
кр.=  $\begin{matrix} A_2 & B & B'' & B''' & B'''' \\ 2 & 1 & 4 & & \end{matrix}$  или  $\begin{matrix} A_2 & B & B'' & B''' & B'''' \\ 2 & 1 & 2 & 2 & \end{matrix}$



пример:  
магнетит FeFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>

## Определение Z

пример: расчёт Z для NaCl (Fm $\bar{3}$ m)



формульная единица: NaCl

## Экспериментальное определение Z

1) Параметры э.я. (размеры) определяют по данным рентгеновского исследования.

Объём э.я. V выражают в ангстремах Å (1 Å = 10<sup>-8</sup> см)  
1 Å<sup>3</sup> = 10<sup>-24</sup> см<sup>3</sup>

2) Масса э.я. = объём × плотность

$$m = V \times \rho$$

[ρ] = г / см<sup>3</sup>

$$m(\text{г}) = V(\text{Å}^3) \times \rho(\text{г/см}^3) \times 10^{-24}(\text{см}^3/\text{Å}^3)$$

$$m(\text{г}) = M \times m_a \times Z$$

молярн. масса    ат.ед.массы    ч.ф.е.    m<sub>a</sub> ≈ 1,66 · 10<sup>-24</sup> г

## Экспериментальное определение Z

$$Z = \frac{V \rho \times 10^{-24}}{M m_a} \approx \frac{V \rho}{M \times 1,66}$$

**пример:** флюорит  $\text{CaF}_2$  (куб.с.)

$a = 5,451 \text{ \AA}$   
 $V \approx 162 \text{ \AA}^3$   
 $\rho_{\text{эксп.}} = 3,18 \text{ г/см}^3$   
 $M = 78,08$

$$Z = \frac{162 \times 3,18}{78,08 \times 1,66} \approx 3,975 \approx 4$$

7

## Расчёт теоретической плотности минерала

Плотность идеального монокристалла по рентгеновским данным («рентгеновская плотность»):

$$\rho_{\text{рентг.}} = \frac{Z M \times 1,66}{V}$$

**пример:** флюорит  $\text{CaF}_2$  (куб.с.)

$$\rho_{\text{рентг.}} = \frac{1,66 \times 4 \times 78,08}{162} = 3,20 \text{ г/см}^3$$

по справочнику:  $\rho_{\text{эксп.}} = 3,13 \text{ г/см}^3$

**обычно  $\rho_{\text{рентг.}} > \rho_{\text{эксп.}}$**   
 флюорит:  $3,01 - 3,25 \text{ г/см}^3$

8

## Структурные данные минерала

Данные о структуре конкретного минерала можно взять из справочников по кристаллографии.

**книги:**

- см. литературу в учебнике «Кристаллохимия»
- R.W.C.Wyckoff. Crystal structures. V. 1 and 2. NY, 1963, 1964.

**интернет:**  
 пространственная группа, Z, координаты атомов и т.п.  
 → **база данных МИНКРИСТ**  
 (Ин-т экспериментальной минералогии РАН, г. Черноголовка)

9

## WWW-МИНКРИСТ

Кристаллографическая и кристаллохимическая База данных для минералов и их структурных аналогов

Институт экспериментальной минералогии  
 Российской Академии Наук

Проект поддержан Российским фондом фундаментальных исследований (РФ-ФИ)  
 (гранты 07-07-00121а, гранты 04-07-00196, 01-07-00042, 06-07-00162 - кристаллы)

Дан создан: декабрь 1997  
 Последняя полная ревизия: август 2005  
 Последнее обновление: Сентябрь 2, 2009

**7530**  
записей (карточек)

ПОСВЯЩЕНИЕ | ОПИСАНИЕ | КОРОТКО  
 НОВОСТИ | СТАТИСТИКА | ССЫЛКИ НА WWW.MINCRCYST

Java-3D апплеты CRYSTPIC-2005 и MinPol-2006 в вашем распоряжении



Перовскит (PEROVSKITE)

Структурная группа: тетрагональная

Параметры ячейки:  $a = 3,9999 \text{ \AA}$  |  $c = 4,0180 \text{ \AA}$

Количество формульных единиц:  $Z = 1$  | Объем ячейки,  $\text{\AA}^3$ :  $V_c = 64,28$

Количество атомов элементарной ячейки:  $P/Z = 5$  | Мольный объем,  $\text{см}^3/\text{моль}$ :  $V_m = 38,72$

Коэффициент для распределения структуры:  $NZ = 243$  | Расчетная плотность,  $\text{г/см}^3$ :  $\rho = 6,02$

Индекс:  $K = 0,0230$  | Линейный коэффициент поглощения,  $20^\circ\text{C}$ :  $\mu = 2441,938$

Длина волны для расчетов повардстатистическим методом:  $\lambda = 1,54056 \text{ \AA}$  | Массовый коэффициент поглощения,  $\text{см}^2/\text{г}$ :  $\mu/\rho = 239,402$

Плотность для CSD:  $\rho = 1-45$

учитываем аспекты (т.е. кристаллографическую установку элементарной ячейки) !

Перовскит (PEROVSKITE). [34]. "искаженный" структурный тип - perovskite, analogue

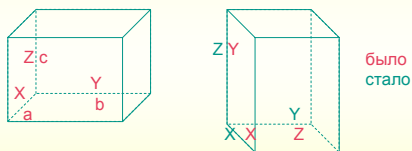
Атомные позиции

№	x/a	y/b	z/c	Wyckoff	Занятость
1	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	Ba
2	0,5000	0,5000	0,0000	0,0000	Ti
3	0,5000	0,5000	0,0000	0,0000	O
4	0,5000	0,0000	0,5000	0,0000	O

учитываем аспекты (т.е. кристаллографическую установку элементарной ячейки) !

## Аспекты пространственных гр.

В некоторых сингониях возможны различные установки элементарной ячейки. Например, в ромбической может быть до 6 вариантов установок (если можно менять местами любые оси).



Возможные ориентировки э.с., характеризующих п.группу, относительно координатных осей называют аспектами этой п.гр.

13

## Аспекты пространственных гр.

Стандартная установка («кристаллографическая») опубликована в **Международных таблицах по кристаллографии**.

«Минералогическая» установка используется в публикациях и базах данных по минералогии.

Обозначения аспектов п.гр.:

	1-я ось	2-я ось	3-я ось	обозн.
стандартный	X	Y	Z	abc
	X	Z	Y	acb
	Z	X	Y	cba

и т.п.

14

Home | resources | purchase | contact us | help | RELATED SITES: IUCr | IUCr Journals

INTERNATIONAL TABLES Home page

[A] [A1] [B] [C] [D] [E] [F] [G]

Home

### International Tables for Crystallography

First online edition (2006) ISBN 978-1-4020-4969-9 eISBN 978-1-4020-5294-0 doi:10.1107/9780955302000000001

This is the home page for *International Tables*, the definitive resource and reference work for crystallography. The series consists of the following volumes:

- Volume A Space-group symmetry | Contents | Sample pages | Indexes |
- Volume A1 Symmetry relations between space groups | Contents | Sample pages | Indexes |
- Volume B Reciprocal space | Contents | Sample pages | Indexes |
- Volume C Mathematical, physical and chemical tables | Contents | Sample pages | Indexes |
- Volume D Physical properties of crystals | Contents | Sample pages | Indexes |
- Volume E Subperiodic groups | Contents | Sample pages | Indexes |
- Volume F Crystallography of biological macromolecules | Contents | Sample pages | Indexes |
- Volume G Definition and exchange of crystallographic data | Contents | Sample pages | Indexes |

[Guided tour](#)

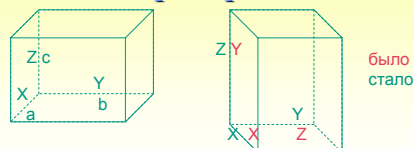
The series comprises articles and tables of data relevant to crystallographic research and to applications of crystallographic methods in all sciences concerned with the structure and properties of materials. Emphasis is given to symmetry, diffraction methods and techniques of crystal structure determination, and the physical and chemical properties of crystals. Each volume also contains discussions of theory, practical explanations and examples, all of which are useful for teaching.

*International Tables* is available in print and online. A brief teaching edition of Volume A is also available in print.

The series is planned, edited and maintained by the IUCr's Commission on International Tables.

*The complete online set of International Tables for Crystallography can be warmly recommended to all those who want a truly encyclopedic and authoritative reference.*

## Аспекты пространственных гр.



Для перехода между аспектами нужно менять местами координаты атомов:

аспект	координаты <i>i</i> -го атома		
abc	$X_i = 0$	$Y_i = 0.5$	$Z_i = 0.32$
cab	$X_i = 0.32$	$Y_i = 0$	$Z_i = 0.5$

16

## Симметрия и кратность позиций

кратко обозначается символом позиции Вайкоффа.

источники информации:

- кристаллографический сервер Бильбао (Bilbao Crystallographic Server)
- Международные таблицы по кристаллографии

17

## Международные таблицы

Полное описание пространственной группы: проекция элементов симметрии, возможные позиции (ПСТ), их симметрия и кратность.

где брать:

- библиотека
- платная онлайн версия (в СПГГИ не доступна)

краткие сведения по пространственным группам (проекции):

- Г.Б.Бокий, Кристаллохимия, и др.

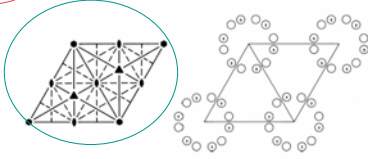
18

## Международные таблицы

**$\rho 6mm$**   
No. 17

$6mm$   
 $\rho 6mm$

Hexagonal  
Pattern symmetry  $\rho 6mm$



**Origin at  $6mm$**

**Asymmetric unit**  
Vertices:  $0 \leq x \leq 1; 0 \leq y \leq 1; x \leq (1+y)/2; y \leq x/2$

**Symmetry operations**

(1) 1	(2) $3^+$ 0,0	(3) $3^-$ 0,0
(4) 2 0,0	(5) $\sigma$ 0,0	(6) $\sigma'$ 0,0
(7) $m$ $x,x$	(8) $m$ $x,2x$	(9) $m$ $2x,x$
(10) $m$ $x,x$	(11) $m$ $x,0$	(12) $m$ $0,y$

19

## Международные таблицы

CONTINUED

No. 17

$\rho 6mm$

**Generators selected** (1);  $r(1,0)$ ;  $r(0,1)$ ; (2); (4); (7)

Multiplicity	Coordinates
12 $f$ 1	(1) $x,y$ (2) $x,y$ (3) $x,y$
	(4) $x,y$ (5) $x,y$ (6) $x,y$
	(7) $x,y$ (8) $x,y$ (9) $x,y$
	(10) $x,y$ (11) $x,y$ (12) $x,y$

**Reflection conditions**  
General: no conditions  
Special: no extra conditions

**Maximal non-isomorphic subgroups**

1	[2] $\rho 31$ (15)	1; 2; 3; 4; 5; 6
	[2] $\rho 3m$ (14)	1; 2; 3; 10; 11; 12
	[2] $\rho 3m$ (14)	1; 2; 3; 7; 8; 9
	[3] $\rho 2mm$ (22mm, 9)	1; 4; 7; 10

20

симметрия и кратность позиций и буквенные обозначения по Р. Вайкоффу (Wyckoff)

## Позиции Вайкоффа

(Wyckoff Positions)

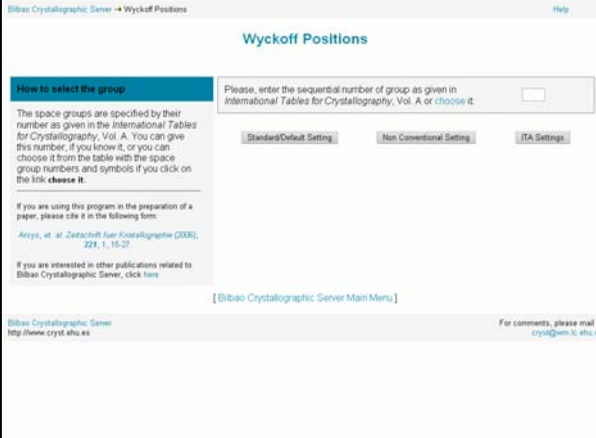
Условные обозначения кристаллографических позиций для данной пространственной группы:

обозначаются буквами латинского алфавита по очереди, начиная с самой симметричной позиции;

перед буквой ставится кратность позиции (целое число).

**пример:**  
**4a**    **3e**

21



Bilbao Crystallographic Server → Wyckoff Positions

### Wyckoff Positions

**How to select the group**


Please, enter the sequential number of group as given in *International Tables for Crystallography, Vol. A* or choose it:

If you are using this program in the preparation of a paper, please cite it in the following form:  
Arzyńska, et al. *Zetochiff für Kristallographie* (2006), 221, 1, 15-27

If you are interested in other publications related to Bilbao Crystallographic Server, click here

[Bilbao Crystallographic Server Main Menu]

Bilbao Crystallographic Server <http://www.crysl.ehu.es> For comments, please mail to [crysl@gen.ik.ehu.es](mailto:crysl@gen.ik.ehu.es)



Bilbao Crystallographic Server → WYCKPOS → Wyckoff Positions

### Wyckoff Positions of Group 150 (P321)

Multiplicity	Wyckoff letter	Site symmetry	Coordinates
6g	g	1	(x,y,z) (-y,x-y,z) (-x+y,x-z) (y,x,-z) (x,y,-y,-z) (-x,-x+y,-z)
3f	f	2	(x,0,1/2) (0,x,1/2) (-x,x,1/2)
3e	e	2	(x,0,0) (0,x,0) (-x,x,0)
2d	d	3	(1/3,2/3,z) (2/3,1/3,-z)
2c	c	3	(0,0,z) (0,0,-z)
1b	b	32	(0,0,1/2)
1a	a	32	(0,0,0)

If you want to see the Wyckoff position in other setting, click here

Bilbao Crystallographic Server <http://www.crysl.ehu.es> For comments, please mail to [crysl@gen.ik.ehu.es](mailto:crysl@gen.ik.ehu.es)

## Симметрия и кратность позиций

Данные о конкретном минерале можно взять из справочников по кристаллографии.

с помощью интернета:

определение позиций Вайкоффа по имеющимся координатам  
→ Bilbao Crystallographic Server → Assign

24

Bilbao Crystallographic Server → Assign Wyckoff Positions

### Assignment of Wyckoff Positions

**Assign Wyckoff Positions**

Give a space group (ITA number, the cell parameters (separated with spaces) and the atom positions, the program WPAISSON identifies the Wyckoff position of the atom and calculates the corresponding atomic orbit.

Structure Data [in CIF format]

```
# Space Group ITA number
121
# Lattice parameters
3.0 3.0 3.0 90 90 90
# Number of independent atoms in the asymmetric unit
3
# [atom type] [symbol] [x] [y] [z]
Ba 1 - 0.0 0.0 0
Ti 2 - 0.5 0.5 0.5
O 3 - 0.5 0.0 0.5
```

[Bilbao Crystallographic Server Main Menu]

Bilbao Crystallographic Server  
http://www.crys.tl.uhu.es

For comments, please mail to: [cryst@em.kc.ehu.es](mailto:cryst@em.kc.ehu.es)

Bilbao Crystallographic Server → Assignment of Wyckoff Positions

### Assignment of Wyckoff Positions

**Atoms Data:**

AT.	WP	SS	Representative	Atomic orbit
Ba1	1a (0,0,0)	m-3m	(0.000000, 0.000000, 0.000000)	(0.000000, 0.000000, 0.000000)
Ti2	1b (1/2,1/2,1/2)	m-3m	(0.500000, 0.500000, 0.500000)	(0.500000, 0.500000, 0.500000)
O3	3c (0,1/2,1/2)	4/mmm	(0.500000, 0.000000, 0.500000)	(0.500000, 0.000000, 0.500000)

Note: You can save the CIF file and visualize it with an application as Jmol

Formatted text file (for Bilbao Crystallographic Server)

```
# S G I 3.0 3.0 3.0 90 90 90
Ba 1 1a 0.0 0.0 0.0
Ti 2 1b 0.5 0.5 0.5
O 3 3c 0.5 0.0 0.5
```

Note: this formatted text file can be useful for other programs on the server

Bilbao Crystallographic Server  
http://www.crys.tl.uhu.es

For comments, please mail to: [cryst@em.kc.ehu.es](mailto:cryst@em.kc.ehu.es)

## 3D-моделирование структур

27

## 3D-моделирование структур

шафрановскит  
 $K_2Na_3(Mn,Fe,Na)_4[Si_6(O,OH)_{22}]^{2-} \cdot (OH)_2 \cdot 2.33H_2O$

shafranovskite.vst

28

## 3D-моделирование структур

Расстояния между атомами, углы между связями, КЧ и координационный полиэдр можно определить в ПО "Atoms".

Polyhedra No.	Type	Atoms Central	Ligand	Distance
1	1	Si 10	O 163036	
			12 O 163101	
			15 O 163581	
			18 O 163081	

Bonds Type	Atoms	Distance
1	1 2 Si 16	O 16358
2	1 2 Si 41	O 16310
3	1 2 Si 81	O 16308
4	1 3 Si 11	O 16304
5	1 3 Si 26	O 16310
6	2 4 Be 11	O 16429
7	2 4 Be 12	O 16386
8	2 4 Be 17	O 16563
9	2 5 Be 10	O 16429
10	2 5 Be 26	O 16386

Bond angles on atom 83 Be

Bond 77 Atom 88 O - Bond 78 Atom 121 O - Angle: 109.40  
 Bond 77 Atom 88 O - Bond 79 Atom 126 O - Angle: 102.45  
 Bond 78 Atom 121 O - Bond 79 Atom 126 O - Angle: 108.44

29

## Домашнее задание

Состоит из двух частей:

- 1) построение проекции пространственной группы и определение ПСТ, ← срок: октябрь
- 2) построение 3D-модели кристалла и характеристика его структуры. ← срок: ноябрь

30

## Главные структурные типы

31

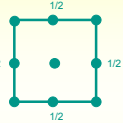
## Структуры простых кристаллов: металлы

32

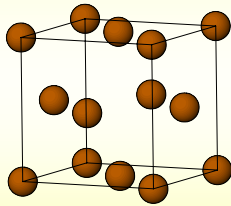
## Структуры простых кристаллов

Медь. Cu  
куб.с. a = 3,615 Å

$Fm\bar{3}m$



Z =

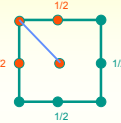


33

## Структуры простых кристаллов

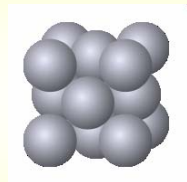
Медь. Cu  
куб.с. a = 3,615 Å

$Fm\bar{3}m$



Z = 4  
одна ПСТ (частная)  
кратность = 4  
степеней свободы 0

координаты:  
0 0 0  
 $\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0$   
0  $\frac{1}{2} \frac{1}{2}$   
 $\frac{1}{2} 0 \frac{1}{2}$



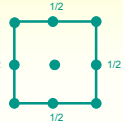
кратчайшее расстояние Cu – Cu :  $\sqrt{2}/2 \times a$

34

## Структуры простых кристаллов

Медь. Cu  
куб.с. a = 3,615 Å

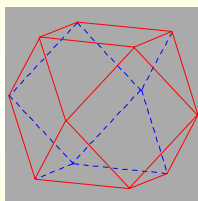
$Fm\bar{3}m$



Z = 4

число ближайших соседей = 12  
координационное число

Au = 4,079 Å  
Pt = 3,923 Å  
Ag = 4,086 Å  
Al = 4,049 Å  
структурный  
тип меди



кубооктаэдр

поверхность, соединяющая ближайших соседей –  
координационный многогранник  
(координационный полиэдр)

!!! если ионы – берутся соседи противоположного знака

35

## Понятие «структурный тип»

В структурный тип объединяются геометрически подобные структуры.

Куб. с. – полное подобие (меняется только размер э.я.)

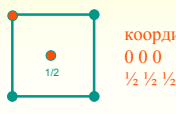
Низшие сингонии – не совсем полное, т.к. немного варьирует отношение a/b/c

36

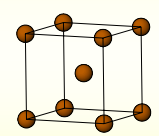


### Структуры простых кристаллов

Альфа-железо.  $\alpha$ -Fe  
куб.с.  $a = 2,866 \text{ \AA}$   $Im\bar{3}m$



координаты:  
0 0 0  
 $\frac{1}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2}$



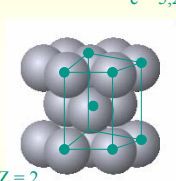
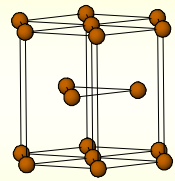
$Z = 2$   
одна ПСТ (частная)  
кратность = 2  
степеней свободы 0  
кратчайшее расстояние Fe – Fe :  $\sqrt{3}/2 \times a$   
КЧ = 8, координационный полиэдр – куб  
чуть дальше (на 15%) – ещё 6 атомов,  $\Sigma=14$  (ромбодекаэдр)

$M_0 = 3,147 \text{ \AA}$   
V  
Na = 4,291  $\text{ \AA}$   
**структурный тип**

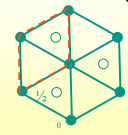
37

### Структуры простых кристаллов

Магний. Mg  
гекс.с.  $a = 3,209 \text{ \AA}$   
 $c = 5,210 \text{ \AA}$   $P6_3/mmc$

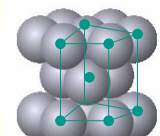
$Z = 2$   
одна ПСТ, кратность = 2



38

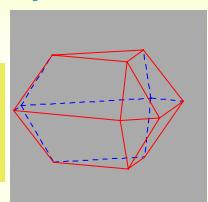
### Структуры простых кристаллов

Магний. Mg  
гекс.с.  $a = 3,209 \text{ \AA}$   
 $c = 5,210 \text{ \AA}$   $P6_3/mmc$



$Z = 2$   
одна ПСТ, кратность = 2  
КЧ = 12, коорд. полиэдр – «гексагональный кубоктаэдр»  
**структурный тип Mg:** Co, Ni, Zn  
но отличаются по отношению  $a/c$  (Zn !!)

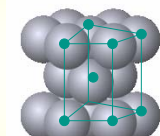
6 (Mg – Mg) :  
3,19  $\text{ \AA}$   
6 (Mg – Mg) :  
3,21  $\text{ \AA}$



39

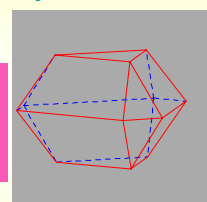
### Структуры простых кристаллов

Магний. Mg  
гекс.с.  $a = 3,209 \text{ \AA}$   
 $c = 5,210 \text{ \AA}$   $P6_3/mmc$



$Z = 2$   
одна ПСТ, кратность = 2  
КЧ = 12, коорд. полиэдр – «гексагональный кубоктаэдр»  
**структурный тип Mg:** Co, Ni, (Zn)  
но отличаются по отношению  $a/c$  (Zn !!)  
**структурный тип Zn с КЧ «6+6»**

6 (Zn – Zn) :  
2,66  $\text{ \AA}$   
6 (Zn – Zn) :  
2,91  $\text{ \AA}$



40

### Неметаллы

41

### Структуры простых кристаллов

Алмаз. C  
куб.с.  $a = 3,5668 \text{ \AA}$   $Fd\bar{3}m$



атомы в центрах «малых кубов» э.я.  
(на  $\frac{1}{4}$  ● и  $\frac{3}{4}$  ○)  
 $Z = 8$

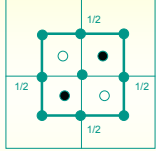


<http://ifm.uibn.ru/Docs/35/1/>

42

## Структуры простых кристаллов

Алмаз. C  
куб.с.  $a = 3,5668 \text{ \AA}$   $Fd\bar{3}m$



атомы в центрах «малых кубов» э.я.  
(на  $\frac{1}{4}$  и  $\frac{3}{4}$   $\circ$ )  
 $Z = 1 + 3 + 4 = 8$

$d \parallel$  граням э.я.  
 $4_f \parallel$  координатным направлениям

одна ПСТ, кратность = 8  
КЧ = 4, коорд. полиэдр – тетраэдр

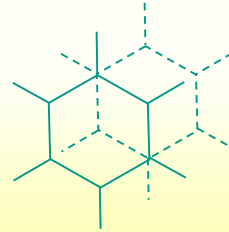
$C - C = 1,54 \text{ \AA}$  (характерна для органических соединений)

43

## Структуры простых кристаллов

Графит. C  
гекс.с.  $a = 2,464 \text{ \AA}$   $P6_3/mmc$   
 $c = 6,736 \text{ \AA}$

слоистая структура, слои – сетки из атомов углерода:



$C - C = 1,42 \text{ \AA}$   
в пределах слоя (сетки)

$C - C = 3,35 \text{ \AA}$   
между слоями (сетками)

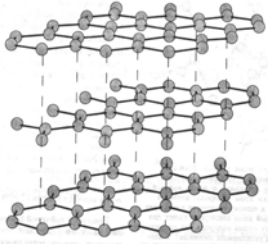
→ весьма совершенная спайность между слоями

44

## Структуры простых кристаллов

Графит. C  
гекс.с.  $a = 2,464 \text{ \AA}$   $P6_3/mmc$   
 $c = 6,736 \text{ \AA}$

слоистая структура, слои – сетки из атомов углерода:



$C - C = 1,42 \text{ \AA}$   
в пределах слоя (сетки)

$C - C = 3,35 \text{ \AA}$   
между слоями (сетками)

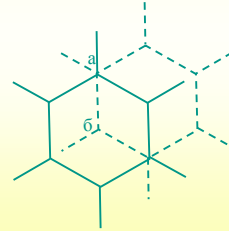
→ весьма совершенная спайность между слоями

45

## Структуры простых кристаллов

Графит. C  
гекс.с.  $a = 2,464 \text{ \AA}$   $P6_3/mmc$   
 $c = 6,736 \text{ \AA}$

слоистая структура, слои – сетки из атомов углерода:



$Z = 4$

две ПСТ !!!

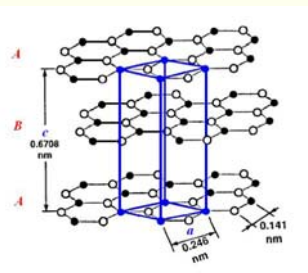
а) соседи сверху и снизу  
(одна половина атомов)

б) соседи только по слою  
(другая половина атомов)

46

## Структуры простых кристаллов

Графит. C  
гекс.с.  $a = 2,464 \text{ \AA}$   $P6_3/mmc$   
 $c = 6,736 \text{ \AA}$



$Z = 4$

две ПСТ !!!

а) соседи сверху и снизу  
кратность = 2

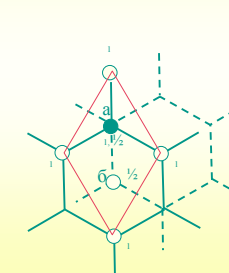
б) соседи только по слою  
кратность = 2

<http://ru.wikipedia.org/wiki/Файл:Hex.jpg>

47

## Структуры простых кристаллов

Графит. C  
гекс.с.  $a = 2,464 \text{ \AA}$   $P6_3/mmc$   
 $c = 6,736 \text{ \AA}$



$Z = 4$

две ПСТ !!!

а) соседи сверху и снизу  
кратность = 2  
КЧ=5 (триг.дипирамида)

б) соседи только по слою  
кратность = 2  
КЧ=3 (треугольник)

<http://ru.wikipedia.org/wiki/Файл:Hex.jpg>

48