

中国科学技术大学

2016-2017 学年第一学期考试试卷

考试科目: 结晶化学导论

得分: _____

学生所在系: _____ 姓名: _____ 学号: _____

一、填空: (40分)

- 1、晶体的某一晶面与 a,b,c 轴的截距系数分别为 4,2,4, 该晶面指数为_____;
通过原点的直线上某一点坐标为(4,2,4), 则该直线的晶向指数为_____。
- 2、(110)和(001)面属于_____晶带, [201]和[103]晶带轴所决定的晶面为_____。
- 3、空间群 $P 2/n 2/n 2/n$ 的简写国际符号为_____, 相应点群的国际符号为_____, 点群的圣佛里斯符号为_____, 点阵点群为_____。该空间群属于_____晶系, 该晶系有_____种空间格子, 分别为_____。
- 4、点群 3 的晶体取六方定向, $\{10\bar{1}0\}$ 晶形的等效晶面数为_____, 它们的四轴定向晶面指数分别为_____。
该晶形为_____形和_____形。
- 5、正交 FeP 纳米棒的长轴方向为 a、b 或 c 轴, 使用波长为 0.15406nm 的 X 射线进行粉末衍射, 002, 200, 020 半高宽分别为 1.1° , 1.12° , 0.21° ; $d_{200}=0.2629\text{nm}$, $d_{020}=0.1586$, $d_{002}=0.2959\text{nm}$ 。则晶胞参数 $a=$ _____nm, $b=$ _____nm, $c=$ _____nm; 纳米棒的长轴方向为_____方向, 纳米棒的直径约为_____nm。
- 6、La 的晶体为 ABAC 最密堆积结构, 则密堆积产生的四面体空隙数是 La 原子数的_____倍, 八面体空隙数是 La 原子数的_____倍, La 原子配位数为_____, 晶胞中有_____个 La 原子, 六方晶胞原子坐标为_____。
- 7、空间群为 Pnnn 的粉末衍射图中, (hkl)面($h,k,l \neq 0$)的衍射条件为_____, (hk0)面的衍射条件为_____; (0kl)面的衍射条件为_____; (h0l)面的衍射条件为_____; (h00)面的衍射条件为_____; (0k0)面的衍射条件为_____; (00l)面的衍射条件为_____。

二、已知 Cu_2O 空间群为 $\text{Pn}3\text{m}$ 。 X_2Y 属于四方畸变的 Cu_2O 结构，晶胞中原子坐标 X: $(1/4, 1/4, 1/4)$, $(3/4, 3/4, 1/4)$, $(3/4, 1/4, 3/4)$, $(1/4, 3/4, 3/4)$; Y: $(1/2, 1/2, 1/2)$, $(0, 0, 0)$ 。(20分)

- 1、判断四方 X_2Y 的点阵格子类型。确定晶体的空间群，普通等效点系的重复数；晶体的点群及普形的晶面数。
- 2、四方 X_2Y 晶胞中的 6 个原子分别属于几组等同点？分别写出这几组等同点的坐标。
- 3、四方 X_2Y 晶胞中的 6 个原子占据几套等效点系？分别写出这几套等效点系的坐标。
- 4、分别写出立方 Cu_2O 和四方 X_2Y 晶体 $\{100\}$ 晶形各晶面的指数，说明 $\{100\}$ 晶形的类型(普形或特形，开形或闭形)。
- 5、如果 X_2Y 为正交畸变的 Cu_2O 结构(原子位置不变)，试说明其空间群。结构畸变后，垂直轴向的对称面有无变化？

三、化合物 $\text{Li}_x\text{Na}_y\text{Nb}_z\text{O}_3$ 中 Li、Na 和 Nb 的质量百分数分别为 0.1061%、13.7101% 和 56.8259%，密度为 4.486g/cm^3 。晶体点群为 mmm ，粉末 X 射线衍射数据如下：(20 分) ($\text{CuK}\alpha_1$ $\lambda=1.5406\text{\AA}$ ；Li、Na、Nb 和 O 的原子量分别为 6.9410、22.9898、92.9064 和 15.9994；阿佛加德罗常数： 6.023×10^{23})

d(A)	Int-I	h	k	l	d(A)	Int-I	h	k	l	d(A)	Int-I	h	k	l
4.5520	1	0	1	1	2.3687	1	1	1	2	1.8077	1	0	1	3
4.5145	1	1	1	0	2.3528	1	2	1	1	1.8007	2	2	3	1
3.9565	449	0	2	0	2.2760	25	0	2	2	1.7851	1	3	1	0
3.9107	773	1	0	1	2.2572	25	2	2	0	1.7652	58	1	4	1
3.5059	9	1	1	1	2.1867	8	1	3	1	1.7576	37	1	0	3
2.7813	999*	0	0	2	2.1028	1	1	2	2	1.7529	92	2	2	2
2.7813	999*	1	2	1	2.0917	1	2	2	1	1.7404	28	3	0	1
2.7485	174	2	0	0	1.9782	86	0	4	0	1.7158	1	1	1	3
2.3834	1	0	3	1	1.9553	185	2	0	2	1.6997	1	3	1	1
2.3780	1	1	3	0	1.8077	1	1	3	2	1.6123	41	0	4	2

- 1、说明化合物所属晶系，计算晶胞参数，根据衍射数据判断点阵格子类型，并确定空间群。
- 2、确定化合物的化学式，晶胞的化学式量数。假如 Nb 只占据一套等效点系，且占有率为 100%，说明 Nb 所占据等效点系的重复数。O 有无可能只占据一套等效点系，为什么？

四、M 为 A1 密堆积面心立方结构，晶胞参数为 6.084\AA ，假设 M 晶体结构变化时，原子半径不变。(20 分)

1、采用 $\text{CuK}\alpha 1$ 线 ($\lambda=1.5406\text{\AA}$) 进行粉末 X 射线衍射，取 $2\theta \leq 60^\circ$ ，写出其衍射指数。

2、计算体心立方结构 (A2 密堆积) 和简单立方结构 (晶胞原子数为 1) 的 M 晶体晶胞参数，写出其衍射指数 (衍射条件与 1 相同)。