

РХТУ им. Д.И. Менделеева
Кафедра общей технологии силикатов

Дисциплина
«Кристаллохимия»
квалификация - магистр

к.х.н. Кирсанова С.В.

Москва, 2015 г.



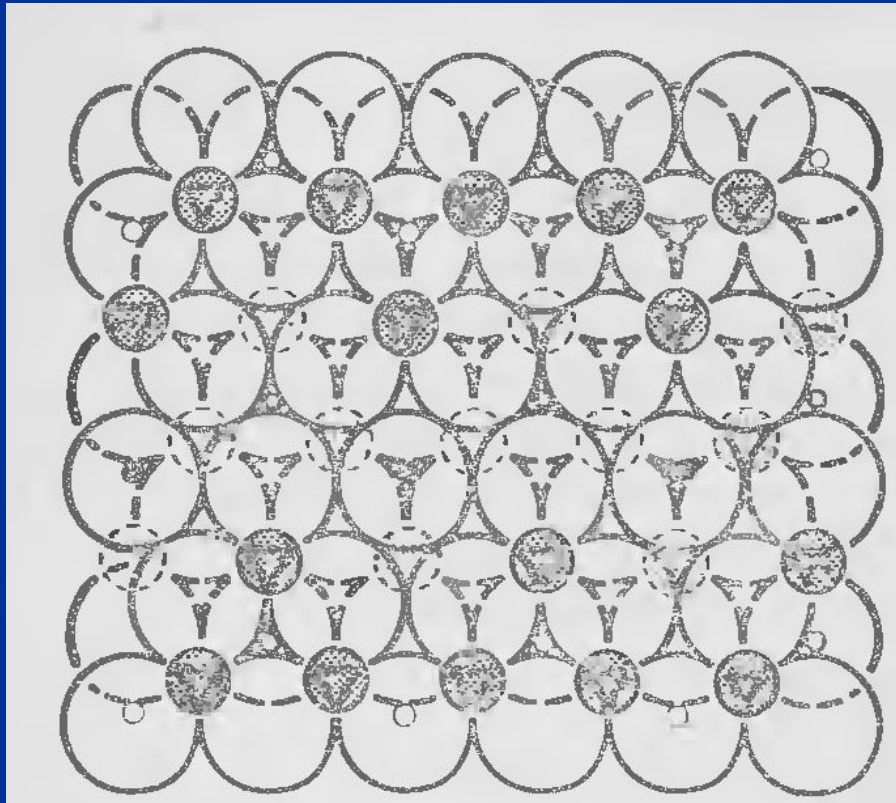
Модельные представления силикатных структур

- Плотнейшая упаковка ионов
- Плотнейшая упаковка атомов
- Шаростержневые модели
- Модели с анионными полиэдрами
- Модели с катион-кислородными полиэдрами
- Стереографические проекции



Различные способы представления структуры форстерита Mg_2SiO_4

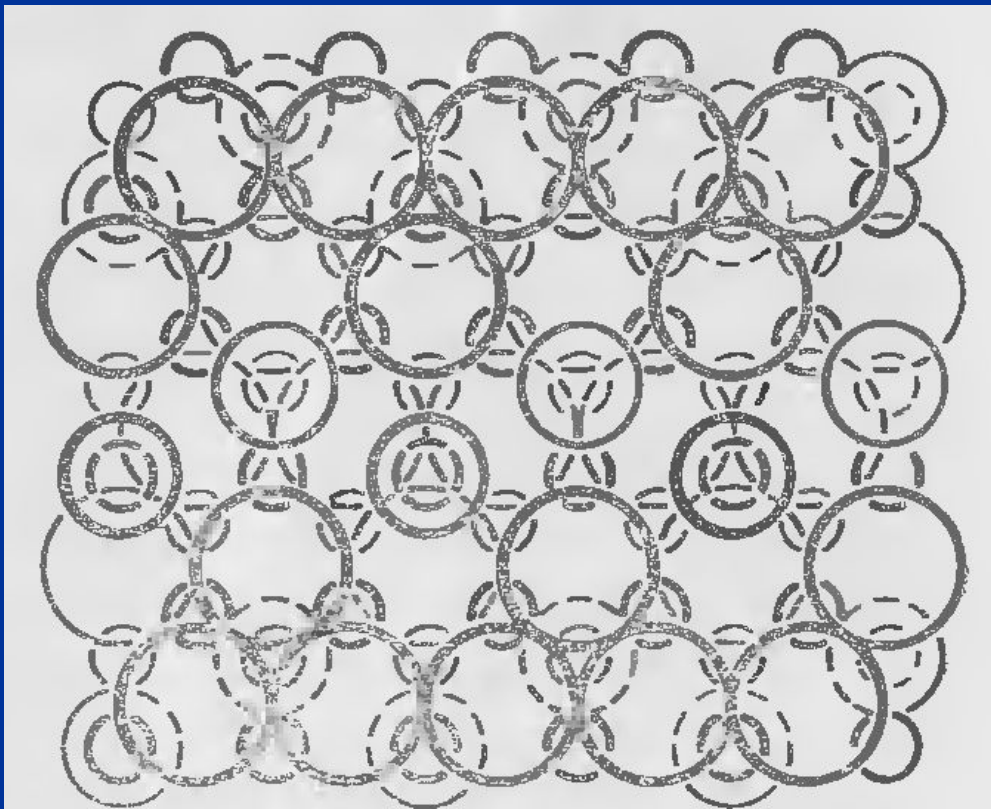
Упаковка шаров с радиусами,
пропорциональными ионным радиусам



Малые шары — $r(\text{Si}^{4+}) = 0,26 \text{ \AA}$; средние шары — $r(\text{Mg}^{2+}) = 0.72 \text{ \AA}$; большие шары — $r(\text{O}^{2-}) = 1,40 \text{ \AA}$

Различные способы представления структуры форстерита Mg_2SiO_4

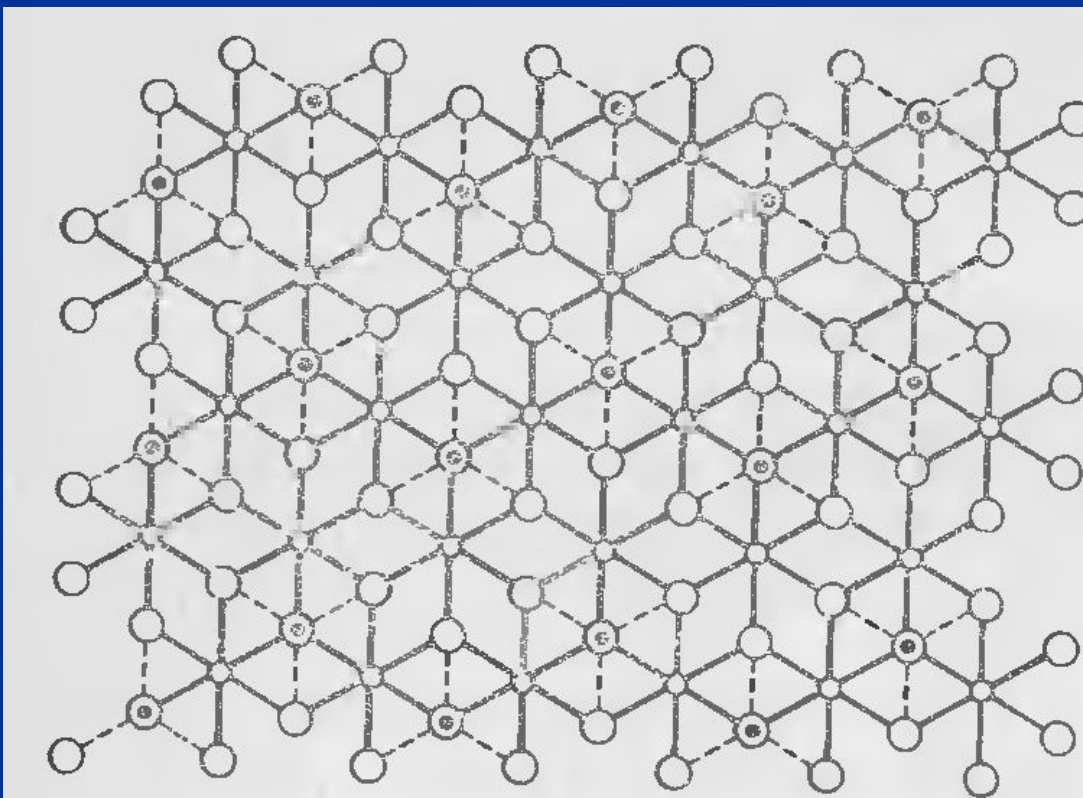
Упаковка шаров с радиусами,
пропорциональными атомным радиусам



Малые шары — $r(\text{O}) = 0,60 \text{ \AA}$; средние шары —
 $r(\text{Si}) = 1.10 \text{ \AA}$; большие шары — $r(\text{Mg}) = 1,50 \text{ \AA}$

Различные способы представления структуры форстерита Mg_2SiO_4

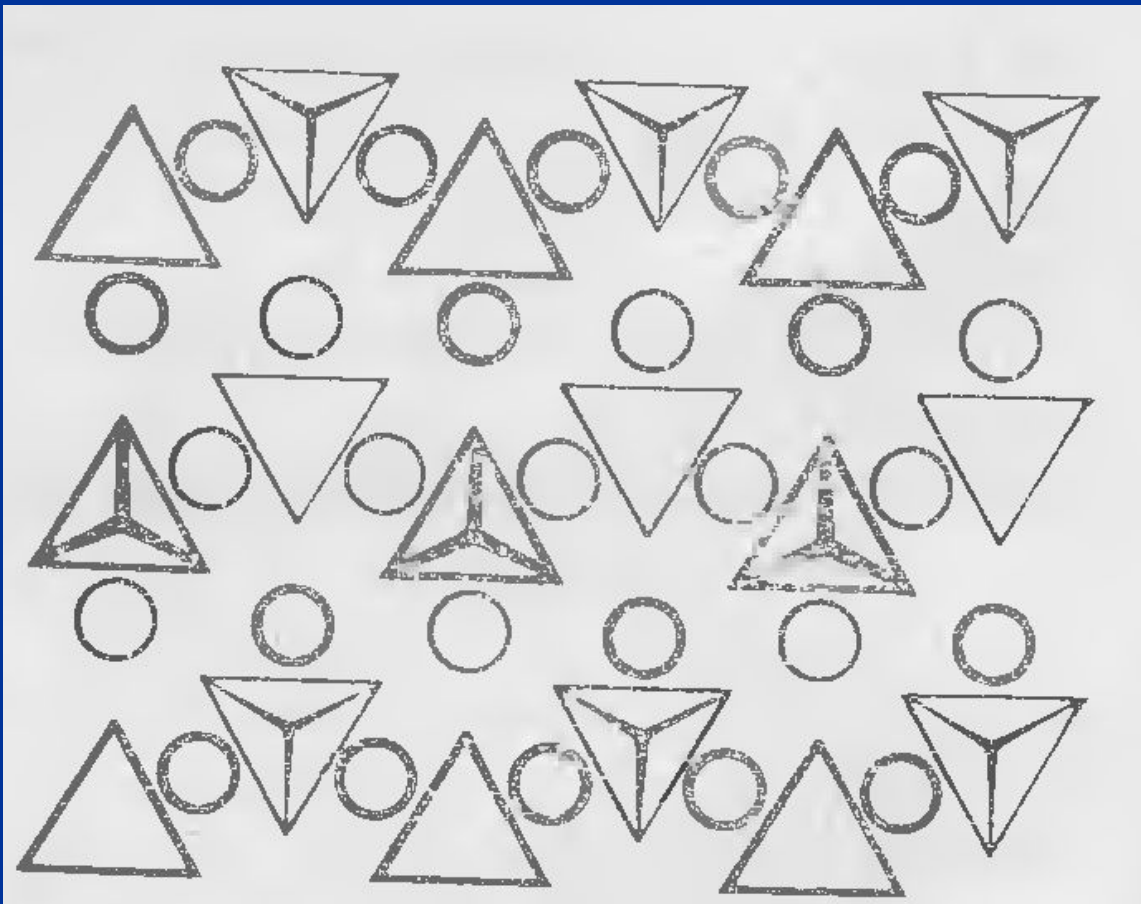
Шаростержневая модель



черные точки — Si, малые шары — Mg, большие шары — O, сплошные линии — связи Mg—O, штриховые линии — связи Si—O

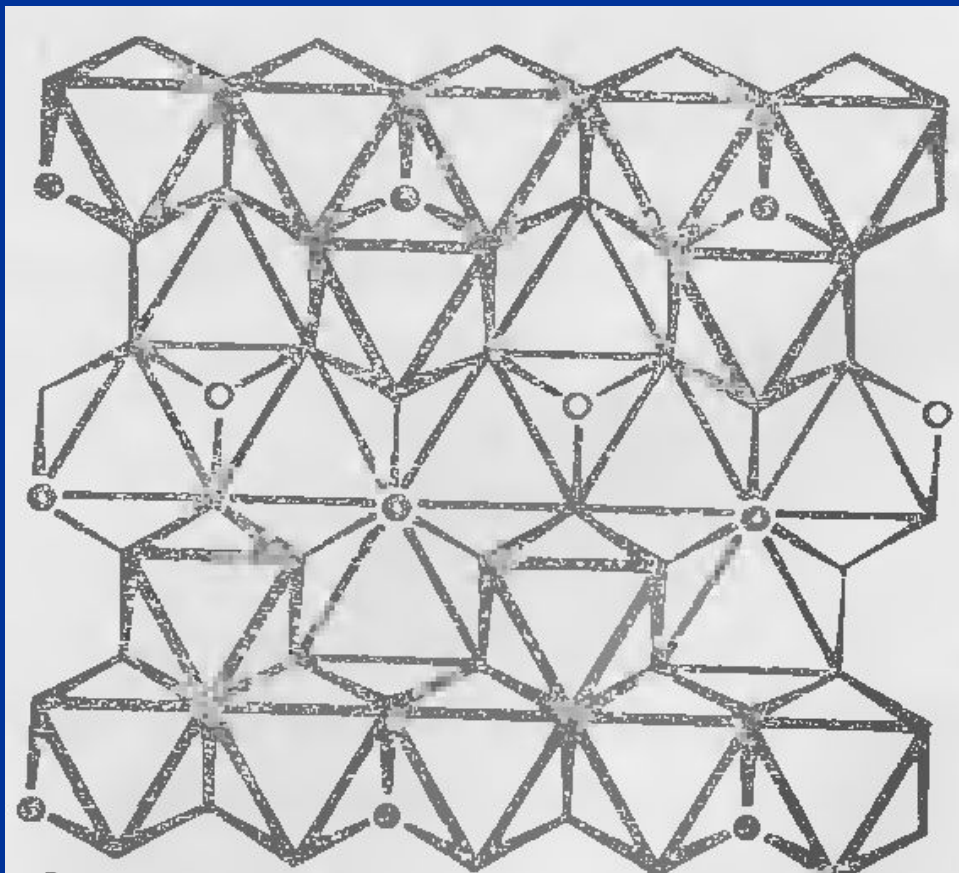
Различные способы представления структуры форстерита Mg_2SiO_4

Упаковка катионов и SiO_4 -тетраэдров



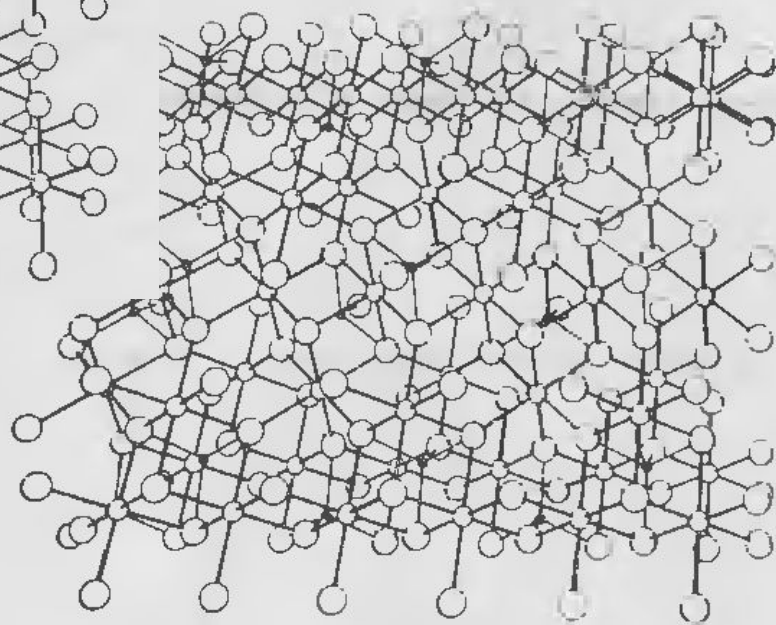
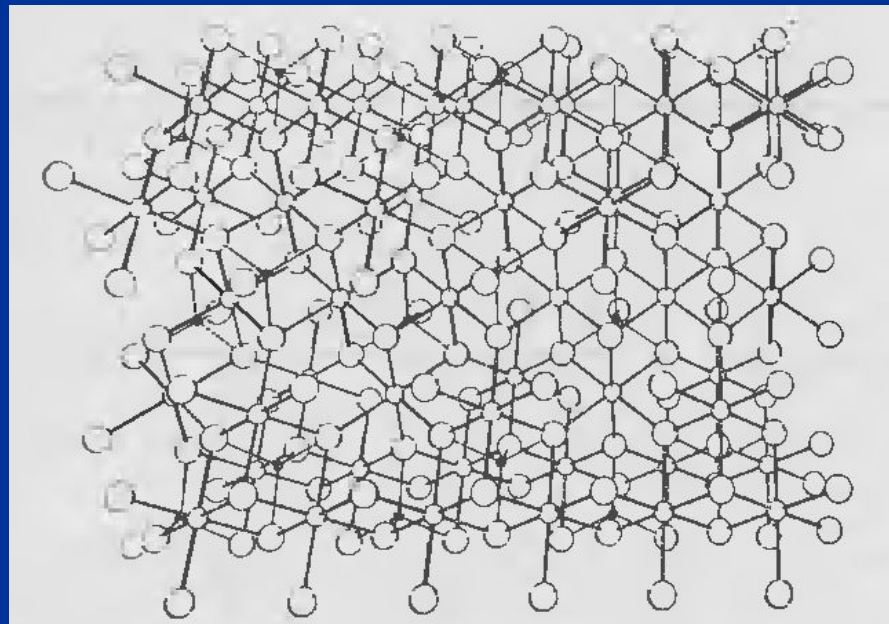
Различные способы представления структуры форстерита Mg_2SiO_4

Упаковка ионов кремния и SiO_6 -
октаэдров



Различные способы представления структуры форстерита Mg_2SiO_4

Стереографическая проекция
шаростержневой модели



Полиэдрический метод изображения кристаллических структур (метод Полинга-Белова)

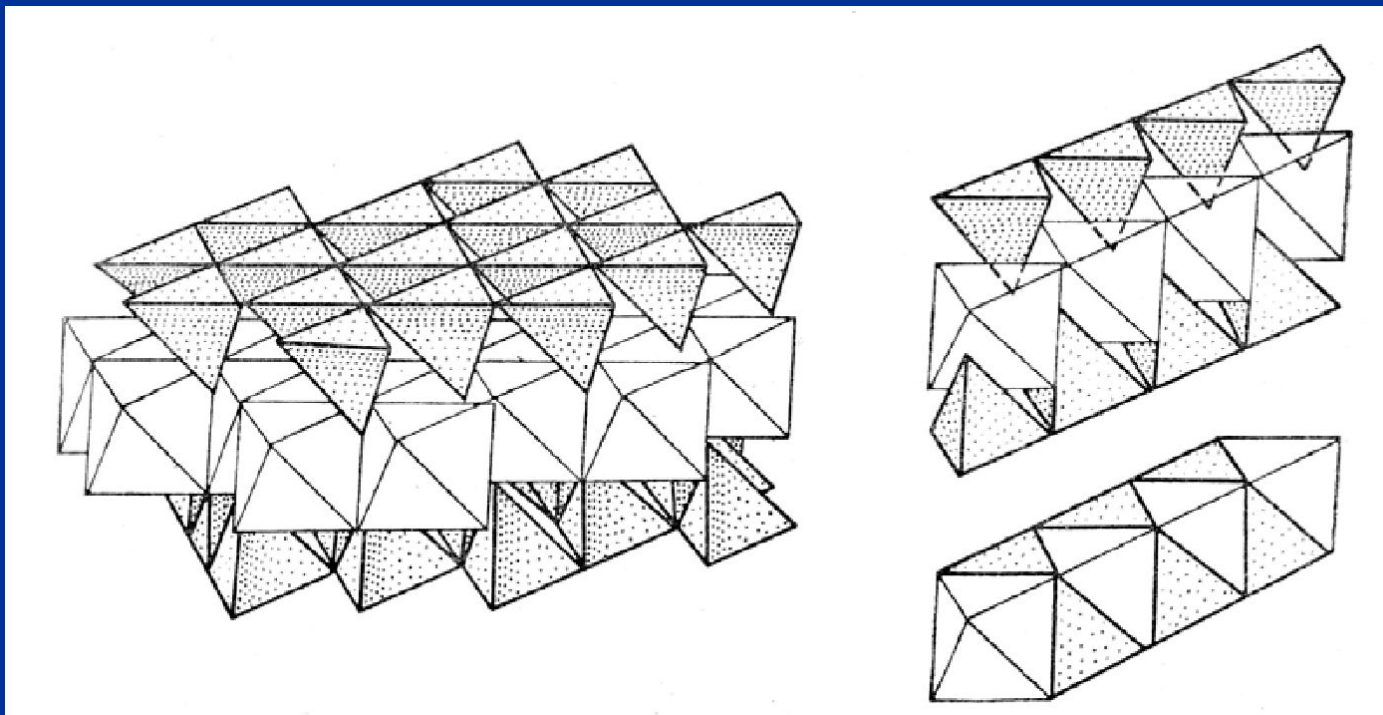
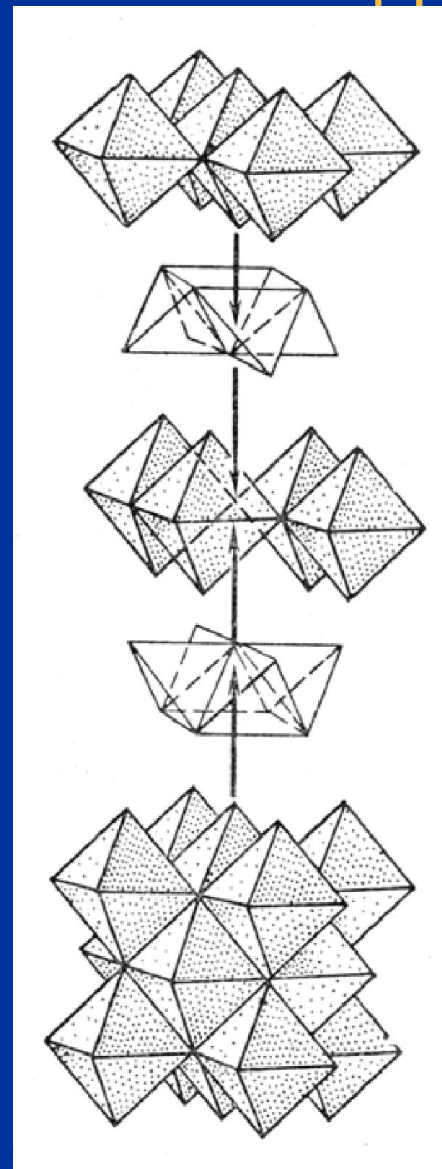
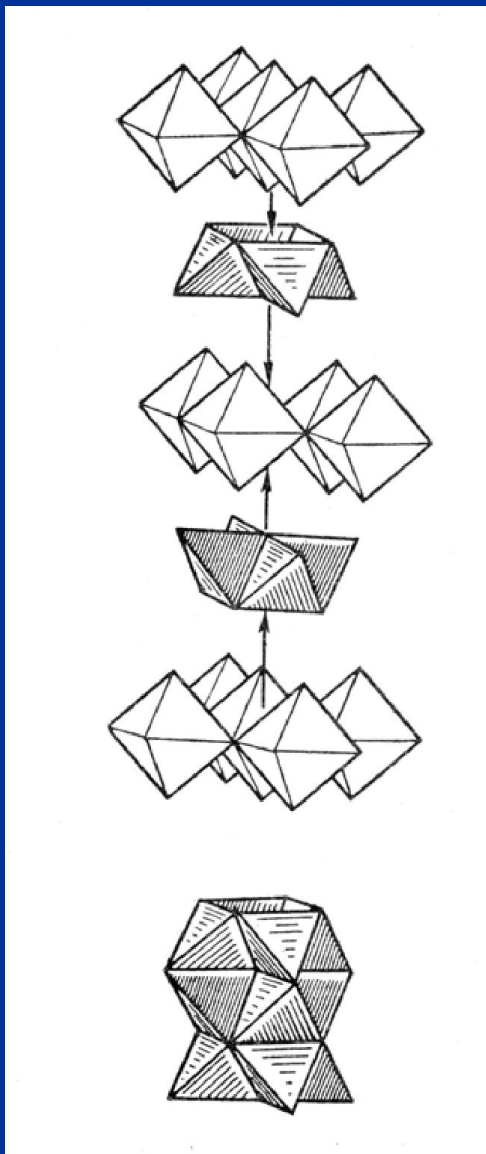
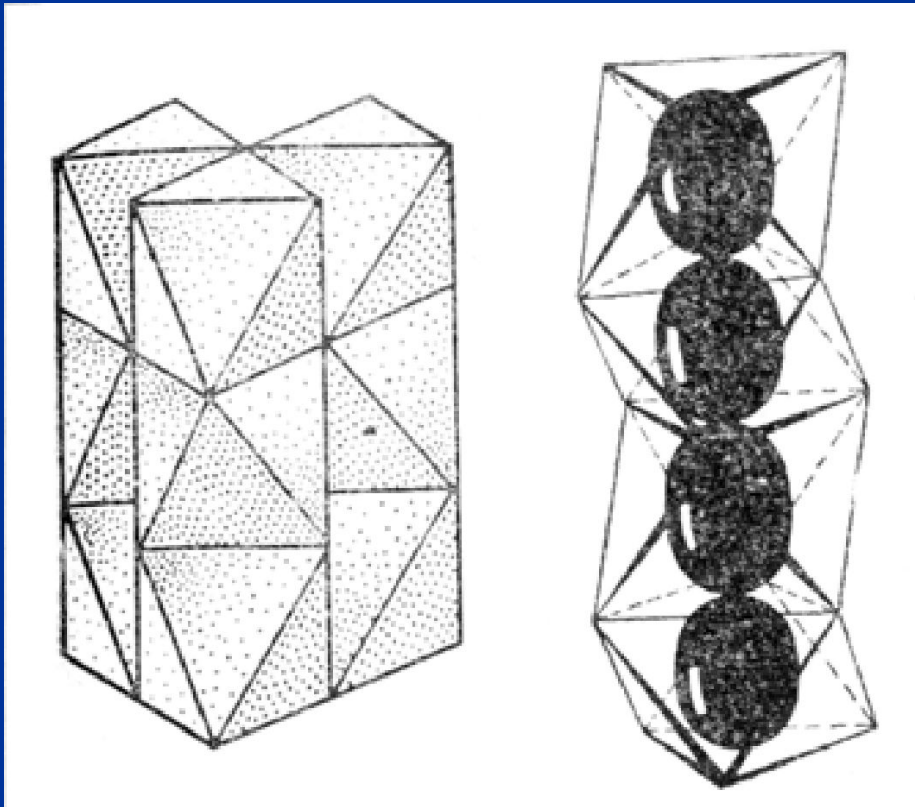


Схема разбиения плотноупакованного кристаллического пространства на октаэдры и тетраэдры

Построение полиэдрической модели

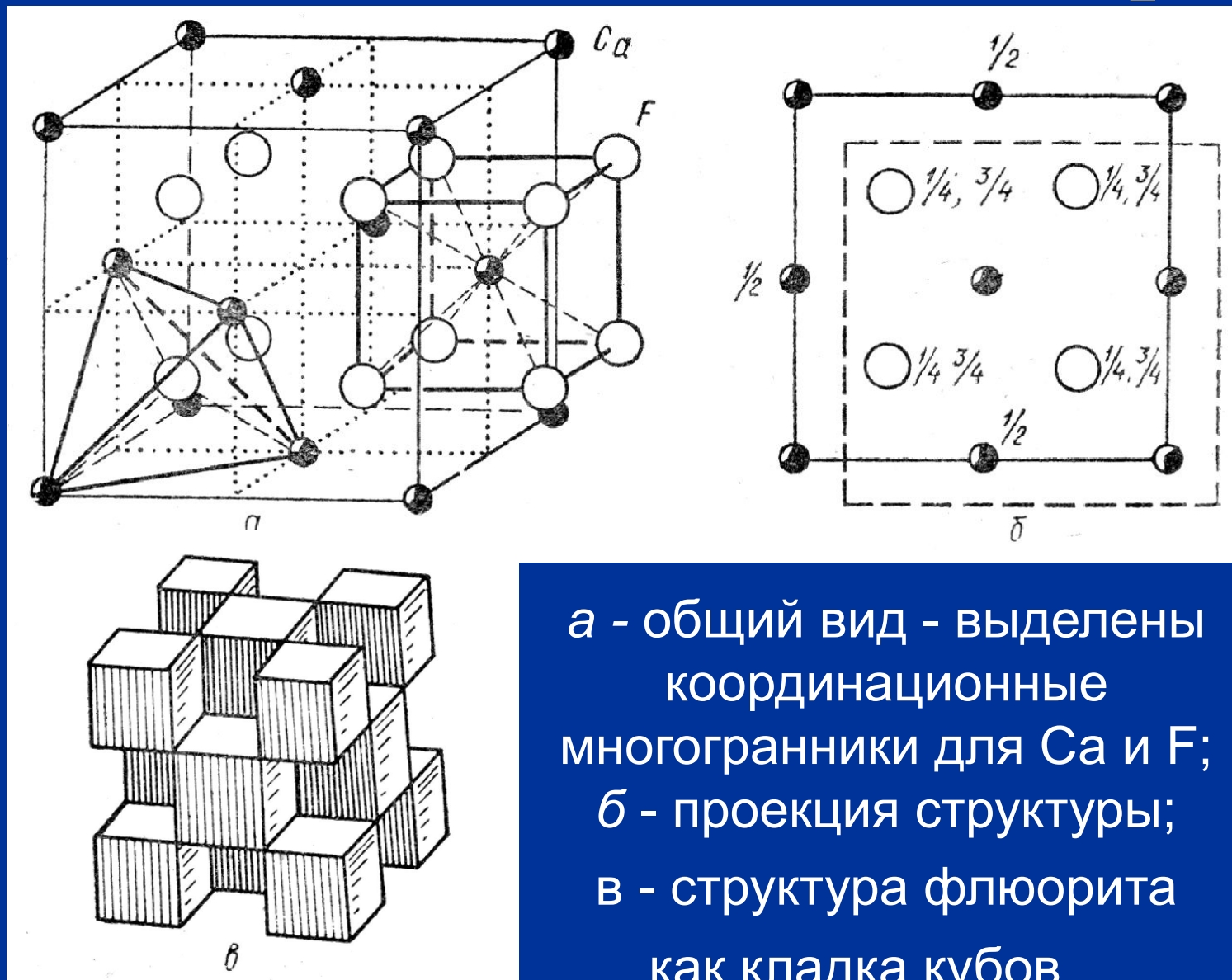


Полиэдрическая модель структуры пирротина FeS - никелина NiAs



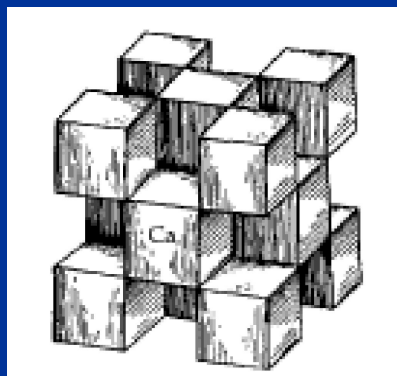
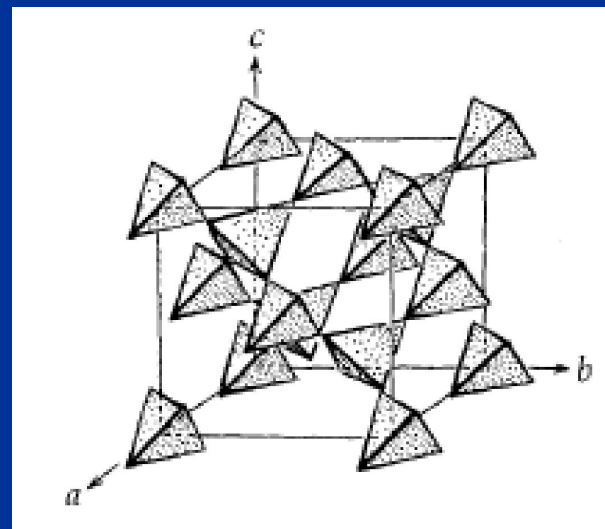
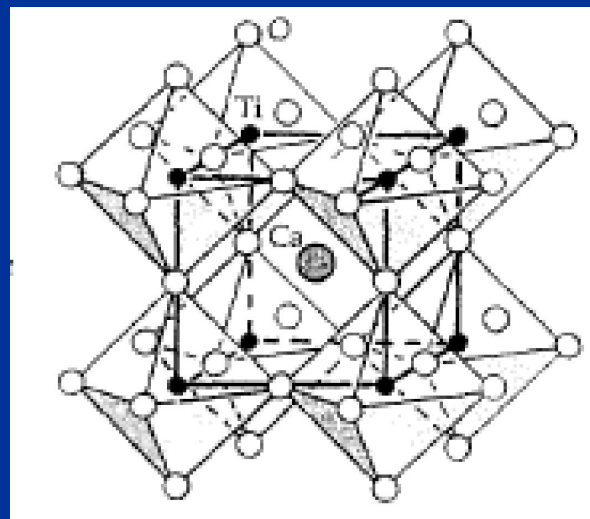
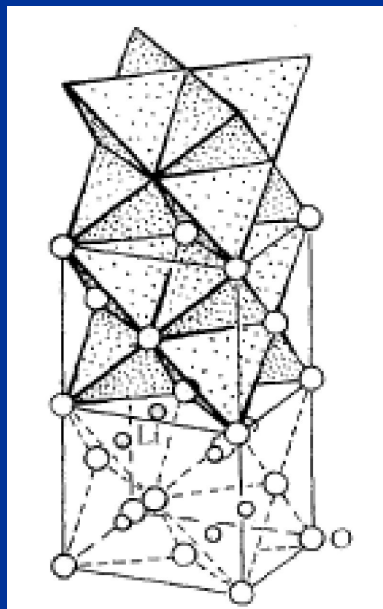
Колонка октаэдров, скрепленная связями металл-металл через общие грани

Структура флюорита CaF_2

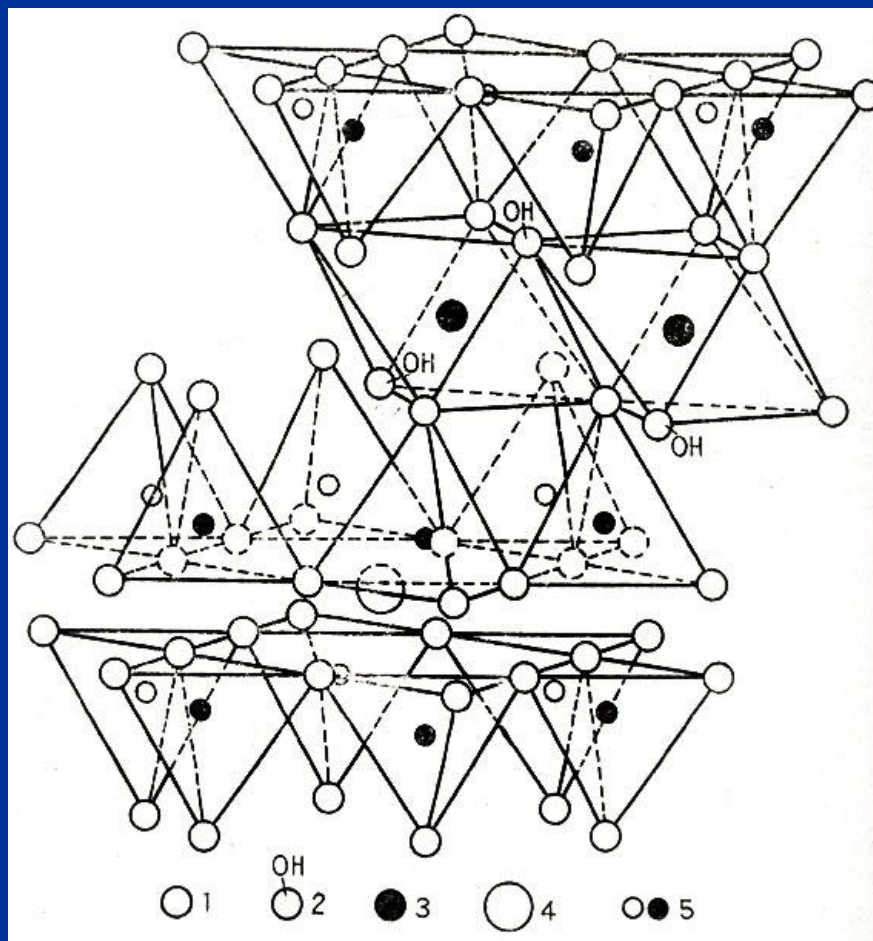


а - общий вид - выделены координационные многогранники для Ca и F ;
б - проекция структуры;
в - структура флюорита как кладка кубов

Примеры структур в полиэдрах

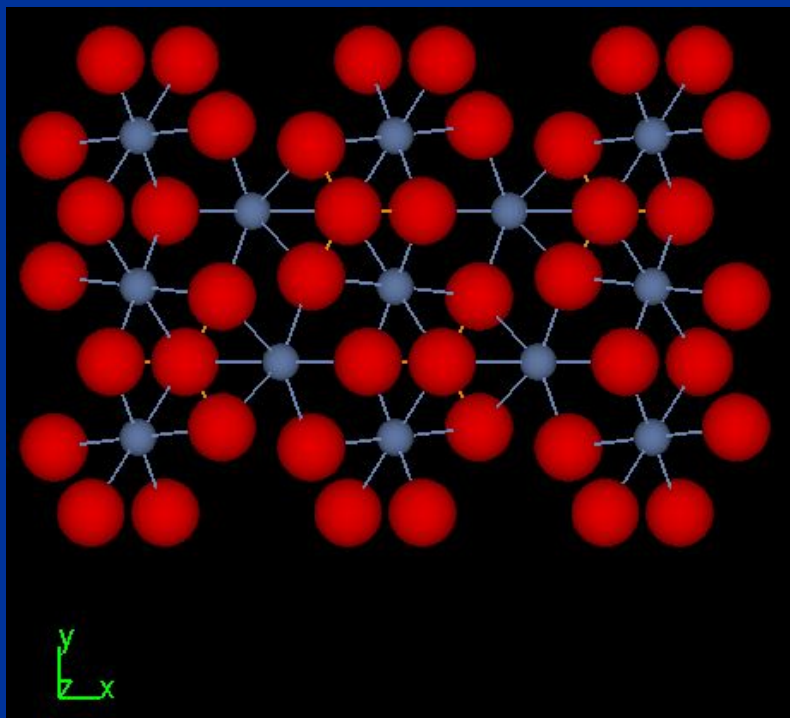


Структура мусковита в полиэдрах



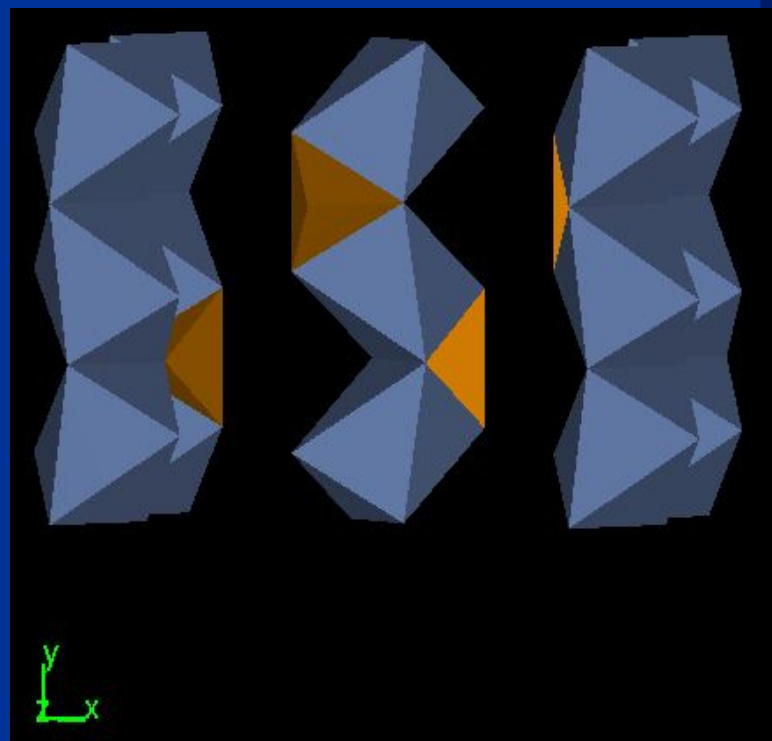
1 - кислород; 2 - гидроксил; 3 - алюминий;
4 - калий; 5 - кремний (на 1/4 замещен алюминием)

Различные способы представления структуры форстерита Mg_2SiO_4 (МИНКРИСТ, проекция $\perp$ оси z)

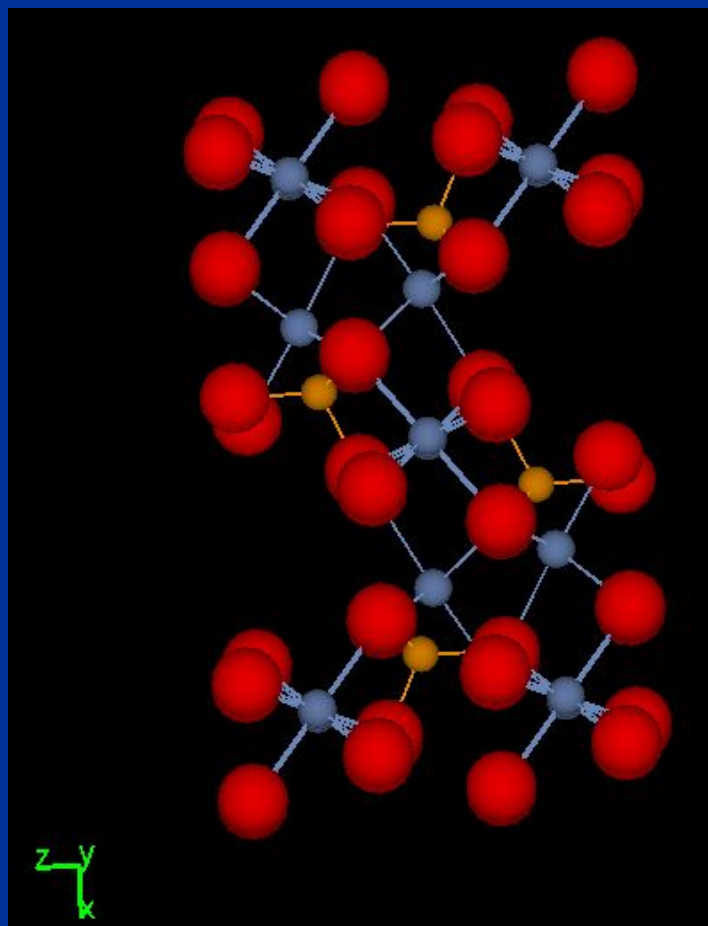


Шаростержневая
структура

Модель в полиэдрах:
 SiO_4 -тетраэдры,
 MgO_6 – октаэдры

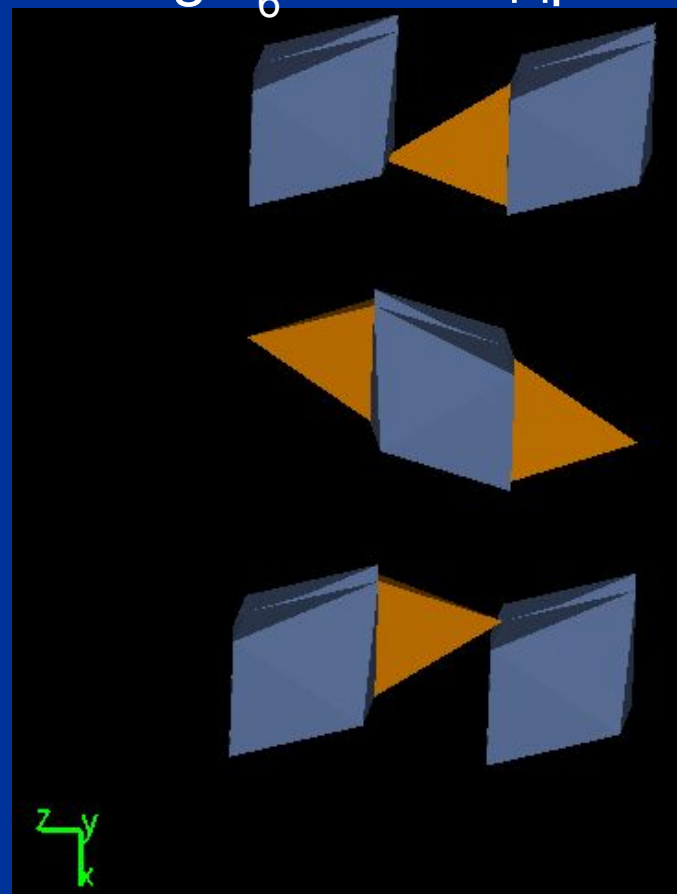


Различные способы представления структуры форстерита Mg_2SiO_4 (МИНКРИСТ, проекция $\perp$ оси y)

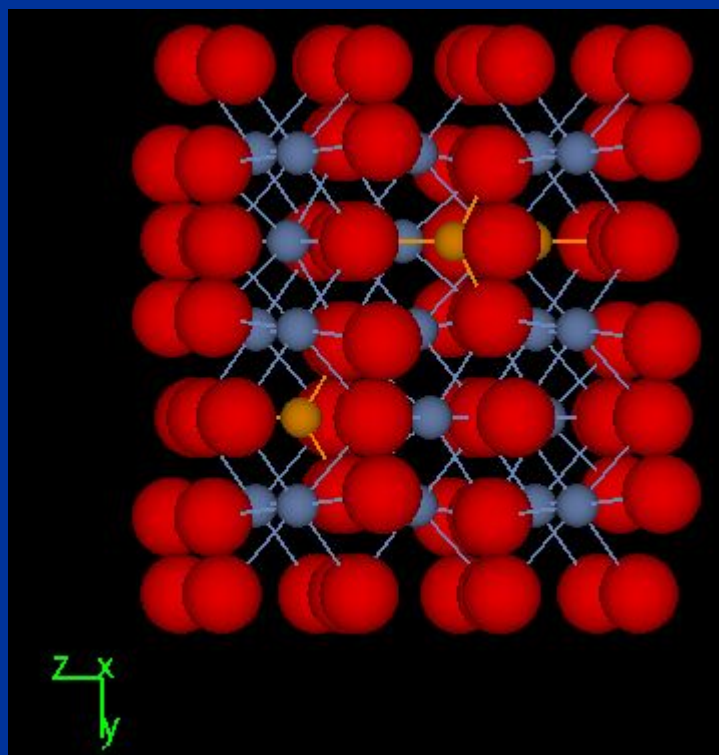


Шаростержневая
структура

Модель в полиэдрах:
 SiO_4 -тетраэдры,
 MgO_6 – октаэдры

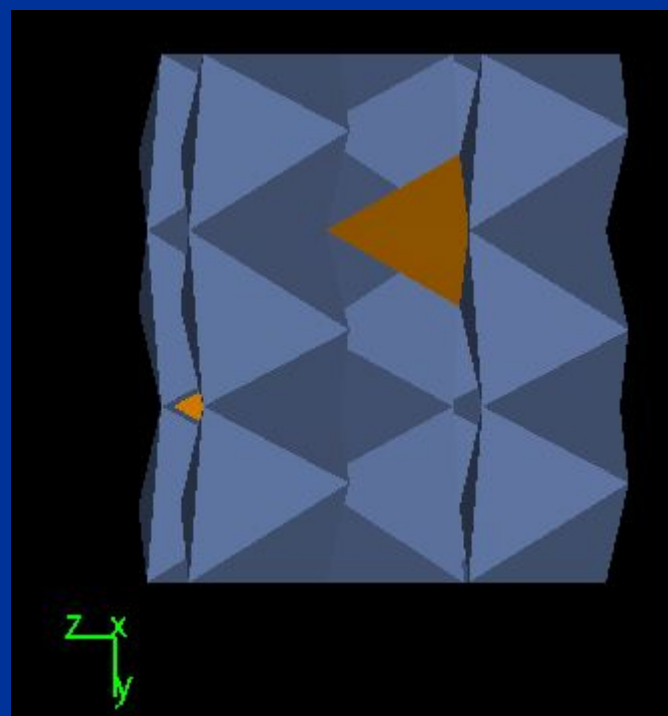


Различные способы представления структуры форстерита Mg_2SiO_4 (МИНКРИСТ, проекция $\perp$ оси x)

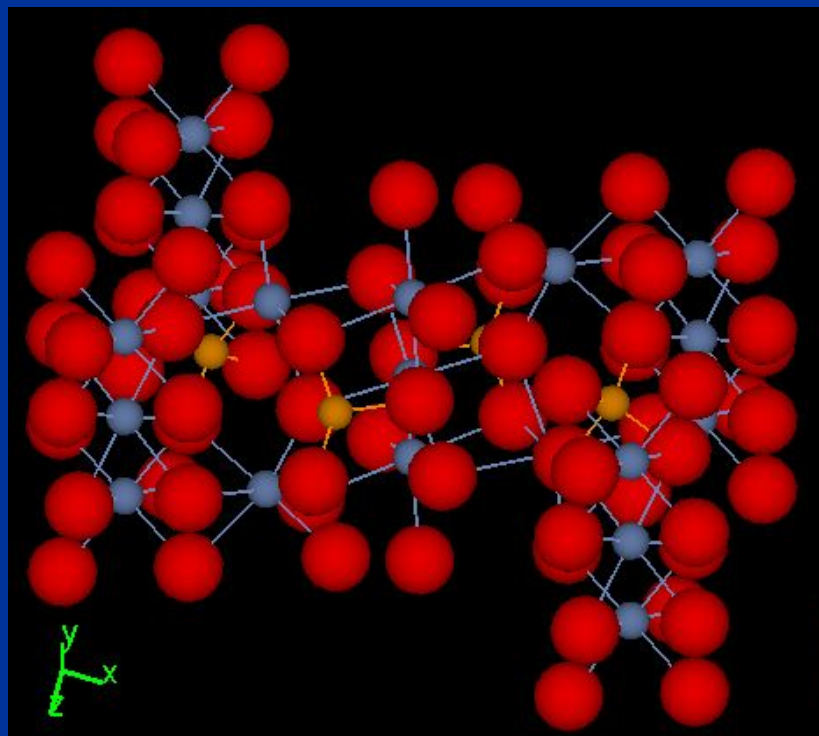


Шаростержневая
структура

Модель в полиэдрах:
 SiO_4 -тетраэдры,
 MgO_6 – октаэдры

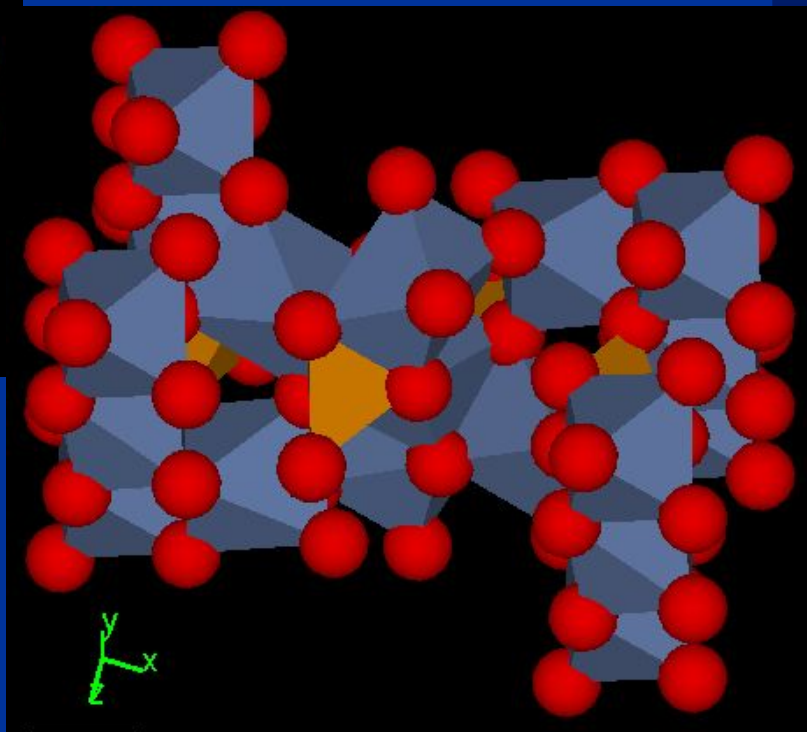


Различные способы представления структуры форстерита Mg_2SiO_4 (МИНКРИСТ)

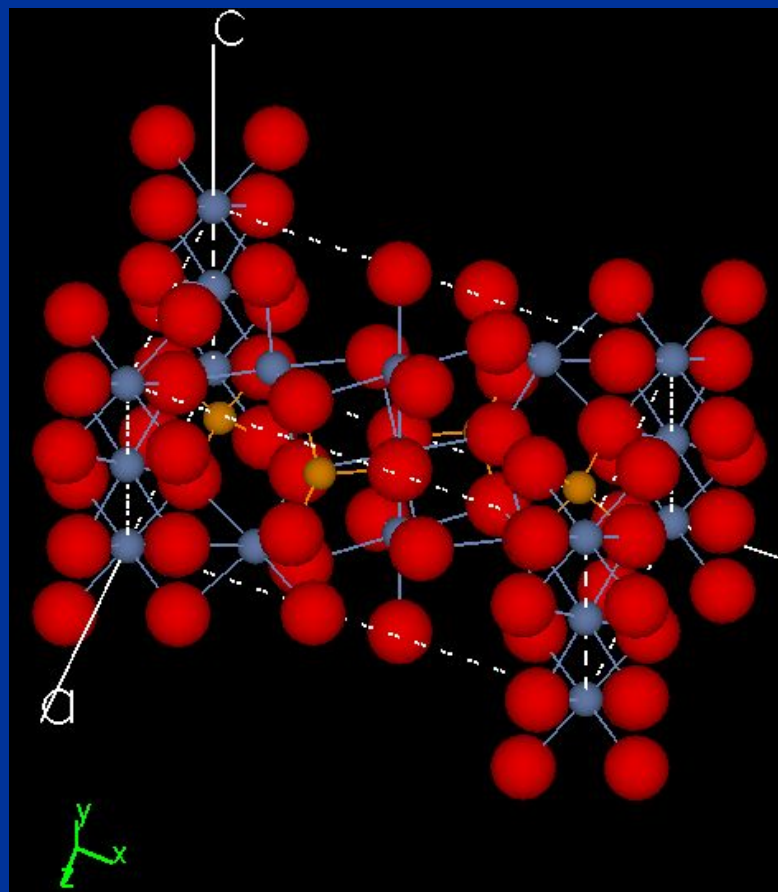


Шаростержневая
структура

Модель в полиэдрах:
 SiO_4 -тетраэдры,
 MgO_6 – октаэдры



Различные способы представления структуры форстерита Mg_2SiO_4 (МИНКРИСТ, с выделением ячейки)



Шаростержневая
структура

Модель в полиэдрах:
 SiO_4 -тетраэдры,
 MgO_6 – октаэдры

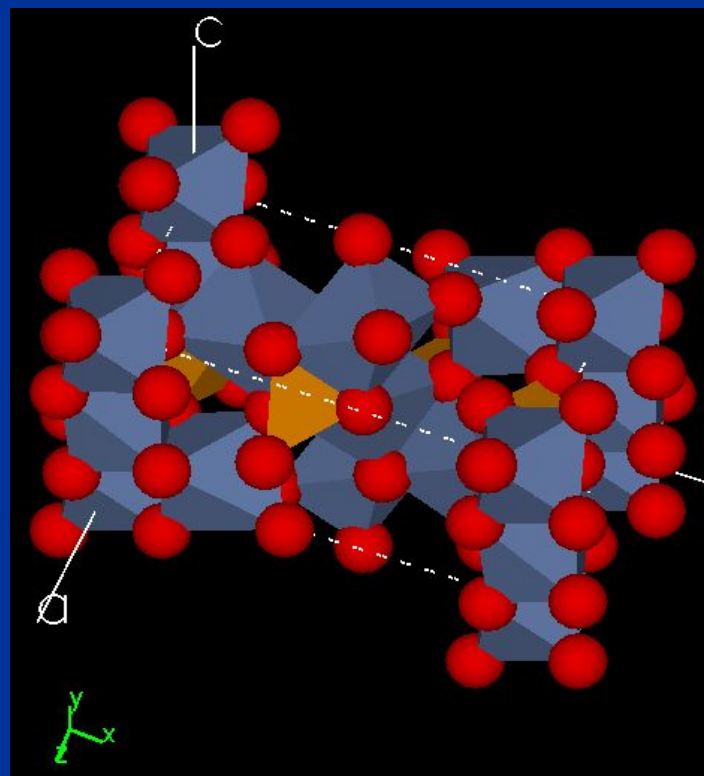
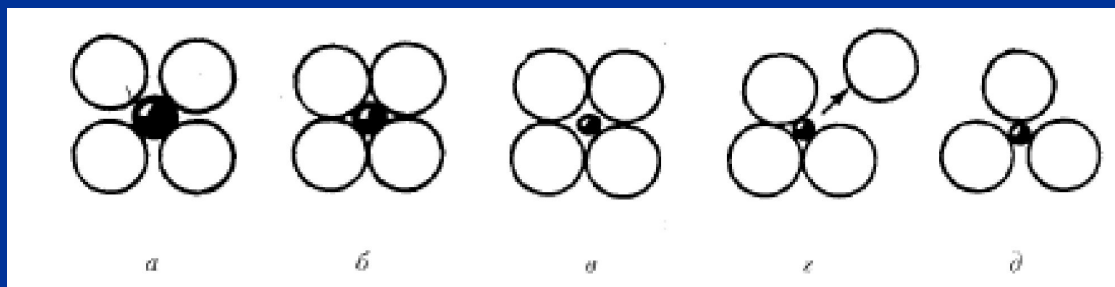


Схема перестройки структуры с изменением координационного числа катионов в зависимости от его радиуса



Предельные (минимальные) отношения радиусов ионов для различных координационных чисел (таблица Магнуса–Гольдшмидта)

Координационное число (КЧ)	Координационный полиэдр (КП)	Отношение $r_K : r_A$
2	гантель	0
3	треугольник	0,15
4	тетраэдр	0,22
6	октаэдр	0,41
8	куб	0,73
12	кубооктаэдр	1 и выше

Полиэдрические модели различных модификаций CdI_2

