

**Konwersatorium z chemii ciała stałego  
Specjalność: chemia budowlana**

**ZESTAW 5**

**Międzynarodowe Tablice Krystalograficzne**

- analiza informacji zawartych w Międzynarodowych Tablicach Krystalograficznych
- rozwiązywanie zadań w oparciu o dane zawarte w Międzynarodowych Tablicach Krystalograficznych

### Zadanie 1

Siarczek palladu (PdS), należący do układu tetragonalnego, ma grupę przestrzenną  $P4_2/m$ . Komórka elementarna o wymiarach  $a_0 = 6.429 \text{ \AA}$  i  $c_0 = 6.608 \text{ \AA}$  zawiera osiem atomów palladu i osiem atomów siarki. Atomy siarki zajmują ogólną pozycję równoważną  $8k$  o parametrach  $x = 0.19$ ,  $y = 0.32$ ,  $z = 0.23$ . Atomy palladu zajmują trzy krystalograficzne różne pozycje palladu:

2 Pd w pozycji  $2e$

2 Pd w pozycji  $2c$

4 Pd w pozycji  $4j$  przy czym  $x = 0.48$  i  $y = 0.25$ .

Korzystając z „Międzynarodowych Tablic Krystalograficznych” oraz powyższych danych:

- wyznacz wartości współrzędnych dla atomów siarki i palladu;
- znając położenia atomów w komórce wykreśl jej rzut na płaszczyznę (001);
- oblicz odległości od atomu siarki do każdego z czterech sąsiednich atomów palladu.

### Zadanie 2

Fluorek cyny(IV)  $\text{SnF}_4$ , krystalizuje w grupie przestrzennej  $I4/mmm$ . Komórka elementarna ma wymiary  $a_0 = 4.04$ ,  $c_0 = 7.93 \text{ \AA}$ . Atomy zajmują następujące pozycje krystalograficzne:

Sn w pozycji  $2a$

F' w pozycji  $4c$

F'' w pozycji  $4e$  przy czym  $z = 0.237$

Korzystając z „Międzynarodowych Tablic Krystalograficznych” oraz powyższych informacji:

- wyznacz wartości współrzędnych dla atomów cyny i fluoru
- znając położenia atomów w komórce wykreśl strukturę  $\text{SnF}_4$
- określ grupę punktową dla pozycji szczególnych
- oblicz długość wiązania Sn–F i opisz sferę koordynacji wokół atomu centralnego.

### Zadanie 3

$\text{HgBr}_2$  krystalizuje w grupie przestrzennej  $Cmc2_1$ . Wymiary komórki elementarnej wynoszą  $a_0 = 4.624 \text{ \AA}$ ,  $b_0 = 6.798 \text{ \AA}$ ,  $c_0 = 12.445 \text{ \AA}$  i zawiera 4 atomy rtęci w pozycji ( $4a$ ) przy czym  $y = 0.334$ ,  $z = 0.000$  i 8 atomów bromu zajmujących następujące pozycje:

Br(1)  $4a$  przy czym  $y = 0.056$ ,  $z = 0.132$  oraz Br(2)  $4a$  przy czym  $y = 0.389$ ,  $z = 0.368$ .

Korzystając z „Międzynarodowych Tablic Krystalograficznych” oraz powyższych danych:

- wyznacz wartości współrzędnych dla atomów rtęci i bromu;
- znając położenia atomów w komórce wykreśl jej rzut na płaszczyznę (100);
- oblicz odległości od atomu rtęci do każdego z sąsiednich atomów bromu.



- a) pkt. nad płaszczyzną rzutu, dla którego  $z \neq 0$
- b) pkt. pod płaszczyzną rzutu, dla którego  $z \neq 0$
- c) pkt. nad płaszczyzną rzutu, dla którego  $z = 1/2 + z$
- d) pkt. pod płaszczyzną rzutu, dla którego  $z = 1/2 - z$
- e) pkt., który powstał w wyniku odbicia w płaszczyźnie lub środku symetrii
- f i g ) dwa punkty znajdujące się jeden nad drugim, z których jeden powstał w wyniku odbicia w płaszczyźnie lub środku symetrii (znaczenia  $+ i -$  oraz  $1/2+ i 1/2-$  jak wyżej )

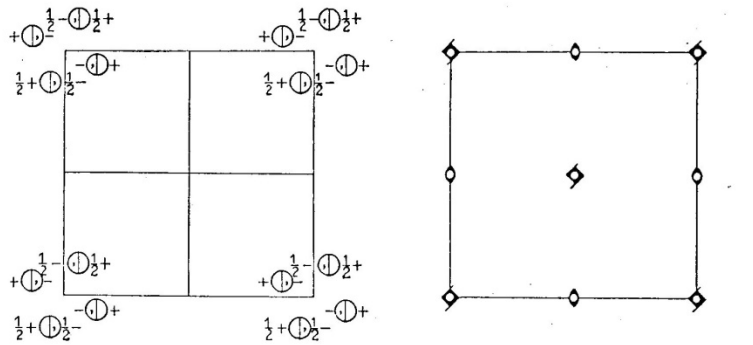
W Tablicach Krystalograficznych dla każdej grupy przestrzennej podaje się także współrzędne pozycji ogólnych i szczególnych, liczebność pozycji, oznaczenie literowe Wyckoffa oraz informacje o refleksach dyfrakcyjnych.

$P4_2/m$   
 $C_{4h}^2$

No. 84

$P4_2/m$

$4/m$  Tetragonal



Origin at centre ( $2/m$ ) on  $4_2$

Number of positions,  
Wyckoff notation,  
and point symmetry

Co-ordinates of equivalent positions

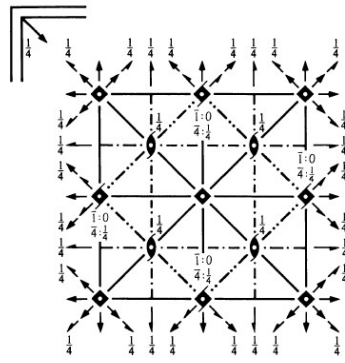
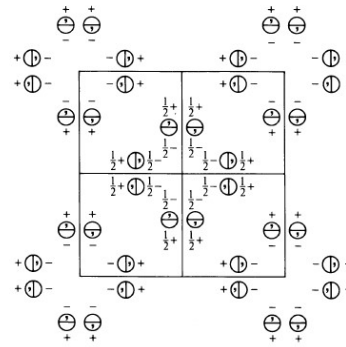
Conditions limiting  
possible reflections

Number of positions, Wyckoff notation, and point symmetry			Co-ordinates of equivalent positions	Conditions limiting possible reflections
8	<i>k</i>	1	$x, y, z; \bar{x}, \bar{y}, z; \bar{y}, x, \frac{1}{2} + z; y, \bar{x}, \frac{1}{2} + z;$ $x, y, \bar{z}; \bar{x}, \bar{y}, \bar{z}; \bar{y}, x, \frac{1}{2} - z; y, \bar{x}, \frac{1}{2} - z.$	General: <i>hkl</i> : No conditions <i>hk0</i> : No conditions <i>00l</i> : $l=2n$
4	<i>j</i>	<i>m</i>	$x, y, 0; \bar{x}, \bar{y}, 0; \bar{y}, x, \frac{1}{2}; y, \bar{x}, \frac{1}{2}.$	Special: as above, plus no extra conditions
4	<i>i</i>	2	$0, \frac{1}{2}, z; 0, \frac{1}{2}, \bar{z}; \frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2} + z; \frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2} - z.$	<i>hkl</i> : $h+k+l=2n$
4	<i>h</i>	2	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, z; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \bar{z}; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} + z; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} - z.$	} <i>hkl</i> : $l=2n$
4	<i>g</i>	2	$0, 0, z; 0, 0, \bar{z}; 0, 0, \frac{1}{2} + z; 0, 0, \frac{1}{2} - z.$	
2	<i>f</i>	$\bar{4}$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{4}; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{4}.$	
2	<i>e</i>	$\bar{4}$	$0, 0, \frac{1}{4}; 0, 0, \frac{3}{4}.$	} <i>hkl</i> : $h+k+l=2n$
2	<i>d</i>	$2/m$	$0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, 0, 0.$	
2	<i>c</i>	$2/m$	$0, \frac{1}{2}, 0; \frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}.$	
2	<i>b</i>	$2/m$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}.$	} <i>hkl</i> : $l=2n$
2	<i>a</i>	$2/m$	$0, 0, 0; 0, 0, \frac{1}{2}.$	

$I4/mmm$  $D_{4h}^{17}$  $4/mmm$ 

Tetragonal

No. 139

 $I 4/m 2/m 2/m$ Patterson symmetry  $I4/mmm$ Origin at centre ( $4/mmm$ )

CONTINUED

No. 139

 $I4/mmm$ Generators selected (1);  $t(1,0,0)$ ;  $t(0,1,0)$ ;  $t(0,0,1)$ ;  $t(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ ; (2); (3); (5); (9)

## Positions

Multiplicity,  
Wyckoff letter,  
Site symmetryCoordinates  
(0,0,0)+  $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})+$ 

Multiplicity	Wyckoff letter	Site symmetry	(1) $x, y, z$	(2) $\bar{x}, \bar{y}, z$	(3) $\bar{y}, x, z$	(4) $y, \bar{x}, z$
32	<i>o</i>	1	(5) $\bar{x}, y, z$	(6) $x, \bar{y}, z$	(7) $y, x, z$	(8) $\bar{y}, \bar{x}, z$
			(9) $\bar{x}, \bar{y}, z$	(10) $x, y, z$	(11) $y, \bar{x}, z$	(12) $\bar{y}, x, z$
			(13) $x, \bar{y}, z$	(14) $\bar{x}, y, z$	(15) $\bar{y}, \bar{x}, z$	(16) $y, x, z$

Reflection conditions

General:

$hkl : h + k + l = 2n$   
 $hk0 : h + k = 2n$   
 $0kl : k + l = 2n$   
 $hhl : l = 2n$   
 $00l : l = 2n$   
 $h00 : h = 2n$

Special: as above, plus

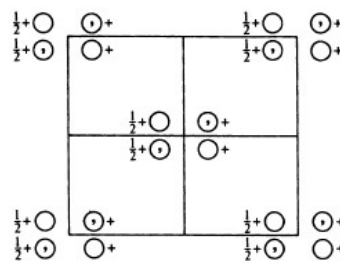
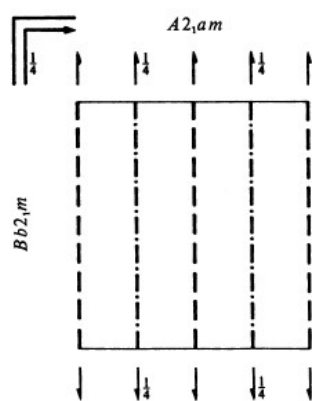
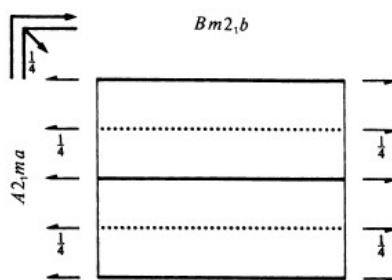
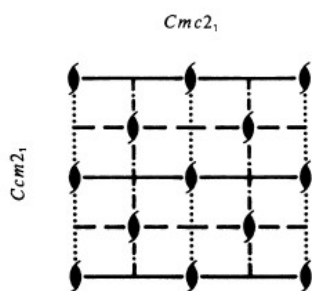
16	<i>n</i>	$.m.$	$0, y, z$ $0, \bar{y}, z$	$0, \bar{y}, z$ $0, y, z$	$\bar{y}, 0, z$ $y, 0, z$	$y, 0, z$ $\bar{y}, 0, z$	no extra conditions
16	<i>m</i>	$.m.$	$x, x, z$ $\bar{x}, x, z$	$\bar{x}, \bar{x}, z$ $x, \bar{x}, z$	$\bar{x}, x, z$ $x, \bar{x}, z$	$x, \bar{x}, z$ $\bar{x}, x, z$	no extra conditions
16	<i>l</i>	$m..$	$x, y, 0$ $\bar{x}, y, 0$	$\bar{x}, \bar{y}, 0$ $x, \bar{y}, 0$	$\bar{y}, x, 0$ $y, x, 0$	$y, \bar{x}, 0$ $\bar{y}, \bar{x}, 0$	no extra conditions
16	<i>k</i>	$.2$	$x, x + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$ $\bar{x}, \bar{x} + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$\bar{x}, \bar{x} + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$ $x, x + \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$\bar{x} + \frac{1}{2}, x, \frac{1}{2}$ $x + \frac{1}{2}, \bar{x}, \frac{1}{2}$	$x + \frac{1}{2}, \bar{x}, \frac{1}{2}$ $\bar{x} + \frac{1}{2}, x, \frac{1}{2}$	$hkl : l = 2n$
8	<i>j</i>	$m2m.$	$x, \frac{1}{2}, 0$	$\bar{x}, \frac{1}{2}, 0$	$\frac{1}{2}, x, 0$	$\frac{1}{2}, \bar{x}, 0$	no extra conditions
8	<i>i</i>	$m2m.$	$x, 0, 0$	$\bar{x}, 0, 0$	$0, x, 0$	$0, \bar{x}, 0$	no extra conditions
8	<i>h</i>	$m.2m$	$x, x, 0$	$\bar{x}, \bar{x}, 0$	$\bar{x}, x, 0$	$x, \bar{x}, 0$	no extra conditions
8	<i>g</i>	$2mm.$	$0, \frac{1}{2}, z$	$\frac{1}{2}, 0, z$	$0, \frac{1}{2}, z$	$\frac{1}{2}, 0, z$	$hkl : l = 2n$
8	<i>f</i>	$.2/m$	$\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{2}$	$\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{1}{2}$	$\frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \frac{1}{2}$	$hkl : k, l = 2n$
4	<i>e</i>	$4mm$	$0, 0, z$	$0, 0, z$			no extra conditions
4	<i>d</i>	$\bar{4}m2$	$0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}$			$hkl : l = 2n$
4	<i>c</i>	$mmm.$	$0, \frac{1}{2}, 0$	$\frac{1}{2}, 0, 0$			$hkl : l = 2n$
2	<i>b</i>	$4/mmm$	$0, 0, \frac{1}{2}$				no extra conditions
2	<i>a</i>	$4/mmm$	$0, 0, 0$				no extra conditions

$Cmc2_1$ 

No. 36

 $C_{2v}^{12}$  $Cmc2_1$  $mm2$ 

Orthorhombic

Patterson symmetry  $Cmmm$ 

CONTINUED

No. 36

 $Cmc2_1$ 

**Generators selected** (1);  $t(1,0,0)$ ;  $t(0,1,0)$ ;  $t(0,0,1)$ ;  $t(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$ ; (2); (3)

**Positions**

Multiplicity,  
Wyckoff letter,  
Site symmetry

Coordinates

 $(0,0,0)+ (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)+$ 

Reflection conditions

8  $b$  1 (1)  $x, y, z$  (2)  $\bar{x}, \bar{y}, z + \frac{1}{2}$  (3)  $x, \bar{y}, z + \frac{1}{2}$  (4)  $\bar{x}, y, z$

General:

 $hkl : h + k = 2n$  $0kl : k = 2n$  $h0l : h, l = 2n$  $hk0 : h + k = 2n$  $h00 : h = 2n$  $0k0 : k = 2n$  $00l : l = 2n$ 

Special: no extra conditions

4  $a$   $m..$   $0, y, z$   $0, \bar{y}, z + \frac{1}{2}$

$P4/mmm$

$D_{4h}^1$

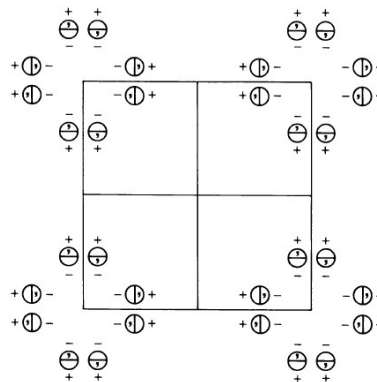
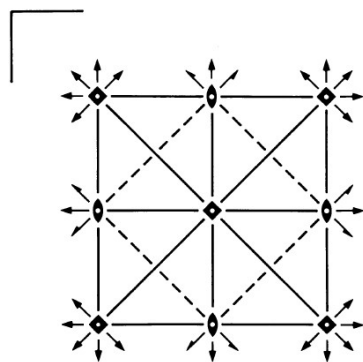
$4/mmm$

Tetragonal

No. 123

$P 4/m 2/m 2/m$

Patterson symmetry  $P4/mmm$



Origin at centre ( $4/mmm$ )



**Generators selected** (1);  $t(1,0,0)$ ;  $t(0,1,0)$ ;  $t(0,0,1)$ ; (2); (3); (5); (9)

**Positions**

Multiplicity,  
Wyckoff letter,  
Site symmetry

Coordinates

Reflection conditions

		(1) $x, y, z$	(2) $\bar{x}, \bar{y}, z$	(3) $\bar{y}, x, z$	(4) $y, \bar{x}, z$	
16	$u$ 1	(5) $\bar{x}, y, z$	(6) $x, \bar{y}, z$	(7) $y, x, z$	(8) $\bar{y}, \bar{x}, z$	General: no conditions
		(9) $\bar{x}, \bar{y}, z$	(10) $x, y, z$	(11) $y, \bar{x}, z$	(12) $\bar{y}, x, z$	
		(13) $x, \bar{y}, z$	(14) $\bar{x}, y, z$	(15) $\bar{y}, \bar{x}, z$	(16) $y, x, z$	
8	$t$ . $m$ .	$x, \frac{1}{2}, z$	$\bar{x}, \frac{1}{2}, z$	$\frac{1}{2}, x, z$	$\frac{1}{2}, \bar{x}, z$	Special: no extra conditions
		$\bar{x}, \frac{1}{2}, z$	$x, \frac{1}{2}, z$	$\frac{1}{2}, x, z$	$\frac{1}{2}, \bar{x}, z$	
8	$s$ . $m$ .	$x, 0, z$	$\bar{x}, 0, z$	$0, x, z$	$0, \bar{x}, z$	no extra conditions
		$\bar{x}, 0, z$	$x, 0, z$	$0, x, z$	$0, \bar{x}, z$	
8	$r$ . . $m$	$x, x, z$	$\bar{x}, \bar{x}, z$	$\bar{x}, x, z$	$x, \bar{x}, z$	no extra conditions
		$\bar{x}, x, z$	$x, \bar{x}, z$	$x, x, z$	$\bar{x}, \bar{x}, z$	
8	$q$ $m$ . .	$x, y, \frac{1}{2}$	$\bar{x}, \bar{y}, \frac{1}{2}$	$\bar{y}, x, \frac{1}{2}$	$y, \bar{x}, \frac{1}{2}$	no extra conditions
		$\bar{x}, y, \frac{1}{2}$	$x, \bar{y}, \frac{1}{2}$	$y, x, \frac{1}{2}$	$\bar{y}, \bar{x}, \frac{1}{2}$	
8	$p$ $m$ . .	$x, y, 0$	$\bar{x}, \bar{y}, 0$	$\bar{y}, x, 0$	$y, \bar{x}, 0$	no extra conditions
		$\bar{x}, y, 0$	$x, \bar{y}, 0$	$y, x, 0$	$\bar{y}, \bar{x}, 0$	
4	$o$ $m2m$ .	$x, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$\bar{x}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, x, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, \bar{x}, \frac{1}{2}$	no extra conditions
4	$n$ $m2m$ .	$x, \frac{1}{2}, 0$	$\bar{x}, \frac{1}{2}, 0$	$\frac{1}{2}, x, 0$	$\frac{1}{2}, \bar{x}, 0$	no extra conditions
4	$m$ $m2m$ .	$x, 0, \frac{1}{2}$	$\bar{x}, 0, \frac{1}{2}$	$0, x, \frac{1}{2}$	$0, \bar{x}, \frac{1}{2}$	no extra conditions
4	$l$ $m2m$ .	$x, 0, 0$	$\bar{x}, 0, 0$	$0, x, 0$	$0, \bar{x}, 0$	no extra conditions
4	$k$ $m . 2m$	$x, x, \frac{1}{2}$	$\bar{x}, \bar{x}, \frac{1}{2}$	$\bar{x}, x, \frac{1}{2}$	$x, \bar{x}, \frac{1}{2}$	no extra conditions
4	$j$ $m . 2m$	$x, x, 0$	$\bar{x}, \bar{x}, 0$	$\bar{x}, x, 0$	$x, \bar{x}, 0$	no extra conditions
4	$i$ $2mm$ .	$0, \frac{1}{2}, z$	$\frac{1}{2}, 0, z$	$0, \frac{1}{2}, z$	$\frac{1}{2}, 0, z$	$hkl : h + k = 2n$
2	$h$ $4mm$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, z$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, z$			no extra conditions
2	$g$ $4mm$	$0, 0, z$	$0, 0, z$			no extra conditions
2	$f$ $mmm$ .	$0, \frac{1}{2}, 0$	$\frac{1}{2}, 0, 0$			$hkl : h + k = 2n$
2	$e$ $mmm$ .	$0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}$			$hkl : h + k = 2n$
1	$d$ $4/mmm$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$				no extra conditions
1	$c$ $4/mmm$	$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$				no extra conditions
1	$b$ $4/mmm$	$0, 0, \frac{1}{2}$				no extra conditions
1	$a$ $4/mmm$	$0, 0, 0$				no extra conditions