

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
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

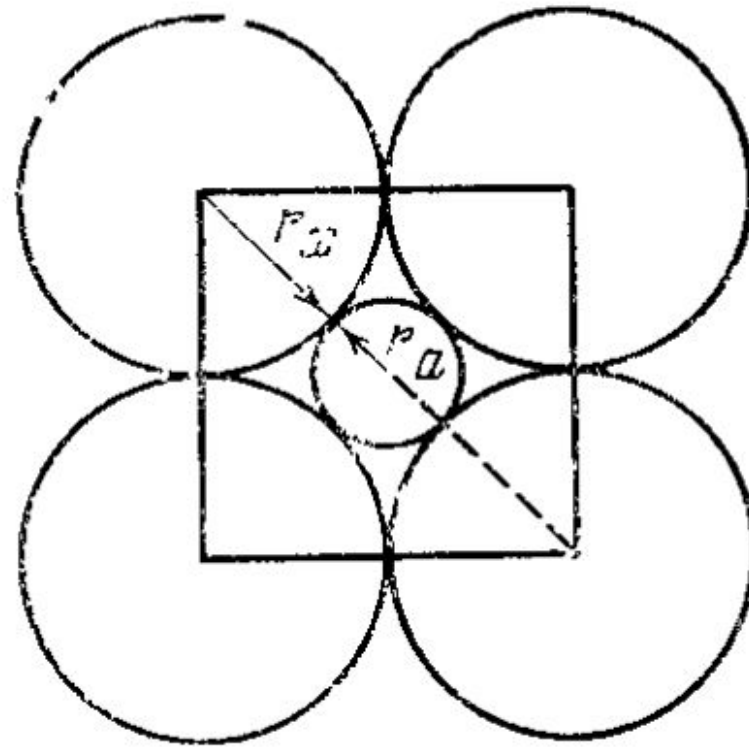


Рис. 178. Схема определения радиуса иона [1]

ТАБЛИЦА 11

Ионные радиусы

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

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

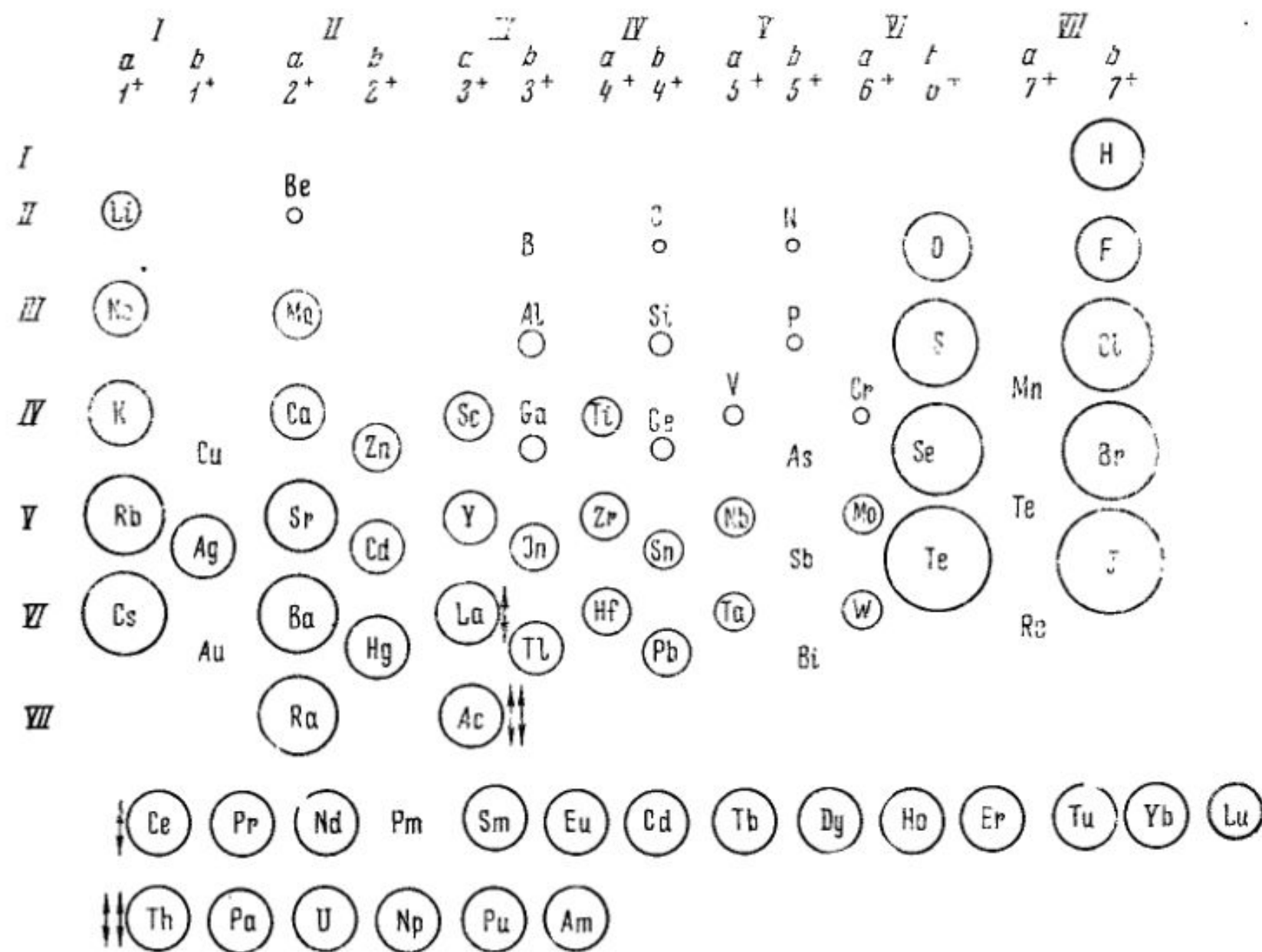


Рис. 179. Относительные величины ионных радиусов химических элементов

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.

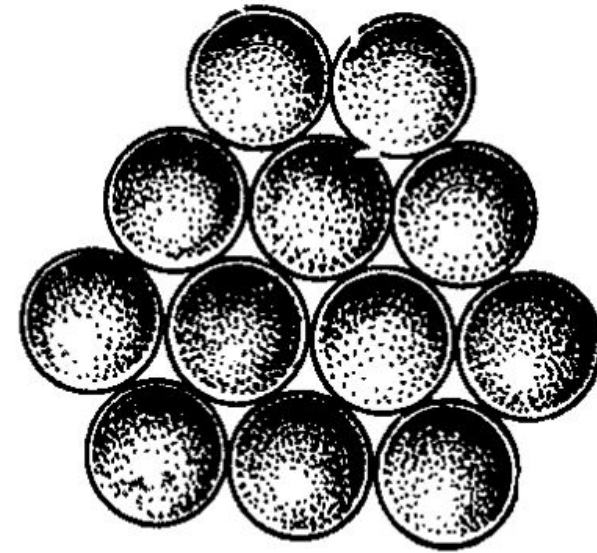


Рис. 192. Слой шаров, плотнейшим образом прилегающих друг к другу

Гексагональная и кубическая ПШУ

Варианты наложения
третьего слоя шаров:

1. Кубическая упаковка
2. Гексагональная упаковка

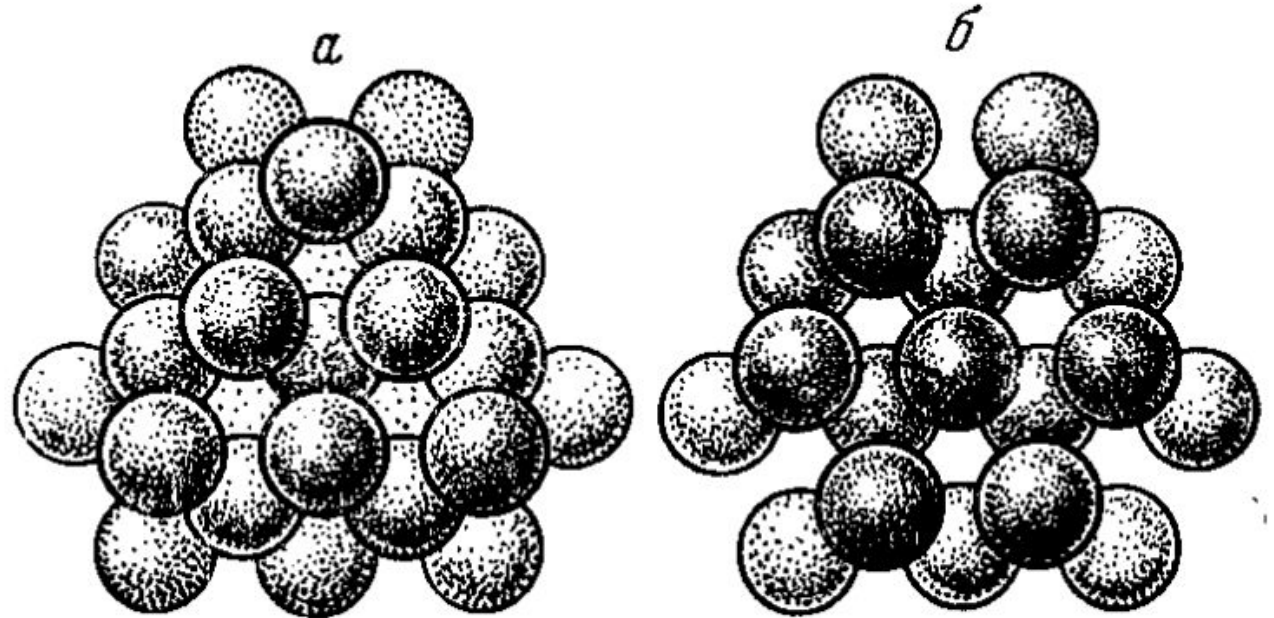


Рис. 193. Проекция двух основных плотнейших упаковок шаров

a — кубическая;

б — гексагональная

Гексагональная и кубическая ПШУ

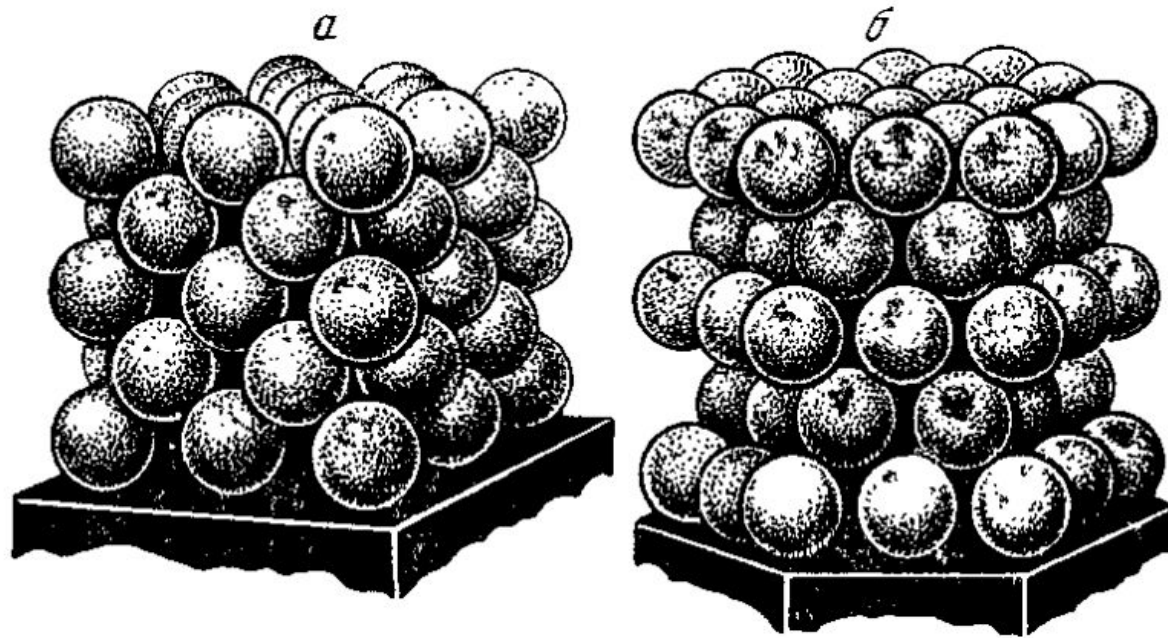


Рис. 194. Плотнейшие упаковки шаров по кубическому (а) и гексагональному (б) законам

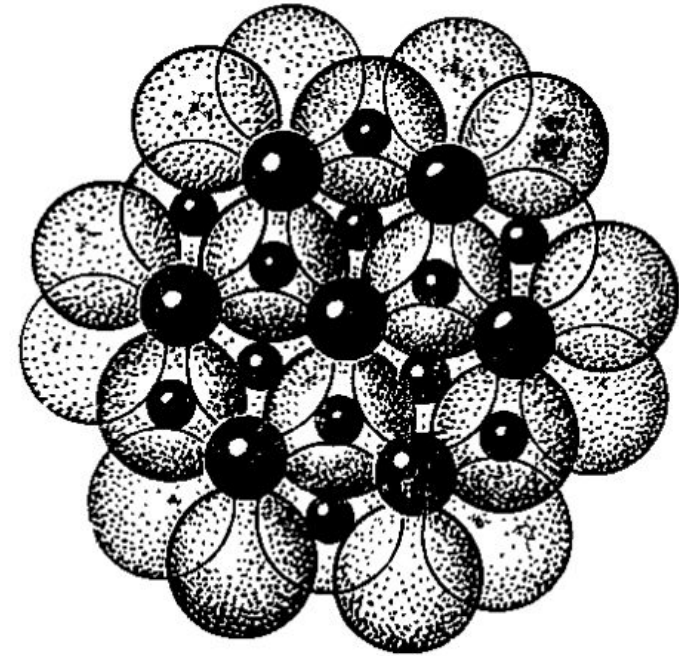


Рис. 195. Тетраэдрические и октаэдрические пустоты между шарами в плотнейших упаковках

Способы обозначения ПЦ^{IV}

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 ...
k k k k k k

$n = 4$... ABACAB ...
k z k z k z

$n = 5$... ABCABABC ...
z k k k z z k k

$n = 6$ (1) ... ABCACBABC ...
z k k z k k z k k

(2) ... ABABACABA ...
k z z z k z k z z

Список литературы:

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