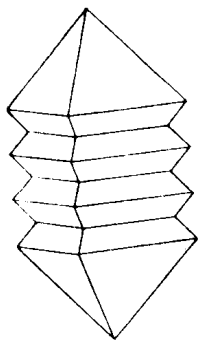
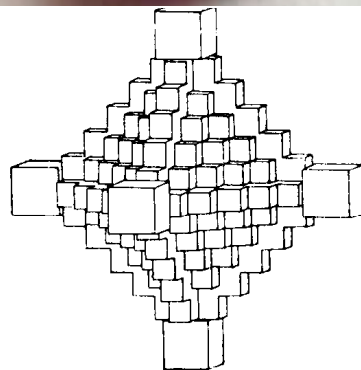
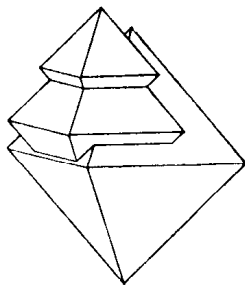


2009-2010 期末作业:

1、已知: (镁铝)石榴子石($Mg_3Al_2(SiO_4)_3$), $a = 11.4582(5)$, $Ia-3d$; 萤石(CaF_2), $a = 5.46305$, $Fm-3m$ (225); 尖晶石($MgAl_2O_4$), $a = 8.0831$, $Fd-3m$ (227); (钾)明矾 $KAl(SO_4)_2 \cdot 12H_2O$, $a=12.157$, $Pa-3$ (205). 利用 SHAPE7.1 程序, 依据右侧照片和下方图形, (1)、绘出石榴子石的聚形形貌图, 并标出单形符号; (2)、明矾和萤石的平行连生晶体形貌图; (3)、尖晶石和萤石的双晶形貌图。



明矾八面体晶体的平行连生



萤石立方体晶体的平行连生

矿物名称 成分及对称型	单晶的形状	双晶		
		形状	类型 (及别名)	双晶律
尖晶石 $MgAl_2O_4$ $3L^4 4L^3 6L^2 9PC$			接触双晶	双晶轴 \perp (111) 双晶面 \parallel (111) 接合面 \parallel (111) (尖晶石双晶律)
萤石 CaF_2 $3L^4 4L^3 6L^2 9PC$			穿插双晶	双晶轴 \perp (111) 双晶面 \parallel (111)

2、阅读第七章文件 2 “结构与性能的关系”，用自己的语言写出全文小结，并结合实际举例说明结构与性能的关系。(要求用自己的语言重新表述，不可以抄袭书上内容!)

3、用自己的语言综述晶体学的最新发展动态? (要求用自己的语言重新表述，不可以抄袭书上或网上内容!)

4、已知 $\text{Ga}[\text{B}_2\text{P}_2\text{O}_7(\text{OH})_5]$ ，其晶胞参数为：*monoclinic, C12/c1(No.15)*, $a = 17.6404(3)\text{Å}$, $b = 6.70735(8)\text{Å}$, $c = 6.99525(8)\text{Å}$, $\beta = 109.157(1)^\circ$, $V = 781.85(3)\text{Å}^3$, $Z = 4$ 。原子坐标为:

Atoms	X	Y	Z
Ga1	0.25	0.25	0.5
P1	0.84767(1)	0.3729(3)	0.7048(3)
B1	0.0876(5)	0.2766(12)	0.1004(9)
O1	0.3227(2)	0.2771(6)	0.3382(5)
O2	0.7788(2)	0.5137(5)	0.0476(6)
O3	0.0914(3)	0.4745(6)	0.1597(6)
O4	0.6059(2)	0.2585(7)	0.4110(5)
O5	0.5212(3)	0.3384(5)	0.5810(6)
O6	0.6573(3)	0.3410(5)	0.7551(5)

- (1)、该晶胞是否可以转化为 β 角更接近于 90° 的晶胞? (图示说明)
- (2)、如可以转换, 请用 Cryscon V1.1 程序求出新的晶胞参数和空间群? 并将上表中的原子坐标转换成新晶胞的原子坐标? (注意: 转换前后, 晶胞原点可能会发生平移?)
- (3)、如其具有正长石的卡斯巴双晶律、曼尼巴双晶律和巴温诺双晶律, 请用 Shape 程序分别画出其形貌图。(参见本网站“晶体学基础”第八章)
- (4)、用 ATOMS 程序画出其晶体结构图(须从最佳方向和最佳表达方式画图)。
- (5)、描述晶体结构, 计算键长、键角和配位等?
- (6)、计算其理论粉末 X 射线图谱。

程序注册码:

ATOMS.EXE ---- OUZKB-LMXA
 SHAPE.EXE ---- WVG-EYXZK
 CRYSCON11 ---- KHVPXN-AX

(下学期开学前提交纸质报告!)