

Московский Государственный Университет
имени М.В. Ломоносова

Геологический факультет
кафедра кристаллографии и кристаллохимии

Курсовая работа

**КОМПЛЕКСЫ КАТИОНОЦЕНТРИРОВАННЫХ И
АНИОНОЦЕНТРИРОВАННЫХ ТЕТРАЭДРОВ В СТРУКТУРАХ
МИНЕРАЛОВ**

Студентки 112 группы
Бородиной Анны Сергеевны

Научные руководители:
гл. н.с., д.г.-м.н. Расцветаева Р.К.
Аксенов С.М.

Москва

2012 г.

Содержание

Цель работы _____	2
Задачи работы _____	2
Общие сведения о традиционной кристаллохимии и краткая историческая справка о развитии кристаллохимии с анионоцентрированными тетраэдрами. _____	3
Закономерности строения анионоцентрированных $[XA_4]$ -тетраэдров и их комплексов. _____	7
• Какие анионы и почему образуют анионоцентрированные тетраэдры? _____	7
• Какие катионы участвуют в образовании тетраэдров (XA_4)? _____	7
• Когда описание структуры в тетраэдрах (XA_4) является наиболее кристаллохимически эффективным? _____	10
Сравнение двух подходов – традиционного и альтернативного. _____	11
• Островные комплексы. _____	11
• Цепочечные комплексы _____	14
• Слоистые комплексы _____	16
Вывод _____	18
Список литературы _____	19

← Отформатировано: По
левому краю

ЦЕЛЬ РАБОТЫ

Цель данной работы изучить подход описания минеральных структур с помощью анионоцентрированных тетраэдров, описанный в книге С.В. Кривовичева и С.К. Филатова «Кристаллохимия минералов и неорганических соединений с комплексами анионоцентрированных тетраэдров», получить иллюстрации, убедительно демонстрирующие целесообразность такого подхода .

Отформатировано: По
левому краю

Отформатировано: Цвет
шрифта: Авто

Отформатировано: не
выделение цветом

ЗАДАЧИ РАБОТЫ

Для достижения цели работы были выполнены следующие задачи:

- 1) Ознакомиться с теоретической основой кристаллохимии комплексов с анионоцентрированными тетраэдрами. Для этого подробно изучить исследования, приведенные в работе С.В. Кривовичева и С.К. Филатова.
- 2) Получить практические навыки работы в программе визуализации кристаллических структур Diamond 2.
- 3) Построить при помощи Diamond 2 парные схемы строения минеральных соединений с точки зрения катионо- и анионо-центрированных полиэдров, наиболее наглядно демонстрирующие возможности каждого метода.
- 4) Выполнить сравнительный анализ и сделать выводы об эффективности их применения

Общие сведения о традиционной кристаллохимии и краткая историческая справка о развитии кристаллохимии с анионоцентрированными тетраэдрами.

Кристаллохимия — наука о кристаллических структурах и их связи с природой вещества. Кристаллохимия изучает пространственное расположение и химическую связь атомов в кристаллах, а также зависимость физических и химических свойств кристаллических веществ от их строения. Являясь разделом химии, кристаллохимия также тесно связана с кристаллографией. Источником экспериментальных данных о кристаллических структурах являются, главным образом, рентгеноструктурный анализ, структурная электронография и нейтронография, с помощью которых определяют величины межатомных расстояний и углы между линиями химических связей (валентные углы). Кристаллохимия располагает обширной информацией о кристаллических структурах десятков тысяч химических веществ, включая такие сложные объекты, как белки и вирусы.

Основные задачи кристаллохимии: систематизация кристаллических структур и описание наблюдающихся в них типов химической связи; интерпретация кристаллических структур (выяснение причин, определяющих строение того или иного кристаллического вещества) и их предсказание; изучение связи физических и химических свойств кристаллов с их структурой и характером химической связи.

Большой вклад в науку о кристаллических структурах внесли Лайнус Карл Поллинг, советские ученые Николай Васильевич Белов, Вадим Сергеевич Урусов, Юрий Тимофеевич Стручков и многие другие.

Отформатировано: Шрифт:
(по умолчанию) Arial

Отформатировано: Шрифт:
(по умолчанию) Arial

Лайнус Карл Поллинг выдающийся химик и кристаллохимик начала двадцатого века. В своих работах он вывел несколько главных правил выделения плотнейших упаковок в кристаллических структурах. Эти правила были названы в его честь.

Правила Полинга просты и логичны, они обобщают закономерности, которые наблюдаются в большинстве известных кристаллических структур, и поэтому широко применяются при изучении кристаллов.

Первое правило гласит, что в плотнейших упаковках крупные (если отношение радиуса катиона к аниону больше 0,414) катионы располагаются в октаэдрических пустотах, меньшие катионы занимают тетраэдрические позиции (отношение радиусов от 0,414 до 0,215), и мелкие (меньше 0,215) треугольные.

Второе правило Полинга или правило электростатической валентности гласит, что валентность каждого аниона в устойчивой ионной структуре точно или приблизительно равна сумме валентных усилий этого аниона с соединенными с ним катионами. Валентным усилием названо отношение валентности катиона и его координационного числа.

Третье правило говорит о том, что наличие в координационной структуре общих ребер и особенно граней, для двух соседних полиэдров, делает эту структуру менее устойчивой.

Перейдем к рассмотрению традиционных методов описания минеральных соединений. Сложившимся подходом является описание структуры в терминах координационных полиэдров катионов. Базовым принципом этого метода является выделение в кристаллической структуре структурных полиэдров, основанных на плотнейшей упаковке из нескольких крупных анионов, в пространстве между которыми находится меньший по размеру катион. Соединяя центры анионов прямыми линиями, Полинг добился выделения двух типов геометрических полиэдров: тетраэдра и октаэдра. В дальнейшем этот список был расширен Н.В. Беловым. Им были выделены и другие возможные полиэдры, такие как: кубоктаэдр, тригональная призма, гексагональная пирамида и др.

Полиэдрический метод, главным образом, применяется для описания структурных типов, а не отдельных структур. Этот метод особенно хорошо подходит для описания сложных структурных типов, например силикатов.

Со временем появился и другой метод описания сложных структурных типов, подходящий для таких соединений как, например, оксосоли. Этот метод будем назвать альтернативным, он не отрицает традиционные подходы, а лишь дополняет их. Революционной идеей, лежащей в основе метода, было выделение аниоцентрированных тетраэдров.

Работу Г. Бергерхоффа и Ж. Пэслака "Кислород, как координационный центр в кристаллических структурах" 1968г. можно считать началом развития направления кристаллохимии, обратившегося к изучению аниоцентрированных структур, первыми из которых были описаны неорганические соединения с выделенными в них тетраэдрами типа (OA_4). Было замечено, что эти атомы кислорода связываются исключительно атомами металла с образованием комплексов $[O_mA_n]$, было предложено использовать нетрадиционное описание для структур оксосолей.

Авторами было так же отмечено, что тетраэдры могут существовать не только обособленно, но и объединяться по вершинам и ребрам. Так, например, в долерофаните были выделены слои из тетраэдров, а в кианите - цепочки.

В том же году, была издана статья П. Каро "Объединение тетраэдров OM_4 и катионная группа $(OM_4)_n^{n+}$ в оксидах и оксоосолях редкоземельных металлов" в которой был подробно рассмотрен вопрос объединения тетраэдров по ребру и был поставлен вопрос о возможности соединений тетраэдров через n ребер. В этой же статье были выделены слои $(MO)^+$ из тетраэдров (MO_4B) в структурах оксоосолей с общей формулой $(MO)_nX$, $X = Cl^-, Br^-, I^-, F^-, S^{2-}, Se^{2-}, (CO_3)$ и др. и указано, что предположительно металлами M могут быть ионы Th^{4+} , In^{3+} , Tl^{3+} и актиноиды.

До 1984 года, кроме этих статей, не было проведено никаких других исследований, рассматривающих соединения с точки зрения нетрадиционной кристаллохимии, но, описанные ранее способы, использовались для описания отдельных кристаллических структур. В этом году крупный катион $(O_4Pb_8)^{8+}$, состоящий из тетраэдров (OPb_4) , был выделен в структуре $TlPb_8O_4Br_9$ X. - Г. Келлером и был описан в статье, которая стала первой в серии работ, посвященных экспериментальным исследованиям оксогалогенидов свинца с оксоцентрированными тетраэдрами.

Решающими для развития кристаллохимии соединений с анионоцентрированными тетраэдрами стали работы немецкого химика Т. Шлейда с соавторами. В обобщающих трудах приведены полные списки комплексов анионоцентрированных тетраэдров (XA_4) ($X=O,N$; $A=REE$), найденных им в оксогалагенах и оксохалькогенах.

Изучение Большого Трещинного Толбачевского извержения на Камчатке привело к открытию более 20 новых минеральных видов, и больше чем половина этих минералов представляют собой соединения двухвалентной меди с "дополнительными" атомами кислорода. Важно заметить, что большинство из открытых минералов Толбачевского извержения являются оксоосолями. Кроме новых минералов на БТТИ присутствуют так же и открытые ранее минералы, в структуру которых входит "дополнительный" кислород: хлороксифит, эвхалорит, долерафонит., т.е. оксоосоли на Толбачике составляют лишь 1/6 долю минералов эксголяций. Дальнейшее изучение этих минералов позволило выделить их в отдельную группу благодаря тому, что их структуры основаны на постройках из оксоцентрированных

тетраэдров (OSi_4), и предложить механизм переноса меди вулканическими газами, который позже подтвердился открытиями, сделанными на вулканах Везувий (Италия) и Изалько (Сальвадор).

В последние годы были выделены и изучены структуры анионоцентрированных тетраэдров, которые успешно описывают природные и искусственные оксосоли ртути, а так же структуры стекол в системах $\text{PbO}\cdot\text{PbCl}_2$ и $\text{PbO}\cdot\text{PbF}_2$, изученные индийскими учеными.

Важно отметить, что использование оксоцентрированных тетраэдров, как строительных блоков для конструирования структур, подходит для описания не только природных соединений, но и синтетических. Появление все новых и новых работ, направленных на изучение и описание различных структур с точки зрения "оксоцентрированного подхода" свидетельствует о том, что эта область современной кристаллохимии будет становиться все более востребованной и быстро развивающейся.

← **Отформатировано:**
Междустр. интервал:
полуторный

Закономерности строения анионоцентрированных $[XA_4]$ -тетраэдров и их комплексов.

← Отформатировано: По центру

Перед тем, как приступить к непосредственному рассмотрению структур и их строению необходимо ответить на ряд вопросов, понимание которых необходимо при работе с конкретными структурами.

1) Какие анионы образуют анионоцентрированные тетраэдры?

Из публикаций о кристаллохимии анионоцентрированных соединений различных авторов, следует, что наиболее распространенными анионами, участвующими в образовании тетраэдров являются O^{2-} , N^{3-} и F^{3-} . По встречаемости в тетраэдрах (XA_4) их можно расположить в таком порядке: $O^{2-} > N^{3-} > F^{3-}$. Множество других изученных примеров показывает, что центральным анионом в тетраэдре может быть практически любой анион неметаллов (за исключением, разве что, C и P)

Основными причинами распространенности тетраэдров с анионами O^{2-} , N^{3-} и F^{3-} можно назвать их высокую электроотрицательность и жесткость связей, что обеспечивает высокую стабильность структуры.

2) Какие катионы участвуют в образовании тетраэдров (XA_4)?

Тетраэдр (XA_4) будет достаточно четко определен в структуре, если его все связи X-A в нем будут обладать одинаковой валентностью, а значит будут приблизительно равноценны. Об этом говорит теория валентности. В таком случае валентность связи будет равна отношению формальной валентности иона X к количеству анионов (то есть к 4).

«Существование тетраэдров (XA_4) возможно тогда, когда катион A может образовать связь A-X валентностью $Vx/4$ » откуда цитата

Подробно рассмотрим катионы, способные образовывать тетраэдры с наиболее распространенным анионом O, т.к. в дальнейшей работе будут рассмотрены только

оксоцентрированные тетраэдры. Многие катионы могут участвовать в образовании тетраэдров (XO_4), но подробно нами будут рассмотрены только некоторые из них.

Литий и щелочные металлы.

Образование катиона Li^+ происходит достаточно легко, так как литий имеет всего один валентный электрон. Тетраэдрическое соединение лития и кислорода преобладает, со средней валентной связью Li-O около 0,25 ве. Тетраэдры OLi^4 не встречаются в структурах металлоорганических и неорганических соединений.

Щелочные металлы (Na, Rb, K, Cs), как и литий имеют один валентный электрон и образуют катион A^+ . Для них характерны большие координационные числа, что обусловлено сравнительно большим размером катиона. И если натрий в октаэдре встречается достаточно часто, то для всех остальных щелочных металлов координационные числа много больше 6. Стоит заметить, что хотя Na не образует тетраэдров с O самостоятельно, он все же может участвовать в образовании тетраэдров как дополнительный катион. Например, в соединении $[\text{NaBi}_3\text{O}_2](\text{VO}_4)_2$ анион O^{2-} координирован тремя катионами Bi^{3+} и катионом Na^+ .

Бериллий и элементы II группы. Наиболее устойчивой формой в кислородных соединениях является катион Be^{2+} имеющий тетраэдрическую координацию и валентность связи Be – O равную 0,5, что позволяет ему строить как тетраэдры BeO_4 , так и OBe_4 , которые в свою очередь известны как центральные комплексы в металлоорганических соединениях. Хорошим примером среди минералов можно считать сведенборгит $\text{Na}(\text{Be}_4\text{O})(\text{SbO}_6)$. Mg чаще всего встречается в октаэдрической координатности, хотя валентность связи Mg^{2+} - O примерно равная 0,33 позволяет редкому образованию тетраэдров. Ca, Sr и Ba в свою очередь имеют высокие координационные числа поэтому образуют тетраэдры в исключительных случаях. Например, это возможно в присутствии крупных высокополимеризуемых (мягких) анионов галогенов. Так в соединении $(\text{A}_4\text{O})\text{Cl}_6$, где $\text{A}=\text{Ca}, \text{Sr}, \text{Ba}$ каждый катион образует одну связь $\text{A}^+ - \text{O}$ и шесть или семь связей $\text{A}^+ - \text{Cl}$. Кроме того, как и натрий, они могут дополнять координацию аниона O^{2-} в смешанных Bi-содержащих тетраэдрах.

Медь.

Окисляется до менее распространенного Cu^+ и более распространенного Cu^{2+} . По сравнению с другими двухвалентными катионами в структурах неорганических соединений Cu^{2+} может иметь целый ряд различных координационных соединений, таких как: тетраэдр, квадрат, тригональная пирамида, тригональная дипирамида и тетраэдр. Связи образуемые «дополнительными» атомами кислорода, имеют среднюю валентность 0.50ve, это и есть причина столь богатого разнообразия комплексов на основе оксоцентрированных тетраэдров (OCu_4^{2+}).

Кадмий.

Для кадмия более часто распространенная координация в кислородных соединениях – октаэдр (CdO_6), в котором валентность связей слишком мала, для построения тетраэдра. Но, не смотря на это, если в структуре кроме кислорода присутствуют другие анионы (Cl^- , Br^- , F^-) кадмиевые тетраэдры могут существовать за счет перераспределения валентностей в получившихся смешанных координационных полиэдрах атомов Cd.

Свинец.

Наиболее распространенные полиэдры образованные Pb^{2+} в кислородных соединениях: тригональная и тетрагональная пирамида. Изредка встречаются и другие координации. Примечательно, что соединение PbO_2 имеет не плоскостную, а угловую координацию, причем угол составляет примерно 80-90 градусов.

Валентность связи катиона Pb^{2+} колеблется от 0.60 до 0.40, что свидетельствует о том, что этот катион является наиболее подходящим для образования тетраэдров (OPb_4).

Висмут.

Для катиона висмута зарядом (+3) свойственны такие же координационные полиэдры как тригональная, так и тетрагональная. Валентность связей у этого катиона в этих соединениях равна 0.6, что незначительно, но больше 0.5 необходимых для построения правильных тетраэдров, поэтому висмутовые тетраэдры получаются искаженными и имеют предрасположенность к переходу в треугольную координацию.

3) Когда описание структуры в тетраэдрах (XA_4) является наиболее кристаллохимически эффективным?

В первую очередь стоит определить, что мы подразумеваем под «кристаллохимически эффективным» описанием. Если описание позволяет предсказать физические свойства минерала, а именно: тепловое расширение, спайность, форма и ориентация оптической индикатрисы – оно эффективно.

Из сказанного выше очевидно следует, что наиболее эффективным является выделение оксоцентрированных тетраэдров, с наиболее прочными связями. Выполнения этого условия возможно в двух случаях: 1) Химическая природа аниона X , участвующего в образовании комплекса, и анионов X' , X'' и тд различна, и катион A образует с анионом X более сильной связи, в то время как с другими только слабые. 2) Анионы X и X' , X'' должны иметь идентичную или близкую химическую природу. В этом случае катион A должен иметь легко искажаемую координацию, то есть его координационный полиэдр должен допускать более сильные и более слабые связи, при этом различия между ними должны быть существенными. При соблюдении этих свойств получившиеся комплексы анионоцентрированных тетраэдров будут наиболее прочными, и их существование в структуре будет определять анизотропию физических свойств соединений.

Предварительный вывод.

Анализируя вышесказанное можно вывести несколько очевидных правил:

1. В образовании анионоцентрированных тетраэдров участвуют наиболее электроотрицательные анионы с высокой жесткостью и низкой полимеризуемостью.
2. Тетраэдры (OA_4) наиболее распространены для катионов A в оксидах которых O имеет тетраэдрическую координацию.
3. Образование оксоцентрированных тетраэдров наиболее типично для двухвалентных и трехвалентных катионов.

Сравнение двух подходов– традиционного и альтернативного.

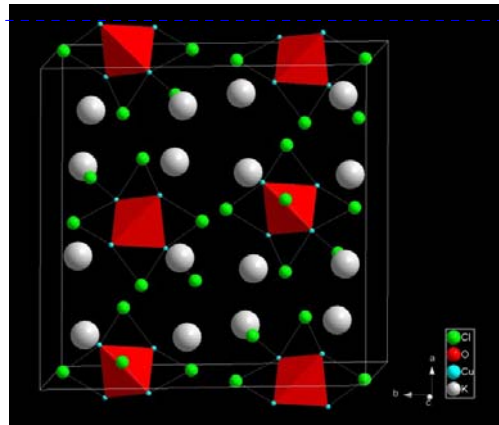
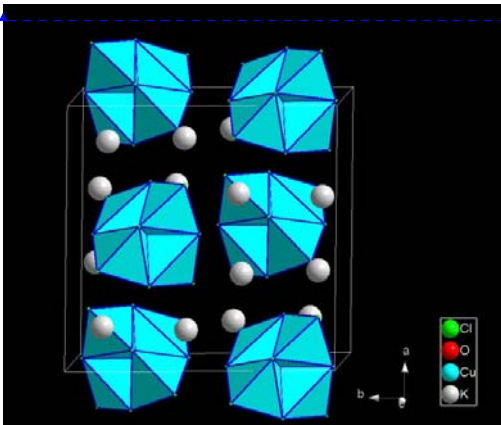
.Сравним геометрическое представление и описания минеральных соединений, полученных традиционным и альтернативным методом. разделим их на группы, по характеру структурных комплексов наблюдаемых при альтернативном описании: островной комплекс – кислородные тетраэдры расположены обособленно, не взаимодействуют между собой или образуют отдельные комплексы; цепочечные комплексы – тетраэдры связаны между собой (по вершине, по ребру) в комплексы, бесконечно протяженные в одном направлении; каркасные комплексы – оксоцентрированные тетраэдры связаны между собой всеми возможными способами и протяжены во всех трех направлениях.

Островные комплексы.

1) **Понаморевит (англ. Ponomarevite).** $K_2[(Cu_4O)Cl_{10}]$; $a= 14.70$ $b=14.88$ $c=8.95$;
 $\alpha=90$ $\beta= 104.74$ $\gamma=90$, $C2/c$

Отформатировано: По левому краю

Отформатировано: Шрифт: (по умолчанию) Arial



Традиционное описание.

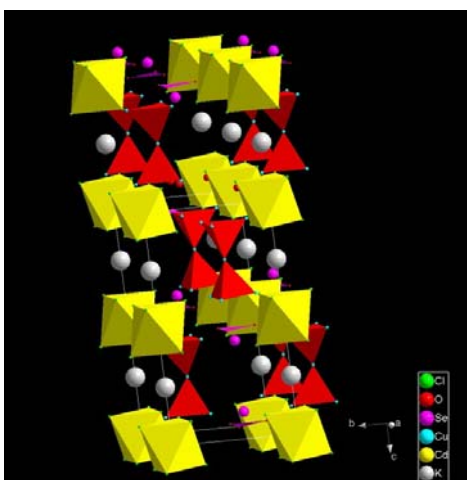
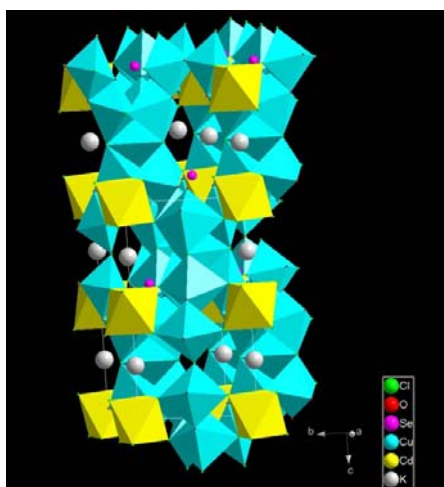
Структура понаморевита состоит из кластеров $[(Cu_4O)Cl_{10}]^{4-}$, составленных из четырех искаженных тетраэдров $[CuOCl_3]$, связанных между собой по двум ребрам. Катионы K^{2+} расположены в сложных искаженных многогранниках.

Альтернативное описание.

Основой структуры понаморета составляет комплекс $[(\text{Cu}_4\text{O})\text{Cl}_{10}]^{4-}$. Центром этого комплекса является оксоцентрированный тетраэдр $[\text{OCu}_4]^{6+}$, каждый атом меди имеет тригонально-дипирамидальную координацию из одного атома кислорода, находящегося в центре тетраэдра, и четырех атомов хлора. На иллюстрации тетраэдры выделены красным цветом, а связи хлора белыми линиями

2) **Бернсит (англ. Burnsite)** $\text{KCd}[\text{Cu}_7\text{O}_2](\text{SeO}_3)_2\text{Cl}_9$; $a=8.7805$ $b=8.7805$ $c=15.521$;
 $\alpha=90$ $\beta=90$ $\gamma=120$; $P6_3/mmc$

Отформатировано: Шрифт:
(по умолчанию) Arial



Традиционное описание.

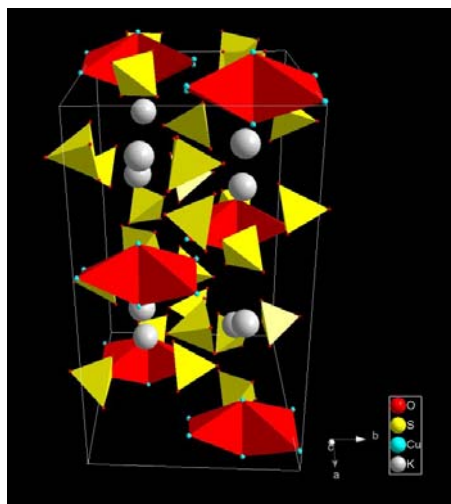
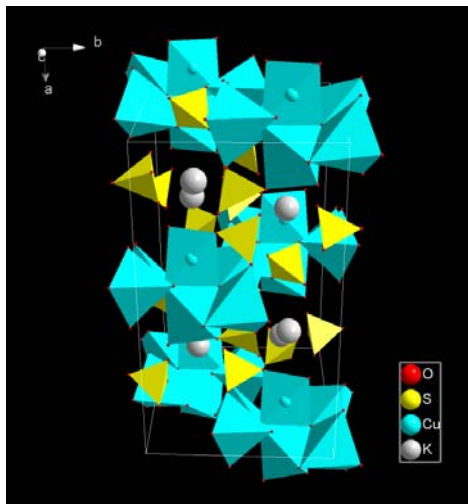
Структура бернсита основана на каркасе из искаженных медных октаэдров $[\text{CuCl}_3\text{O}_3]$. Полости каркаса заполняют октаэдры $[\text{CdCl}_6]$, связанные между собой тригональными призмами $[\text{KCl}_6]$ и тригональными пирамидами (SeO_3)

Альтернативное описание.

Кислородно-медные тетраэдры в структуре бернсита объединяются по ребру и образуют комплексы $[\text{O}_2\text{Cu}_7]$, присоединяющие к себе по принципу «грань к грани» две тригональные пирамиды (SeO_3). Образованные сложные группировки $[\text{O}_2\text{Cu}_7](\text{SeO}_3)_2$ объединяются в открытый трехмерный каркас, полости которого заполняют октаэдры (CdCl_6) и тригональные призмы (KCl_6).

3) **Федотовит (англ. Fedotovite)** $K_2Cu_3O(SO_4)_3$; $a=19.0370$ $b=9.479$ $c=14.231$; $\alpha=90$
 $\beta=111.04$ $\gamma=90$; $C2/c$

Отформатировано: Шрифт:
(по умолчанию) Arial



Традиционное описание.

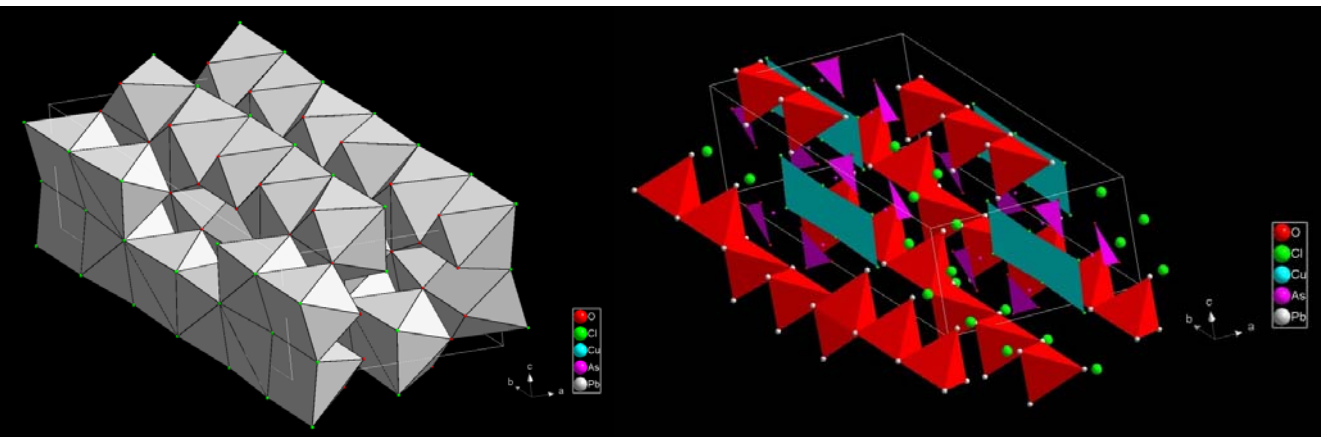
Соединяясь по ребрам и вершинам медно-кислородные пятивершинники, образовавшиеся из искаженного медного квадрата (дополненного пятой координацией), объединяются в кластеры, расположенные в шахматном порядке. Пространство между кластерами занимают серные тетраэдры (SO_4). Структуру объединяет в каркас семивершинники (KO_7)

Альтернативное описание.

В структуре федотовита оксоцентрированные тетраэдры соединяются по ребрам и образуют комплексы $[O_2Cu_6]$, которые через тетраэдры (SO_4) соединяются в слои. Между слоями располагаются катионы K^+

4) Фридит (англ. **Freedite**) $[Pb_8O_3]Cu(AsO_3)_2O_3Cl_5$; $a = 13.578$ $b = 20.099$ $c = 7.465$;
 $\alpha=90$ $\beta=105.73$ $\gamma=90$; $C2/m$

Отформатировано: Шрифт:
 (по умолчанию) Arial



Традиционное описание.

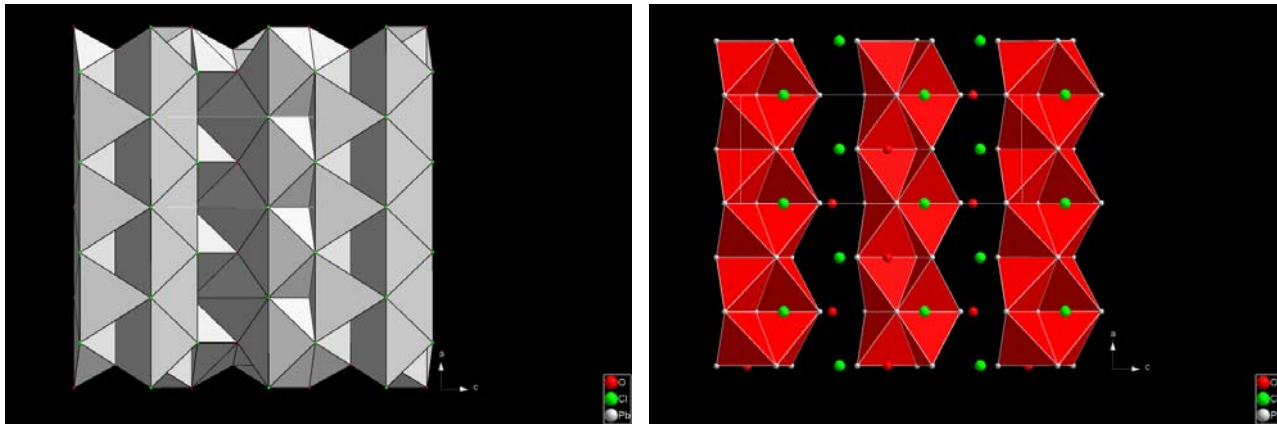
В структуре фридита катион свинца является центром пяти- и семи- вершинников, в вершинах которых располагаются анионы хлора и кислорода. Они связываются по вершинам и ребрам в жесткий каркас.

Альтернативное описание.

Кристаллическая структура фридита состоит из слоев, образованных цепочками оксо-свинцовых тетраэдров $[O_3Pb_8]$, между которыми уложены треугольники (AsO_3) , прочно связывающие цепочки в плоскости (100). Между этими слоями расположены ионы хлора и изолированные квадратные группы (Cu_2Cl_6)

5) **Дамараит**(англ. Damaraitite) $Pb_3O_2Cl_2$ $a=5.8052$ $b=6.9025$ $c=15.141$ $\alpha=90$ $\beta=90$ $\gamma=90$ $Pmc2_1$

Отформатировано: Шрифт:
(по умолчанию) Arial



Традиционное описание.

Структура дамараита состоит из свинцовых восьмигранников, связанных между собой по ребрам и образующим каркас.

Альтернативное описание.

В структуре дамараита цепочки $[O_2Pb_3]$, из оксоцентрированных тетраэдров объединенных по трем ребрам, связаны через группы $(OH) Pb_2$ в слой $[O_2Pb_3(OH)]$.

Промежутки между слоями заполнены анионами Cl^-

Отформатировано:
Обычный

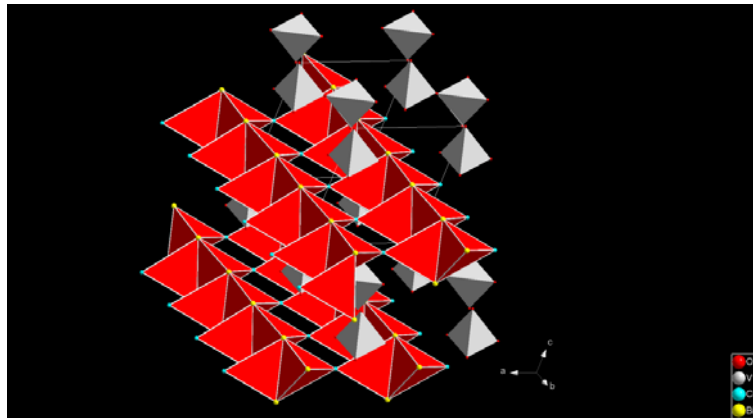
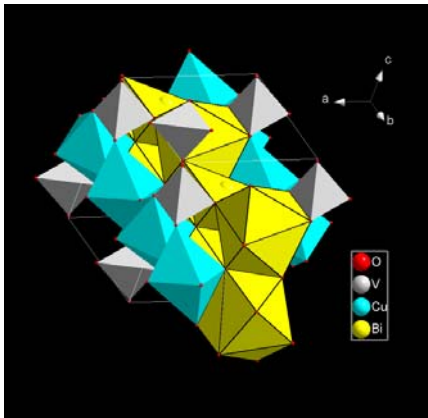
Слоистые комплексы.

Удалено: ¶

Отформатировано: Шрифт:
(по умолчанию) Calibri, 14 пт

Отформатировано: Шрифт:
(по умолчанию) Arial

6) **Намибит (англ. Namibite)** $\text{Cu}(\text{BiO})_2\text{VO}_4(\text{OH})$ $a=6.210$ $b=7.398$ $c=7.471$ $\alpha=90.10$
 $\beta=108.73$ $\gamma=107.47$ P-1



Традиционное описание.

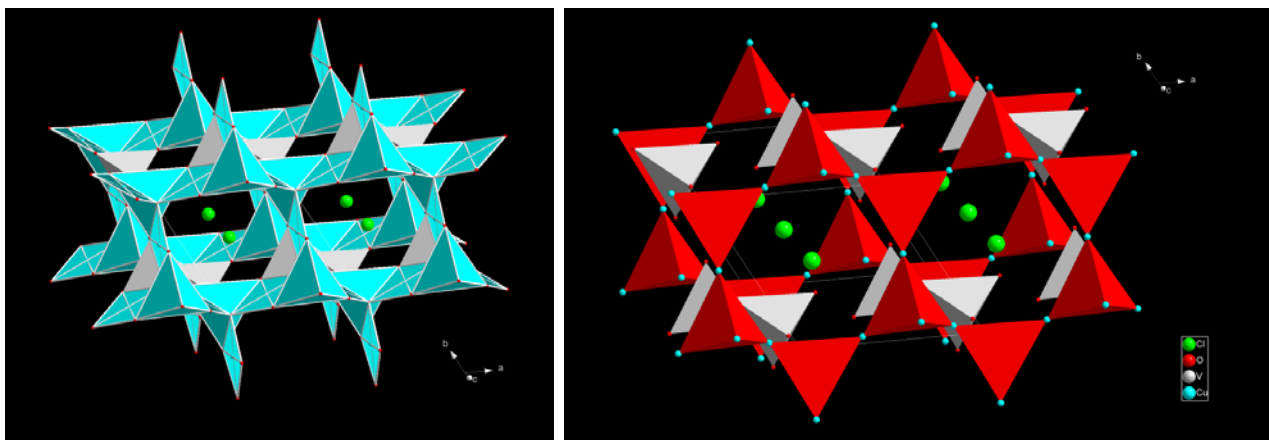
Каркас намибита состоит из трех структурных единиц, объединенных по ребрам и вершинам. Медь лежит в искаженном кислородном октаэдре, висмут находится в центре искаженных октаэдров и восьмивершинников, объединенных между собой по ребрам в слое. Ванадий основывает тетраэдры (VO_4).

Альтернативное описание.

В структуре выделяются слои из тетраэдров (OCuBi_3), объединяющихся по вершинам. В пространствах между слоями расположены обособленные тетраэдры $[\text{VO}_4]$

7) **Аверьевит (англ. Averievite)** $\text{Cu}_5\text{O}_2(\text{VO}_4)_2$ $a=6.375$ $b=6.375$ $c=8.399$ $\alpha=90$ $\beta=90$
 $\gamma=120$ $R\bar{3}$

Отформатировано: Шрифт:
(по умолчанию) Arial



Традиционное описание.

Медные тетраэдры $[\text{CuO}_4]$ и ромбы $[\text{CuO}_4]$, объединяясь по ребрам и вершинам, составляют звездчатые слои, связь между которыми осуществляется за счет ванадиевых тетраэдров $[\text{VO}_4]$. В продольных пустотах расположены анионы Cl^-

Альтернативное описание.

Структура аверьевита содержит звездчатые слои $[\text{O}_2\text{Cu}_5]$ из тетраэдров (OCu_4) , связанных между собой общими вершинами. Между слоями, параллельно оксоцентрированным тетраэдрам расположены тетраэдры (VO_4) . В подольных пустотах расположены анионы Cl^- .

Вывод.

Описание структур с помощью анионоцентрированных тетраэдров подходит лишь для малой части изученных минералов, но для них оказывается наиболее наглядным. Как можно увидеть на примере приведенных выше иллюстраций, альтернативный метод описания оксосолей существенно более наглядный чем традиционный метод.

Благодаря такому описанию можно проследить закономерности строения и разделить их на группы, так, как было сделано выше. Кроме наглядности, метод дает такое преимущество, как возможность выделить неискаженные координационные полиэдры в структурах с неполновалентными структурами, таких, как например, в структуре намибита. Кроме того, в таких структурах как дамараит и фридит в традиционном описании сложно выделить понятную структуру, Достаточно трудно предсказать его свойства, такие, как например, тепловое расширение. Выделенный каркас не описывает структуру в достаточной мере, но в анионоцентрированной структуре прослеживаются мотивы из протяженных цепочек. Это позволяет предположить, что эти минералы при нагревании будут расширяться в одном направлении больше, чем в двух других.

Кроме того, новое направление в кристаллохимии позволяет более подробно изучить процессы образования новых минералов. А это значит, что в дальнейшем это сможет обеспечить возможность создания соединений с необходимыми свойствами.

Одним словом, новый подход перспективен и набирает обороты. На данный момент открыто около 500 минералов, описание которых, с точки зрения оксоцентрированных тетраэдров, является обоснованным. Продолжающиеся исследования минералов найденных после извержений вулканов позволяет надеяться на дальнейшие открытия. Это значит, что рассмотренный мной метод со временем будет все более и более востребован.

← Отформатировано: По левому краю

Список литературы.

С.В. Кривовичев, С.К. Филатов

«Кристаллохимия минералов и неорганических соединений с комплексами анионоцентрированных тетраэдров». Изд-во Санкт-Петербургского университета 2001 198стр.

Г.Б. Бокий

«Кристаллохимия» издание 3 Москва, Изд-во «Наука», 1971. 400с

Р.К. Расцветаева

«Сказки о минералах» Нижний Новгород: изд-во Нижегородского госуниверситета им. Н. И. Лобачевского, 2008. 160с

Урусов В.С., Еремин Н.Н.

«Кристаллохимия. Краткий курс». , Москва, Изд-во МГУ, 2010. 258 стр.