

СТРУКТУРА КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ТЕЛ*

В графе «сингония» приняты следующие обозначения: I — кубическая, II — тетрагональная, III — гексагональная, IIIa — тригональная, IV — ромбическая, V — моноклинная, VI — триклиническая.

Тип структуры неорганических соединений (третья графа) указан по *Strukturbericht*.

Пространственные группы (четвертая графа) даны в международном обозначении. Буквы и цифры в принятой последовательности определяют трансляционную решетку и тот минимум элементов симметрии, который полностью выражает данную пространственную группу. Размеры осей элементарной ячейки (пятая графа) приведены, как правило, в ангстремах ($1 \text{ \AA} = 10^{-8} \text{ см}$). Значения, выраженные в kX , отмечены звездочкой. Соотношение между этими единицами выражается следующим образом:

$$1 \text{ kX} = 1,00202 \text{ \AA} = 1,00202 \cdot 10^{-8} \text{ см}$$

В последней графе таблицы указано число формульных весов в элементарной ячейке. В случае статистических структур общее число различных атомов, приходящееся на элементарную ячейку, обозначено буквой A .

Буквы a , b , c и цифры I, II, III, IV, стоящие рядом с формулой, обозначают модификацию вещества.

Формула	Сингония	Тип структуры	Пространственная группа	Параметры ячейки a , b , c в \AA и углы α , β , γ	Число формульных весов	The Madelung constant, M^\dagger
AgCl	I	NaCl^*	$Fm\bar{3}m$	$5,556$	4	1.74756
AgF	I	NaCl	$Fm\bar{3}m$	$4,93$	4	-/-
AgBr	I	NaCl^*	$Fm\bar{3}m$	$5,776$	4	-/-
CsBr	I	CsCl	$Pm\bar{3}m$	$4,296$	1	1.76267
CsCl (25° C)	I	CsCl	$Pm\bar{3}m$	$4,10$	1	-/-
CsF	I	NaCl	$Fm\bar{3}m$	$6,020$	4	1.74756
CsJ	I	CsCl	$Pm\bar{3}m$	$4,5667$	1	1.76267
KBr	I	NaCl	$Fm\bar{3}m$	$6,599$	4	1.74756
KCl	I	NaCl	$Fm\bar{3}m$	$6,2910$	4	-/-
KF	I	NaCl	$Fm\bar{3}m$	$5,344$	4	-/-
KJ	I	NaCl	$Fm\bar{3}m$	$7,066$	4	-/-
LiBr	I	NaCl	$Fm\bar{3}m$	$5,501$	4	-/-
LiCl	I	NaCl	$Fm\bar{3}m$	$5,13988$	4	-/-
LiF	I	NaCl	$Fm\bar{3}m$	$4,0279$	4	-/-
LiJ	I	NaCl	$Fm\bar{3}m$	$6,012$	4	-/-
NaBr	I	NaCl	$Fm\bar{3}m$	$5,97299$	4	-/-
NaF	I	NaCl	$Fm\bar{3}m$	$5,63874^*$	4	-/-
NaCl (каменная соль)	I	NaCl^*	$Fm\bar{3}m$	$5,63874^*$	4	-/-
NaJ	I	NaCl	$Fm\bar{3}m$	$6,475$	4	-/-

The Born Exponent[†], n is:

Ion type	n
He, Li^+	5
$\text{Ne}, \text{Na}^+, \text{F}^-$	7
$\text{Ar}, \text{K}^+, \text{Cu}^+, \text{Cl}^-$	9
$\text{Kr}, \text{Rb}^+, \text{Ag}^+, \text{Br}^-$	10
$\text{Xe}, \text{Cs}^+, \text{Au}^+, \text{I}^-$	12

For a crystal with a mixed-ion type, an average of the values of n in this table is to be used (6 for LiF, for example).

* Справочник химика т. 1. Под ред. Никольского П.Б. 1966 г.

† CRC Handbook of Chemistry and Physics, 84th Edition, 2003-2004.