

Атомный и ионный  
радиусы. Принципы  
шаровых упаковок.

# Атомный и ионный радиусы

- Половину кратчайшего расстояния между атомами металла принимают за соответствующий атомный радиус.
- Ионный радиус - половина расстояния между двумя соответствующими анионами.

NaF	2,315 А	KF	2,673 А	NaF	2,315 А	NaCl	2,8199 А
NaCl	2,8199 А	KCl	3,1464 А	KF	2,673 А	KCl	3,1464 А
<hr/>		<hr/>		<hr/>		<hr/>	
Разность 0,505 А		Разность 0,473 А		Разность 0,358 А		Разность 0,3265 А	

MgO	2,1056 А	MnO	2,2224 А	Разность 0,12 А
MgS	2,6017 А	MnS	2,6118 А	} Анионы соприкасаются
MgSe	2,726 А	MnSe	2,724 А	

# Атомный и ионный радиусы

На рисунке:

Большие окружности –  
анионы

Маленькая окружность –  
катион

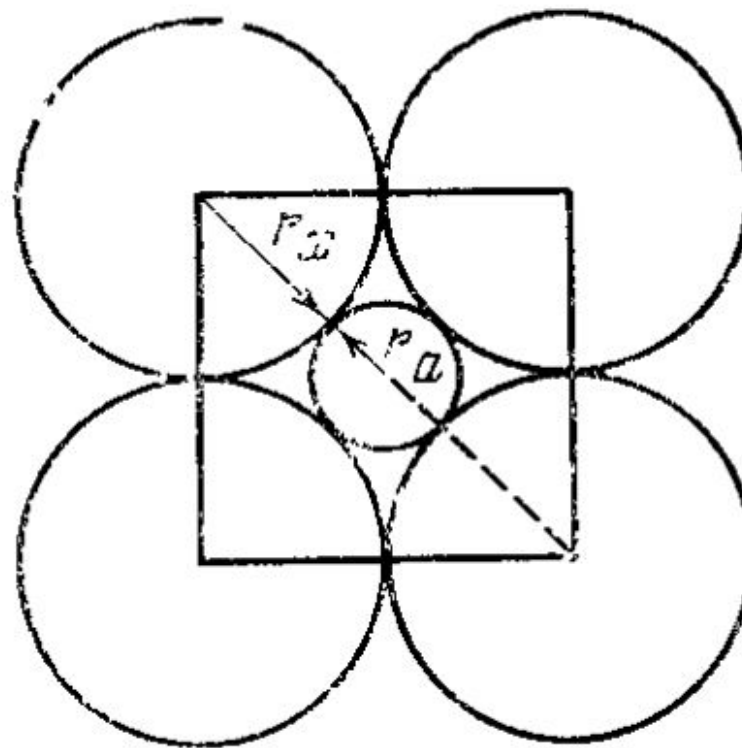


Рис. 178. Схема определения радиуса иона [1]

## Ионные радиусы

Периоды	Под									группы																			
	Ia	IIa	IIIa	IVa	Va	VIa	VIIa	VIIIa		VIIIa	Ib	IIb	IIIb	IVb	Vb	VIb	VIIb	VIIIb											
1																	H 1 <sup>-</sup> 1,36 1 <sup>+</sup> 0,00	He 0 1,22											
2	Li 1 <sup>+</sup> 0,68	Be 2 <sup>+</sup> 0,34														B 3 <sup>+</sup> (0,20)	C 4 <sup>+</sup> 0,2 4 <sup>+</sup> (0,15) 4 <sup>-</sup> (2,60)	N 3 <sup>+</sup> 5 <sup>+</sup> 0,15 3 <sup>-</sup> 1,48	O 2 <sup>-</sup> 1,36	F 1 <sup>-</sup> 1,33	Ne 0 1,60								
3	Na 1 <sup>+</sup> 0,98	Mg 2 <sup>+</sup> 0,74												Al 3 <sup>+</sup> 0,57	Si 4 <sup>+</sup> 0,39	P 3 <sup>+</sup> 5 <sup>+</sup> 0,35 3 <sup>-</sup> 1,86	S 2 <sup>-</sup> 1,82 6 <sup>+</sup> (0,29)	Cl 1 <sup>-</sup> 1,81 7 <sup>+</sup> (0,26)	Ar 0 1,92										
4	K 1 <sup>+</sup> 1,33	Ca 2 <sup>+</sup> 1,04	Sc 3 <sup>+</sup> 0,83	Ti 2 <sup>+</sup> 0,78 3 <sup>+</sup> 0,69 4 <sup>+</sup> 0,64	V 2 <sup>+</sup> 0,72 3 <sup>+</sup> 0,67 4 <sup>+</sup> 0,61 5 <sup>+</sup> 0,4	Cr 2 <sup>+</sup> 0,83 3 <sup>+</sup> 0,64 6 <sup>+</sup> 0,35	Mn 2 <sup>+</sup> 0,91 3 <sup>+</sup> 0,70 4 <sup>+</sup> 0,52 7 <sup>+</sup> (0,46)	Fe 2 <sup>+</sup> 0,80 3 <sup>+</sup> 0,67	Co 2 <sup>+</sup> 0,78 3 <sup>+</sup> 0,64	Ni 2 <sup>+</sup> 0,74	Cu 1 <sup>+</sup> 0,98 2 <sup>+</sup> 0,80	Zn 2 <sup>+</sup> 0,83	Ga 3 <sup>+</sup> 0,62	Ge 2 <sup>+</sup> 0,65 4 <sup>+</sup> 0,44	As 3 <sup>+</sup> 0,69 5 <sup>+</sup> (0,47) 3 <sup>-</sup> 1,91	Se 2 <sup>-</sup> 1,93 4 <sup>+</sup> 0,69 6 <sup>+</sup> 0,35	Br 1 <sup>-</sup> 1,96 7 <sup>+</sup> (0,39)	Kr 0 1,98											
5	Rb 1 <sup>+</sup> 1,49	Sr 2 <sup>+</sup> 1,20	Y 3 <sup>+</sup> 0,97	Zr 4 <sup>+</sup> 0,82	Nb 4 <sup>+</sup> 0,67 5 <sup>+</sup> 0,66	Mo 4 <sup>+</sup> 0,68 6 <sup>+</sup> 0,65	Tc	Ru 4 <sup>+</sup> 0,62	Rh 3 <sup>+</sup> 0,75 4 <sup>+</sup> 0,65	Pd 4 <sup>+</sup> 0,64	Ag 1 <sup>+</sup> 1,13	Cd 2 <sup>+</sup> 0,99	In 1 <sup>+</sup> 1,30 3 <sup>+</sup> 0,92	Sn 2 <sup>+</sup> 1,02 4 <sup>+</sup> 0,67	Sb 3 <sup>+</sup> 0,90 5 <sup>+</sup> 0,62 3 <sup>-</sup> 2,08	Te 2 <sup>-</sup> 2,11 4 <sup>+</sup> 0,89 6 <sup>+</sup> (0,56)	J 1 <sup>-</sup> 2,20 7 <sup>+</sup> (0,50)	Xe 0 2,18											
6	Cs 1 <sup>+</sup> 1,65	Ba 2 <sup>+</sup> 1,38	La 3 <sup>+</sup> 1,04 4 <sup>+</sup> 0,90	Hf 4 <sup>+</sup> 0,82	Ta 5 <sup>+</sup> (0,66)	W 4 <sup>+</sup> 0,68 6 <sup>+</sup> 0,65	Re 6 <sup>+</sup> 0,52	Os 4 <sup>+</sup> 0,65	Ir 4 <sup>+</sup> 0,65	Pt 4 <sup>+</sup> 0,64	Au 1 <sup>+</sup> (1,37)	Hg 2 <sup>+</sup> 1,12	Tl 1 <sup>+</sup> 1,36 3 <sup>+</sup> 1,05	Pb 2 <sup>+</sup> 1,26 4 <sup>+</sup> 0,76	Bi 3 <sup>+</sup> 1,20 5 <sup>+</sup> (0,74) 3 <sup>-</sup> 2,13	Po	At	Rn											
7	Fr	Ra 2 <sup>+</sup> 1,44	Ac 3 <sup>+</sup> 1,11	Ku																									
Лантаноиды			Ce 3 <sup>+</sup> 1,02 4 <sup>+</sup> 0,88	Pr 3 <sup>+</sup> 1,00	Nd 3 <sup>+</sup> 0,99	Pm 3 <sup>+</sup> (0,98)	Sm 3 <sup>+</sup> 0,97	Eu 3 <sup>+</sup> 0,97										Gd 3 <sup>+</sup> 0,94	Tb 3 <sup>+</sup> 0,89	Dy 3 <sup>+</sup> 0,88	Ho 3 <sup>+</sup> 0,86	Er 3 <sup>+</sup> 0,85	Tm 3 <sup>+</sup> 0,85	Yb 3 <sup>+</sup> 0,81	Lu 3 <sup>+</sup> 0,80				
Актиноиды			Th 3 <sup>+</sup> 1,08 4 <sup>+</sup> 0,95	Pa 3 <sup>+</sup> 1,06 4 <sup>+</sup> 0,91	U 3 <sup>+</sup> 1,04 4 <sup>+</sup> 0,89	Np 3 <sup>+</sup> 1,02 4 <sup>+</sup> 0,88	Pu 3 <sup>+</sup> 1,01 4 <sup>+</sup> 0,86	Am 3 <sup>+</sup> 1,00 4 <sup>+</sup> 0,85														Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr

В скобках приведены значения вычисленных радиусов.  
Для благородных газов даны значения атомных радиусов.

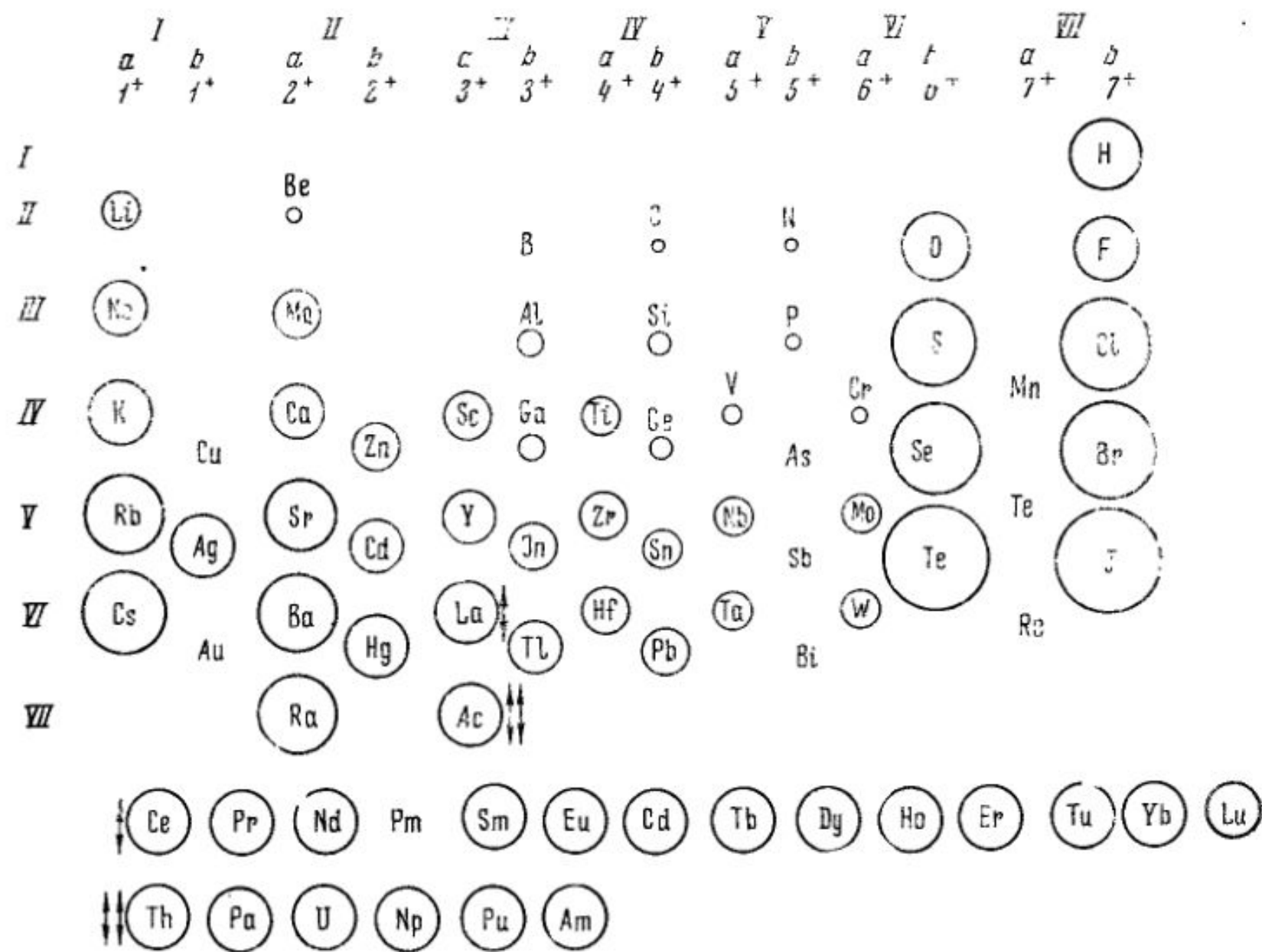


Рис. 179. Относительные величины ионных радиусов химических элементов

# Плотнейшие шаровые упаковки

Основные принципы:

- 1. Пусть форма всех атомов и ионов сферическая
- 2. Пусть весь объем кристалла или отдельных его структурных блоков заполнен плотно соприкасающимися атомами и ионами.

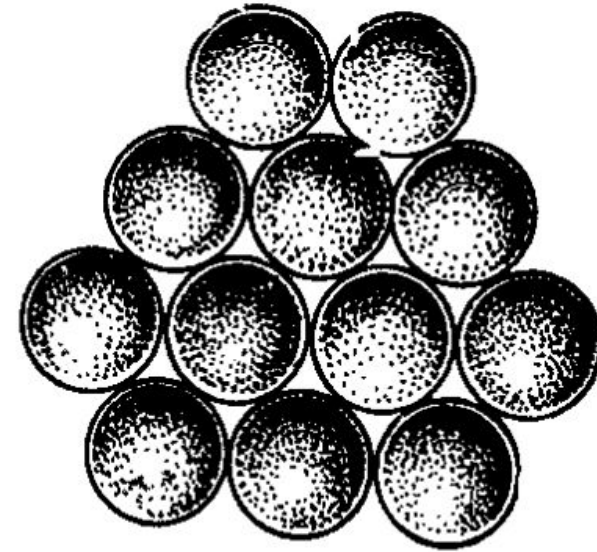
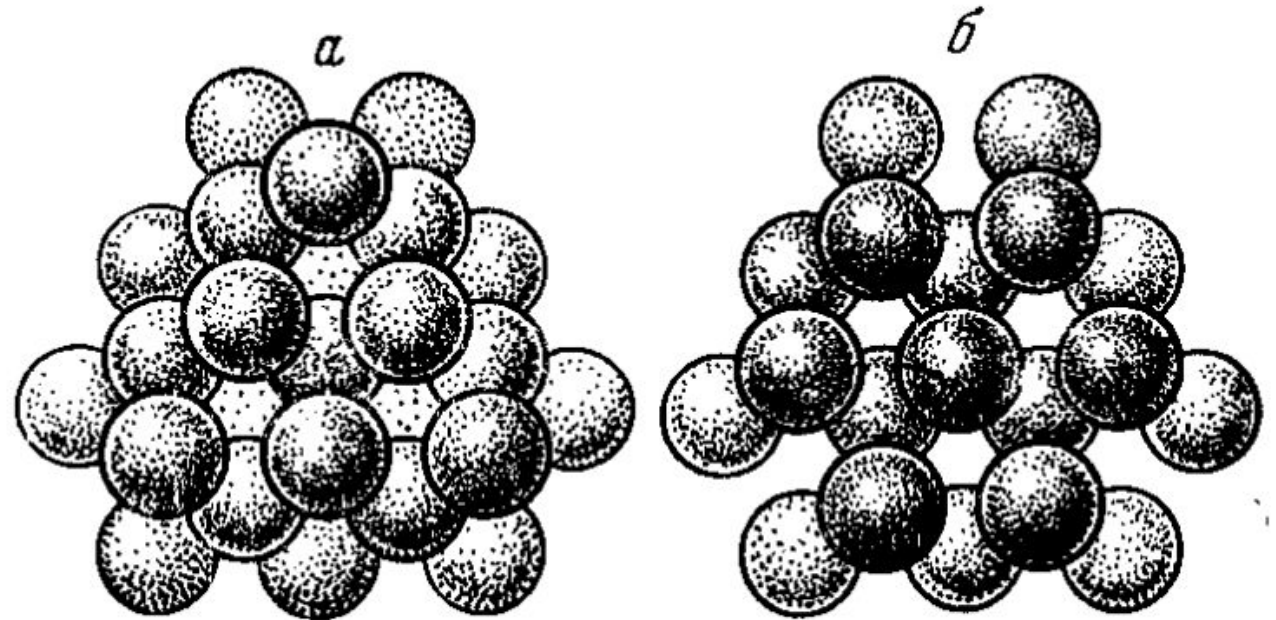


Рис. 192. Слой шаров, плотнейшим образом прилегающих друг к другу

# Гексагональная и кубическая ПШУ

Варианты наложения  
третьего слоя шаров:

1. Кубическая упаковка
2. Гексагональная упаковка



**Рис. 193.** Проекция двух основных плотнейших упаковок шаров

**а** — кубическая;

**б** — гексагональная

# Гексагональная и кубическая ПШУ

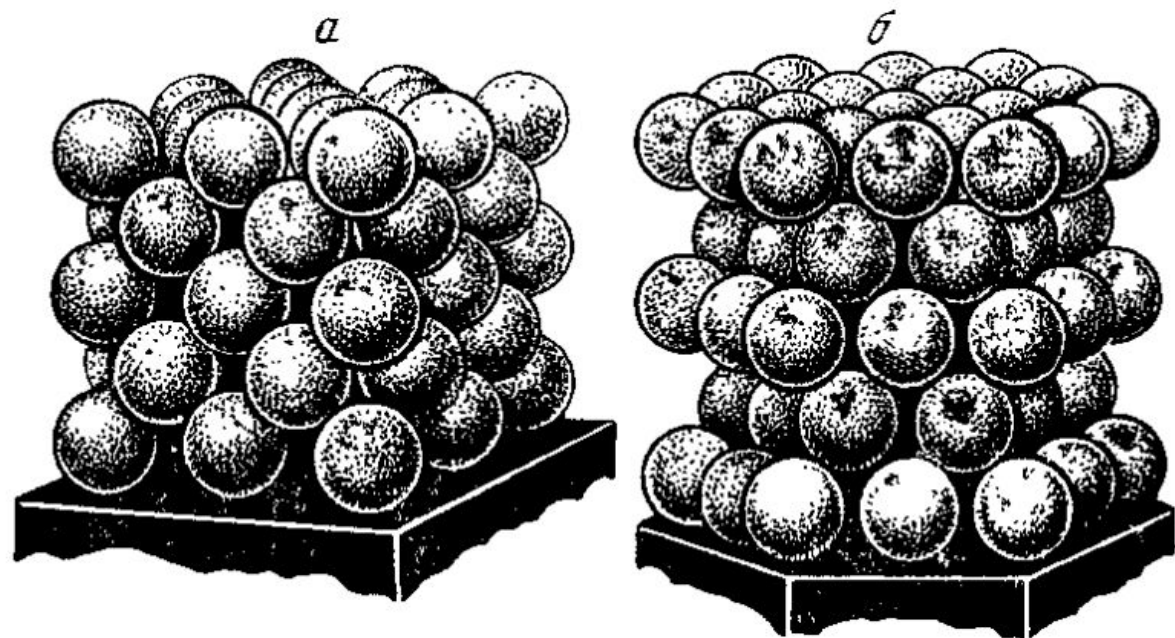


Рис. 194. Плотнейшие упаковки шаров по кубическому (а) и гексагональному (б) законам

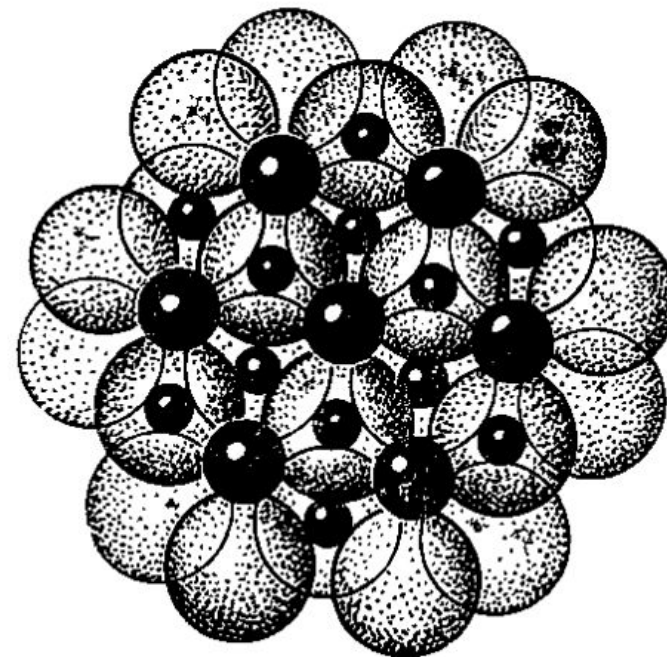


Рис. 195. Тетраэдрические и октаэдрические пустоты между шарами в плотнейших упаковках



# Способы обозначения ПЦМ

Обозначим разные слои  
разными буквами,  
повторяющиеся – одинаковыми:

- Гексагональная упаковка – ...  
AB AB AB ... - двуслойная
- Кубическая упаковка - ... ABC  
ABC ABC ... - трехслойная

$n = 2$  ... *ABABAB* ...  
                  *z z z z z z*

$n = 3$  ... *ABCABC* ...  
                  *к к к к к к*

$n = 4$  ... *ABACAB* ...  
                  *к z к z к z*

$n = 5$  ... *ABCABABC* ...  
                  *z к к z z к к*

$n = 6$  (1) ... *ABCACBABC* ...  
                  *z к к z к к z к к*

(2) ... *ABABACABA* ...  
                  *к z z z к z к z z*

# Список литературы:

1. Бокий Г.Б. – Кристаллохимия, 1971.
2. Урусов В.С. – Теоретическая кристаллохимия
3. Кребс Г. – Основы кристаллохимии неорганических соединений