

Запорізький національний університет



Кристалохімія. Лекція 7.



Запоріжжя 2024.

Тема 3. Періодичний закон та властивості атомів.
Використання кристалохімічних даних для вивчення складу кристалів.

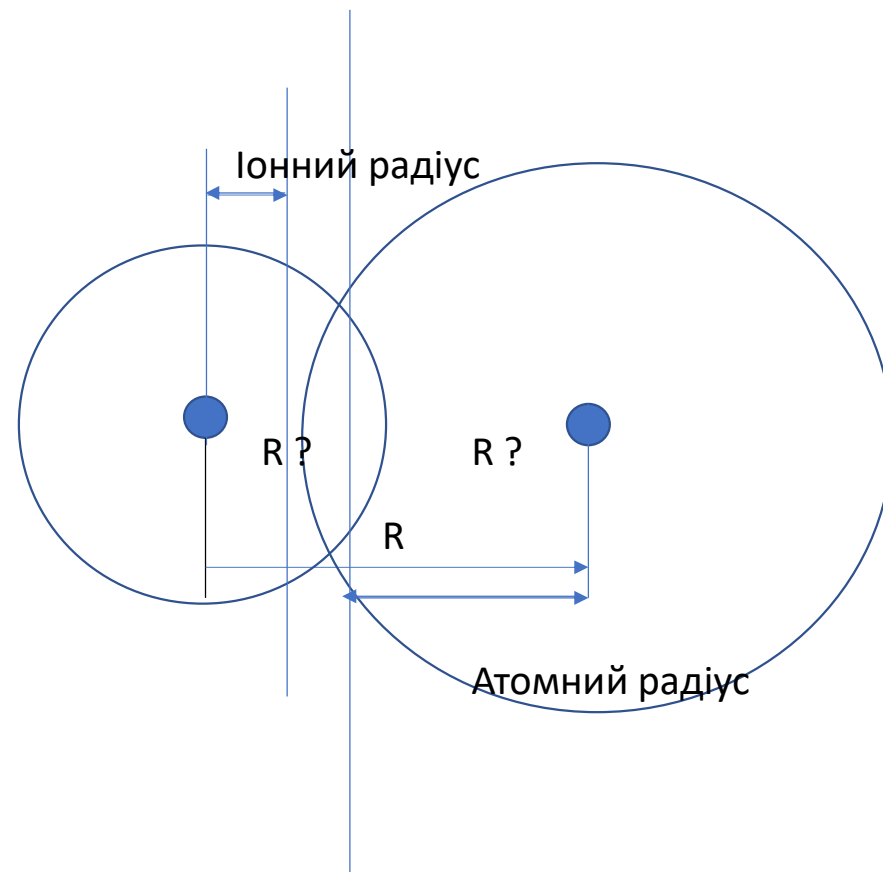
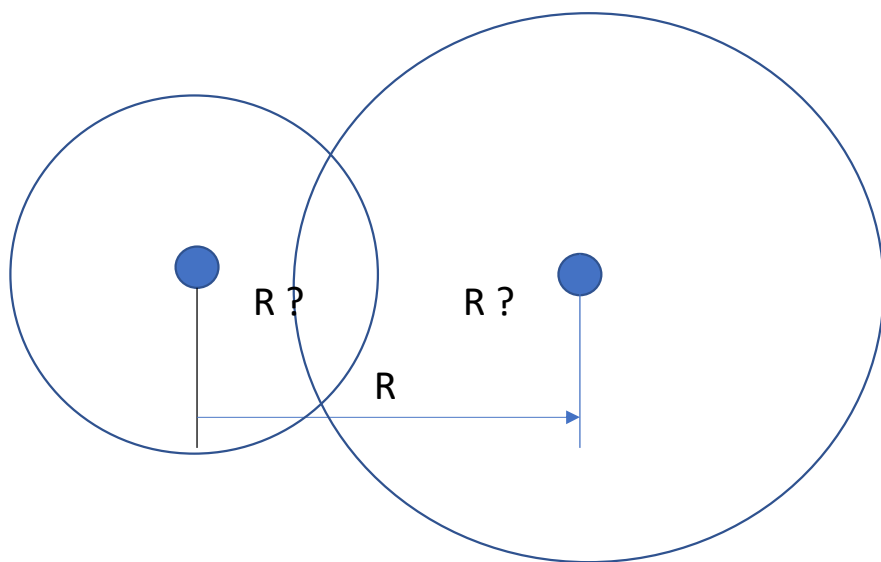
- Закон кратних відношень Гаюі.
- Поняття одиничної грані.
- Вибір одиничної грані для кристалів різної сингонії.
- Індокси граней (hkl) та групові символи простих форм $\{hkl\}$.
- Теорема косинусів.

Ефективні атомні радіуси.

Полуэмпирические атомные радиусы Слейтера

№	Элемент	$r_a, \text{Å}$	№	Элемент	$r_a, \text{Å}$	№	Элемент	$r_a, \text{Å}$
1	2	3	1	2	3	1	2	3
1	H	0,25	33	As	1,15	64	Gd	1,80
3	Li	1,45	34	Se	1,15	65	Tb	1,75
4	Be	1,05	35	Br	1,15	66	Dy	1,75
5	B	0,85	37	Rb	2,35	67	Ho	1,75
6	C	0,70	38	Sr	2,00	68	Er	1,75
7	N	0,65	39	Y	1,80	69	Tu	1,75
8	O	0,60	40	Zr	1,55	70	Yb	1,75
9	F	0,50	41	Nb	1,45	71	Lu	1,75
11	Na	1,80	42	Mo	1,45	72	Hf	1,55
12	Mg	1,50	43	Tc	1,35	73	Ta	1,45
13	Al	1,25	44	Ru	1,30	74	W	1,35
14	Si	1,10	45	Rh	1,35	75	Re	1,35
15	P	1,00	46	Pd	1,40	76	Os	1,30
16	S	1,00	47	Ag	1,60	77	Ir	1,35
17	Cl	1,00	48	Cd	1,55	78	Pt	1,35
19	K	2,20	49	In	1,55	79	Au	1,35
20	Ca	1,80	50	Sn	1,45	80	Hg	1,50
1	Sc	1,60	51	Sb	1,45	81	Tl	1,90
2	Ti	1,40	52	Te	1,40	82	Pb	1,80
3	V	1,35	53	I	1,40	83	Bi	1,60
24	Cr	1,40	55	Cs	2,60	84	Po	1,90
25	Mn	1,40	56	Ba	2,15	88	Ra	2,15
26	Fe	1,40	57	La	1,95	89	As	1,95
27	Co	1,35	58	Ce	1,85	90	Th	1,80
28	Ni	1,35	59	Pr	1,85	91	Pa	1,80
29	Cu	1,35	60	Nd	1,85	92	U	1,75
30	Zn	1,35	61	Pm	1,85	93	Np	1,75
31	Ga	1,30	62	Sm	1,85	94	Pu	1,75
32	Ge	1,25	63	Eu	1,85	95	Am	1,75

Іонні радіуси.



Ван-дер-Ваальсові радіуси.

$$R_{AB} = 2 \sqrt{r_A r_B}$$

Ван-дер-ваальсовы радиусы атомов (Å)

Атом	Полинг, 1939	Зефи́ров, Зо́ркий, 1964—1980	Атом	Полинг, 1939
H	1,2	1,15	As	2,0
He	1,50	—	Se	2,0
C	—	1,71	Br	1,95
N	1,5	1,50	Kr	2,02
O	1,40	1,29	Sb	2,2
F	1,35	1,40	Te	2,2
Ne	1,57	—	I	2,15
P	1,9	—	Xe	2,19
S	1,85	1,84		
Cl	1,80	1,90		
Ar	1,88	—		

Розподіл електронної щільності.

Сучасні методи рентгеноструктурного дослідження дозволяють вивчати розсіювання рентгенівського випроміннення електронами та вивчати розподіл електронної щільності у кристалі.

Структурні одиниці кристалу, мотив структури.

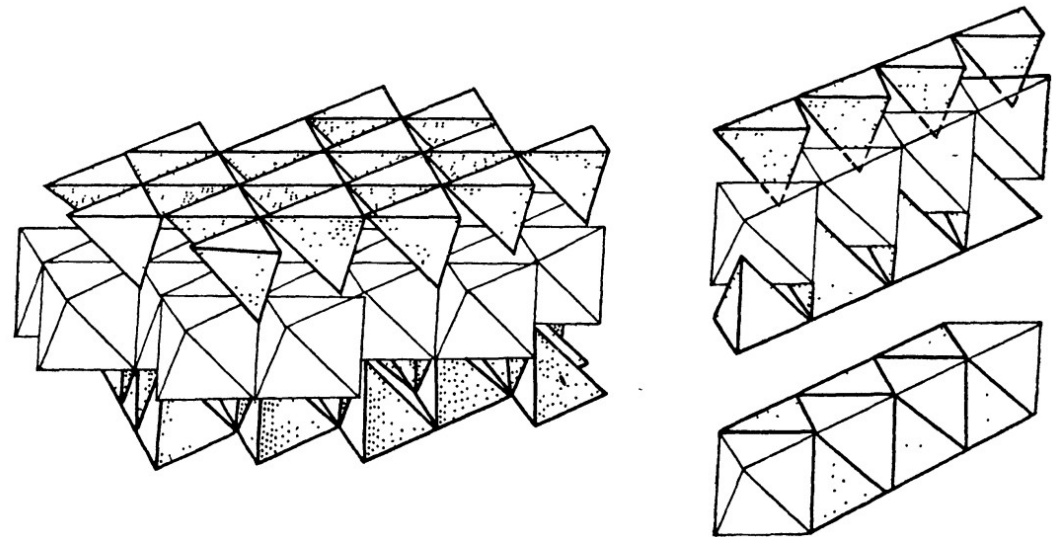
Кристал має *ізодесмічну (гомодесмічну)* структуру, якщо усі атоми у ньому зв'язані однаковим або близьким за типом зв'язками, а їх КЧ однакові або близькі.

Анізодесмічні або *гетеродесмічні* структури з'являються у кристалах, що мають уособлені групи атомів, що мають різні типи зв'язку.

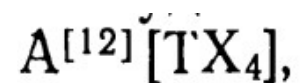
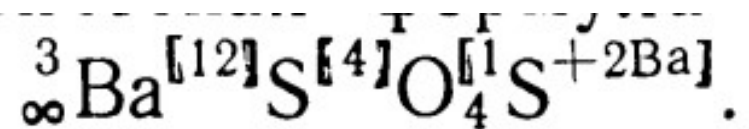
Поліедричне зображення кристалічних структур.

Кристал має *ізодесмічну (гомодесмічну)* структуру, якщо усі атоми у ньому зв'язані однаковим або близьким за типом зв'язками, а їх КЧ однакові або близькі.

Анізодесмічні або *гетеродесмічні* структури з'являються у кристалах, що мають уособлені групи атомів, що мають різні типи зв'язку.

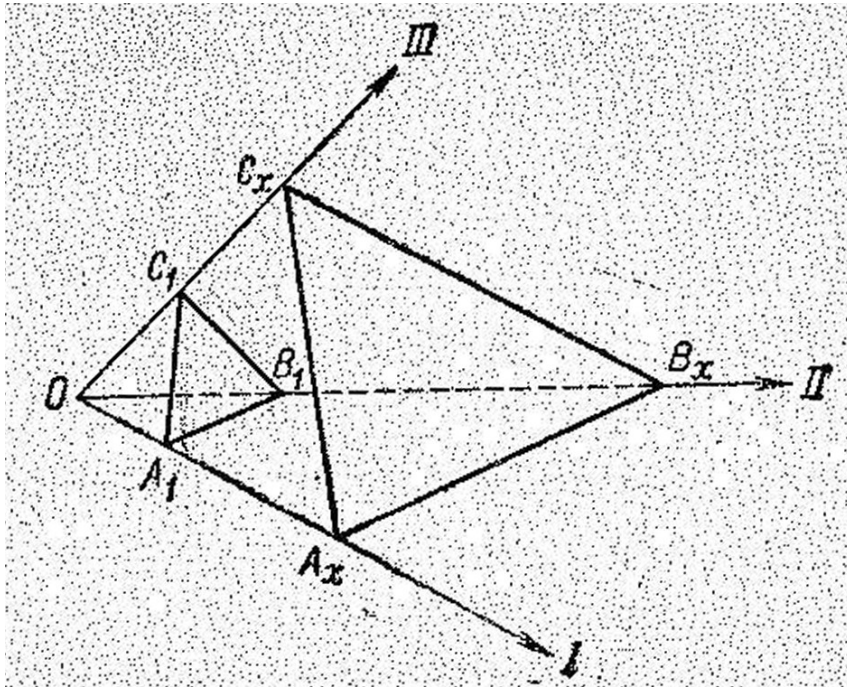


Кристалохімічні формули.



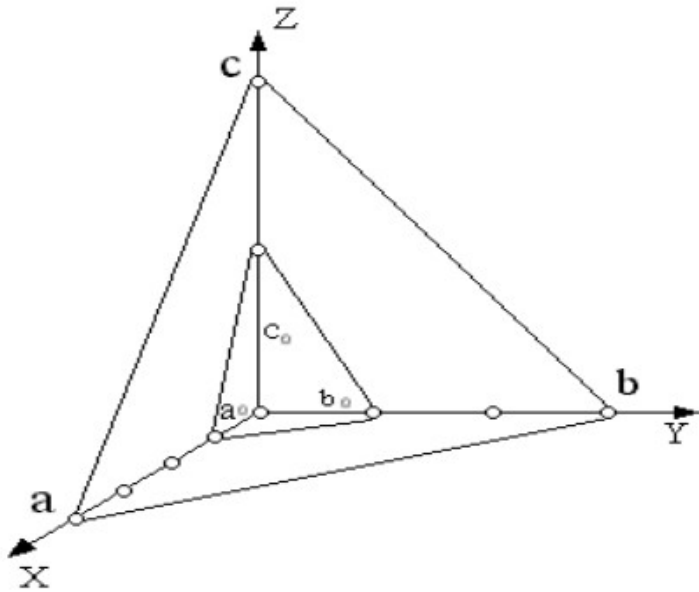
A = Sr, Ba, Pb, K, Cs, NH₄; T = S, Cl, B, Mn; X = O, F.

Закон кратних відношень Гаюї



$$\frac{OA_x}{OA_1} : \frac{OB_x}{OB_1} : \frac{OC_x}{OC_1} = p : q : r$$

Поняття одиничної грані.



$$a_0 = b_0 = c_0.$$

Для кубічних кристалів вищої сингонії.

$$a_0 = b_0 \neq c_0.$$

Для кристалів середньої сингонії
(тригональної, тетрагональної,
гексагональної)

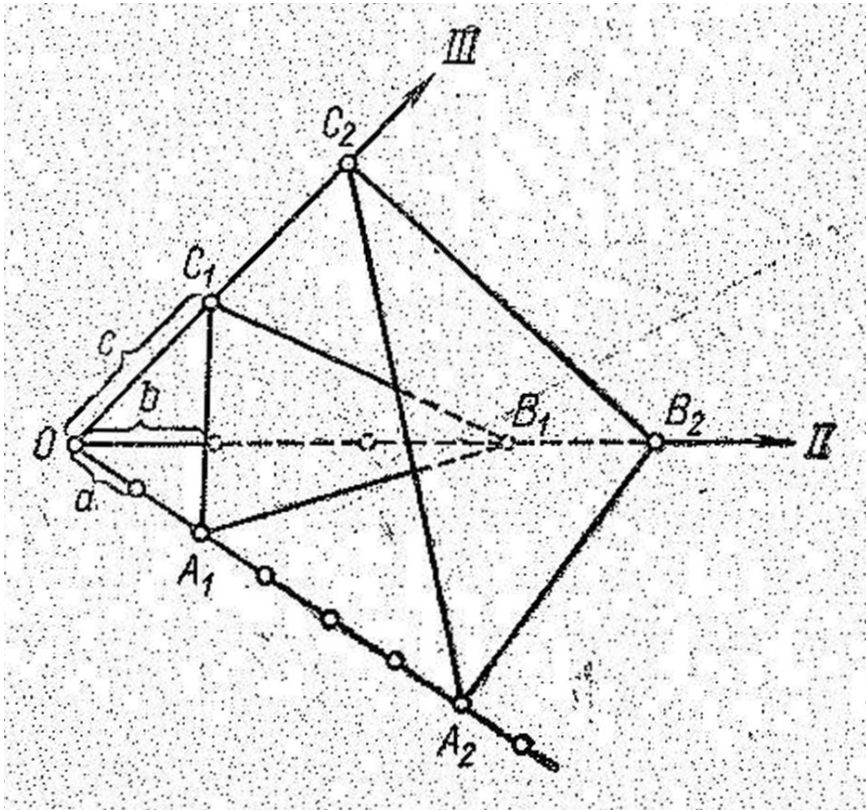
$$(a_0 \neq b_0 \neq c_0).$$

Для кристалів нижчої сингонії
(ромбічної, моноклінної та триклінної)

Індекси граней $\{hkl\}$ та групі символи простих форм $\{hkl\}$.

$$\frac{OA_1}{OA_x} : \frac{OB_1}{OB_x} : \frac{OC_1}{OC_x} = h : k : l$$

$$\frac{OA_1}{OA_2} : \frac{OB_1}{OB_2} : \frac{OC_1}{OC_2} = \frac{2}{6} : \frac{3}{4} : \frac{1}{2} = 4 : 9 : 6$$



$$a=1, \quad b=\infty, \quad c=\infty.$$

$$h=1/a=1/1=1; \quad k=1/b=1/\infty=0; \quad l=1/c=1/\infty=0. \quad (100).$$

$$(100) \quad (\bar{1}00), (010), (0\bar{1}0), (001) \text{ и } (00\bar{1})$$