

Табл. 1: Структура елементарних матеріалів у нормальних умовах. Для кожного елемента наведений тип кристалу (зліва посередині, пусте місце означає газову фазу) і параметри ґратки (справа):  $a$  в ангстремах (зверху) і  $c/a$  або  $\alpha$  (посередині). Для кристалів також вказана найближча поліморфна структура (зліва знизу) і температура переходу в неї в Кельвінах (справа знизу). Якщо поліморфна модифікація не вказана, то це означає велику кількість алотропних форм, температура ж вказує температуру плавлення основної форми. Якщо температура не вказана, то поліморфна модифікація метастабільна. Для газів наведена кристалічна структура і температура кристалізації. Основна алотропна форма за умовчанням  $\alpha$ .

H <sub>2</sub>															He	
hcp	13														–	
Li	3.51	Be	2.29			B*	10.1	g-C*	2.46	N <sub>2</sub> *		O <sub>2</sub> *		F <sub>2</sub> *	Ne	
bcc		hcp	1.57			tP50	1.39	hP4	2.73							
liq	453	bcc	1527			hR12	–	dia	–		63		55		53	24
Na	4.23	Mg	3.20			Al	4.05	Si	5.43	b-P*		S*		Cl <sub>2</sub>		Ar
bcc		hcp	1.62			fcc		dia		oC8		oF128				
liq	371	liq	924			liq	934	liq	1690		1300		386	oC8	172	20
K	5.33	Ca	5.56	Sc...Zn		Ga*		Ge	5.66	As	4.13	g-Se*	4.36	Br <sub>2</sub>	Kr	
bcc		fcc				oC8		dia		hR2	54.2	hP3	1.14	liq		
liq	337	bcc	716			liq	303	liq	1210		1090		490	oC8	267	89
Rb	5.59	Sr*	6.08			Y...Cd	In	3.25	β-Sn	5.82	Sb	4.51	Te	4.46	I <sub>2</sub> *	
bcc		fcc				tI2	1.52	tI4	0.55	hR2	57.1	hP3	1.33	oC8		
liq	312	hcp	488			liq	438	dia	<286		903		723	liq	386	161
Cs	6.04	Ba	2.24	La...Hg		Tl	3.46	Pb	4.85	Bi	4.75	Po	3.36	At*	Rn	
bcc		bcc				hcp	1.60	fcc		hR2	57.2	sc				
liq	301	liq	983			bcc	508	liq	600	liq	544		hR1	309		223

Sc	3.31	Ti	2.95	V	3.03	Cr	2.88	Mn*	8.91	Fe*	2.87	Co	2.51	Ni	3.52	Cu	3.61	Zn	2.86
hcp	1.59	hcp	1.59	bcc		bcc		cl58		bcc		hcp	1.62	fcc		fcc		hcp	1.86
bcc	1610	bcc	1155	liq	2178	liq	2133		1520	fcc	1200	fcc	700	liq	1726	liq	1356	liq	692
Y	3.65	Zr	3.23	Nb	3.30	Mo	3.15	Tc	2.74	Ru	2.70	Rh	3.80	Pd	3.89	Ag	4.09	Cd	2.98
hcp	1.57	hcp	1.59	bcc		bcc		hcp	1.60	hcp	1.58	fcc		fcc		fcc		hcp	1.89
bcc	1750	bcc	1135	liq	2760	liq	2895	liq	2487	liq	2520	liq	2236	liq	1825	liq	1234	liq	594
La*	3.75	Hf	3.19	Ta	3.31	W	3.16	Re	2.76	Os	2.74	Ir	3.83	Pt	3.92	Au	4.08	Hg	
hcp	1.62	hcp	1.58	bcc		bcc		hcp	1.62	hcp	1.57	fcc		fcc		fcc		liq	
fcc	530	bcc	2010	liq	3269	liq	3687	liq	3450	liq	3320	liq	2680	liq	2042	liq	1337	hR2	234

\* Особливості структури деяких елементів:

- H: параметри hcp  $a = 3.75$ ,  $c/a = 1.73$ ; при тисках  $10^{11-12}$  Па утворюється атомарна ґратка – так званий металічний водень.
- B (напівпровідник): тетрагональний B – P4<sub>2</sub>/nnm, tP50  $a = 10.1$ ,  $c/a = 1.39$ ,  $\alpha$ -ромбоєдричний B (метастабільний) – R $\bar{3}$ m, hR12  $a = 5.06$ ,  $\alpha = 58.1$ ,  $\beta$ -ромбоєдричний B ( $1773 < T < T_m = 2346$ ) – R $\bar{3}$ m, hR105  $a = 1.01$ ,  $\alpha = 65.3$ .
- C: гексагональний графіт – hP4  $a = 2.46$ ,  $c/a = 2.73$ , напівметал, ромбоєдричний графіт – hR2  $a = 2.46$ ,  $\alpha = 39.5$ , напівметал, алмаз (метастабільний) – dia  $a = 3.57$ , широкозонний напівпровідник.
- N:  $\alpha$ -N ( $T < 36$ ) – кубічна ґратка,  $\beta$ -N ( $T < T_m = 63$ ) – гексагональна.
- O:  $\alpha$ -O ( $T < 24$ ) – ромбічна ґратка,  $\beta$ -O ( $T < 44$ ) – ромбоєдрична,  $\gamma$ -O ( $T < T_m = 55$ ) – кубічна.
- F: при  $T = 53$  кристалізується в кубічну ґратку, яка при  $T = 46$  переходить в моноклінну.
- P: black-P – oC8  $a = 3.31$ ,  $b = 4.38$ ,  $c = 10.50$ , напівпровідник; red-P і white-P (метастабільні) – P<sub>4</sub> молекули в різних низькосиметричних структурах, діелектрики.
- S:  $\alpha$ -S – oF128  $a = 10.5$ ,  $b = 12.9$ ,  $c = 24.5$ .
- Mn:  $\alpha$ -Mn ( $T < 1000$ ) – A12 cl58, I43m,  $a = 8.91$ ,  $\beta$ -Mn ( $T < 1370$ ) – P4<sub>1</sub>32, cP20  $a = 6.47$ ,  $\gamma$ -Mn – fcc  $a = 3.86$  ( $T < 1410$ ),  $\delta$ -Mn – bcc  $a = 3.08$  ( $T < T_m = 1520$ ).
- Fe:  $\alpha$ ,  $\beta$ -Fe ( $T < 1180$ ) – bcc (феромагнетик і парамагнетик),  $\gamma$ -Fe ( $T < 1700$ ) – fcc,  $\delta$ -Fe ( $T < T_m = 1810$ ) – bcc.
- Ga:  $\alpha$ -Ga – oC8  $a = 4.52$ ,  $b = 7.66$ ,  $c = 4.53$ .
- Se: gray-Se – hP3, є багато інших в тому числі й метастабільних і напівпровідникових модифікацій, зокрема,  $\alpha$ - і  $\beta$ -моноклінний Se – A<sub>k</sub> mP64 і A<sub>l</sub> mP32 обидві з просторовою групою mP2<sub>1</sub>/c.
- Sr:  $\alpha$ -Sr ( $T < 488$ ) – fcc,  $\beta$ -Sr ( $T < 878$ ) – hcp,  $\gamma$ -Sr ( $T < 1043$ ) – bcc.
- Sn:  $\alpha$ -Sn ( $T < 286$ ) – dia  $a = 6.49$ ,  $\beta$ -Sn ( $T < 505$ ) – tI4  $a = 5.82$ ,  $c/a = 0.55$ , причому перехід  $\beta \rightarrow \alpha$  супроводжується 25% збільшенням об'єму ("олов'яна чума") і переходом метал-напівпровідник.
- I: I<sub>2</sub> – oC8  $a = 7.25$ ,  $b = 9.77$ ,  $c = 4.77$ .
- La:  $\alpha$ -La ( $T < 530$ ) – hcp,  $\beta$ -La ( $T < 1150$ ) – fcc,  $\gamma$ -La ( $T < T_m = 1193$ ) – bcc.
- At: радіоактивний з коротким періодом піврозпаду.