
Основы кристаллохимии: знакомство с основными структурными типами

Содержание

1. Структурные типы, базирующиеся на плотнейших упаковках

1.1 Структуры металлов

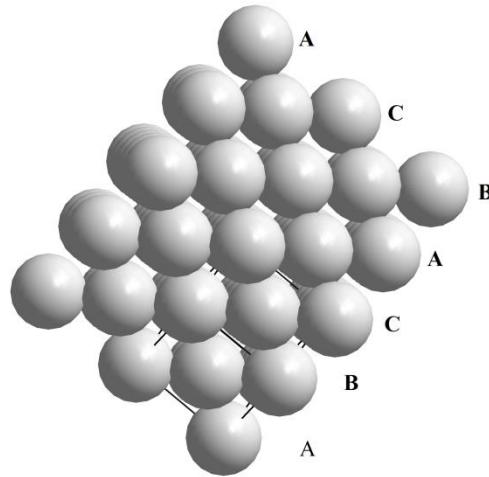
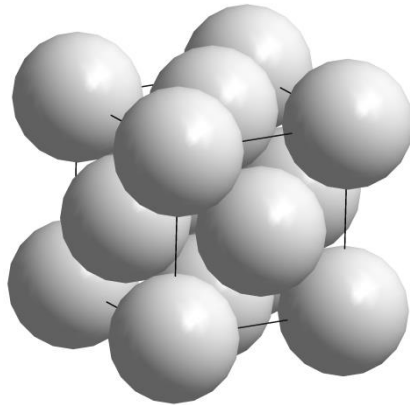
1.2 Структуры ионных кристаллов

2. Структурные типы, базирующиеся на плотных шаровых кладках

2.1 Структуры металлов

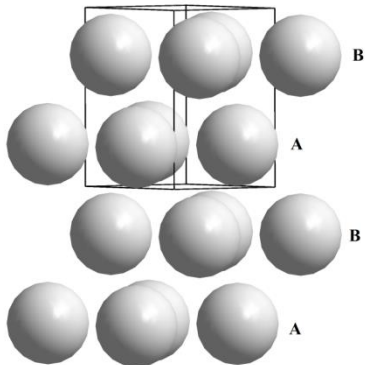
2.2 Структуры ионных кристаллов

1.1 Плотнейшая упаковка



Это структурный тип
Cu – в нем
кристаллизуются
многие металлы (Al,
Cu, Ni, Au, Ag...)

Возможно понижение симметрии с упорядочением в
многокомпонентных структурах

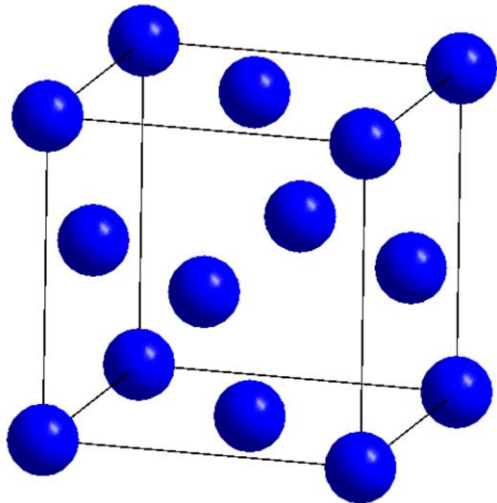


А вот двухслойная упаковка –
структурный тип Mg ($P6_3/mmc$)

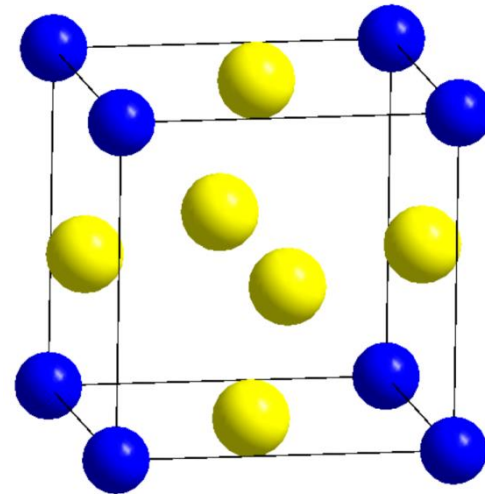
Это Be, Mg, Ti, ...

1.1 Плотнейшая упаковка – структуры металлов

Cu или (Cu,Au): $Fm\bar{3}m$



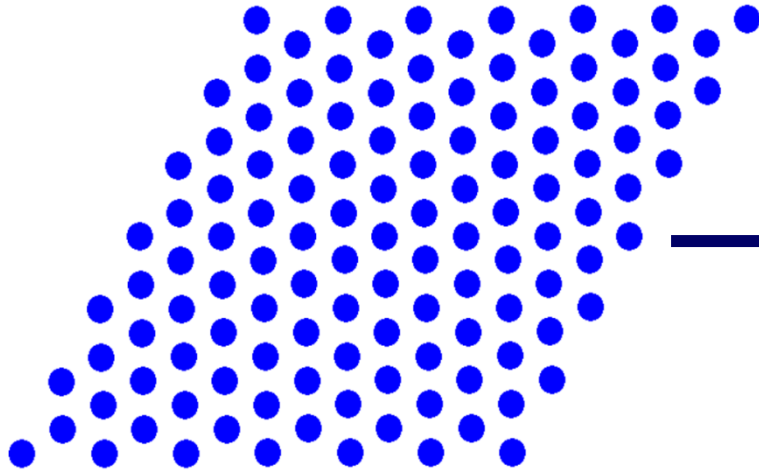
CuAu₃: $Pm\bar{3}m$



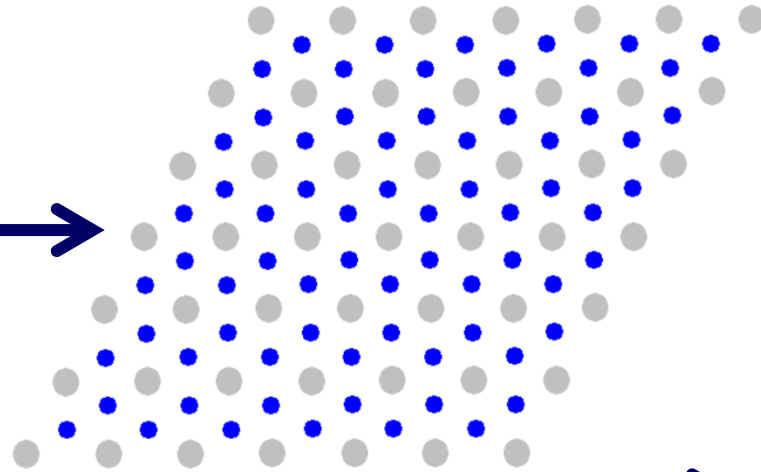
1.1 Плотнейшая упаковка – структуры металлов

Возможны сложные упорядочения

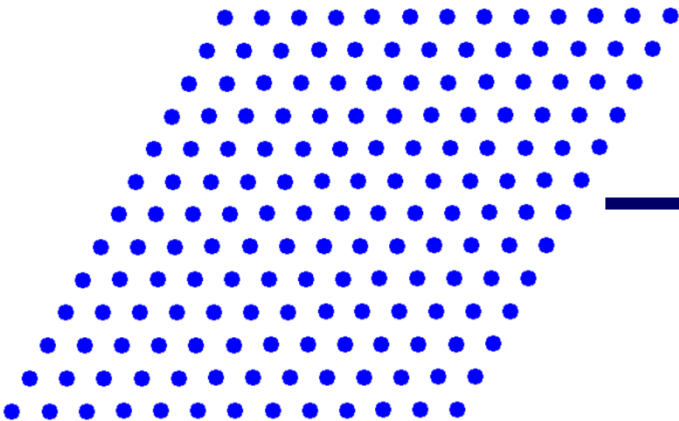
Слой $(\text{Cu})_3$



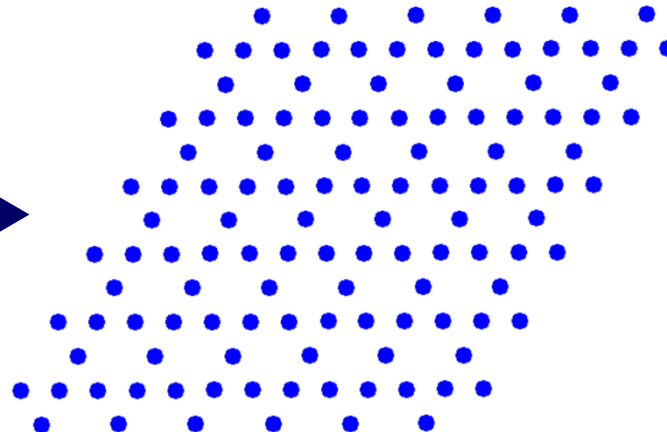
Слой CaCu_2



Слой $(\text{Cu})_4 a(3/2)^{0.5}$



Слой $\square\text{Cu}_3$

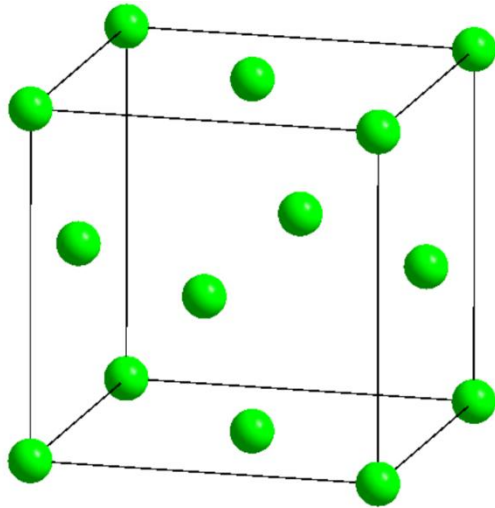


CaCu_5



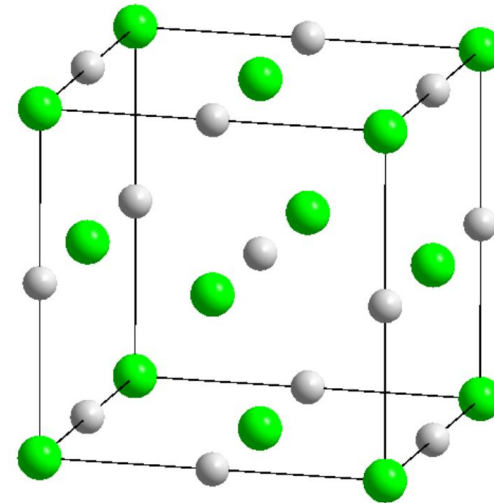
1.1 Плотнейшая упаковка – структуры ионных кристаллов

Упаковка Cl^-



3-х слойная ПШУ

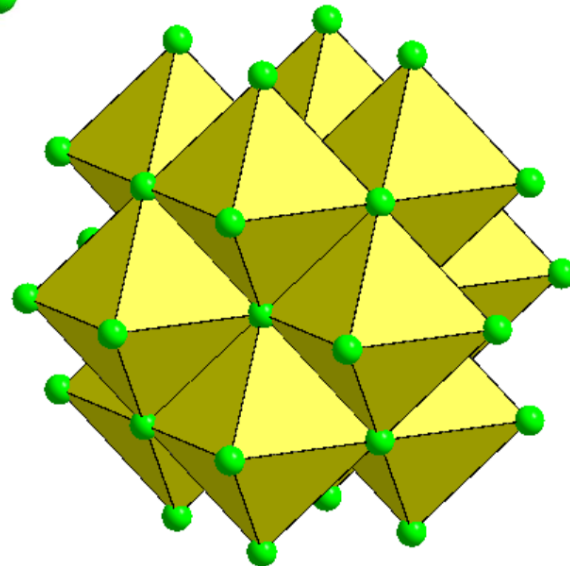
NaCl



Группа $Fm-3m$

Октаэдры NaCl_6
соединены ребрами!

Транзитивная структура

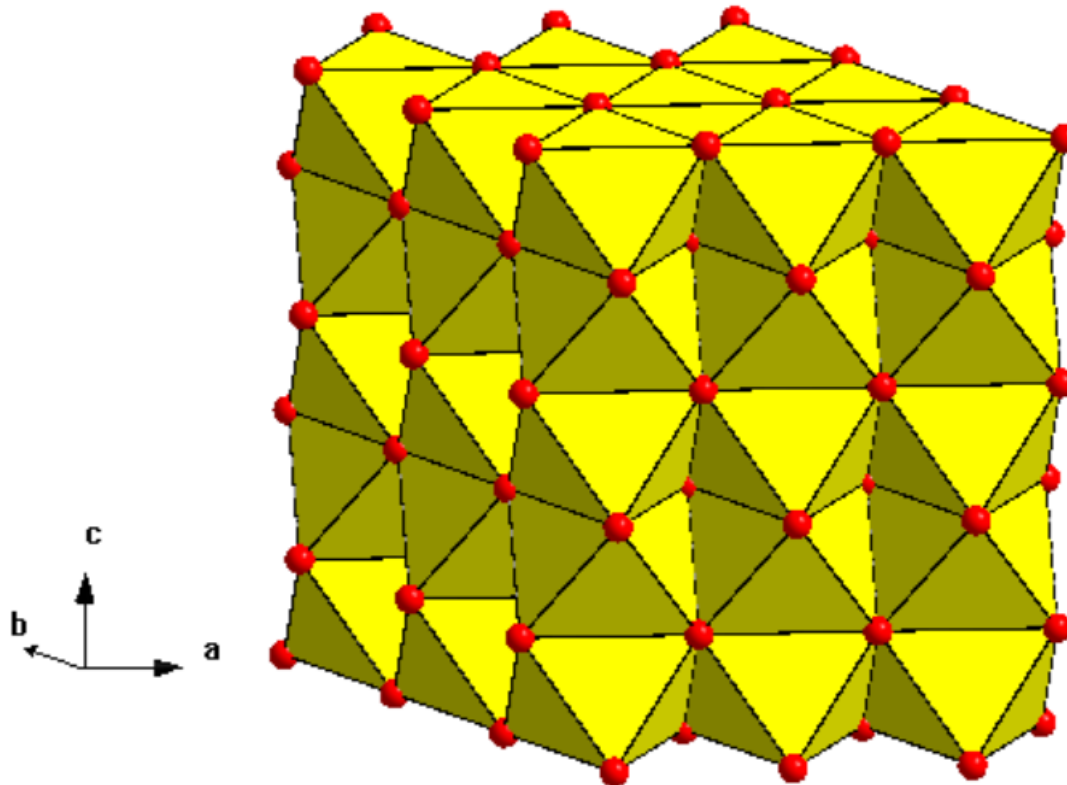


1.1 Плотнейшая упаковка – структуры ионных кристаллов

2-х слойная ПШУ

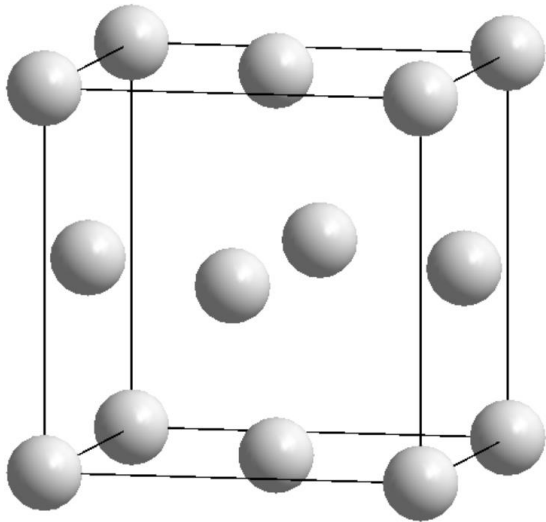
Группа $P6_3/mmc$

Октаэдры $NiAs_6$
соединены ребрами
и гранями

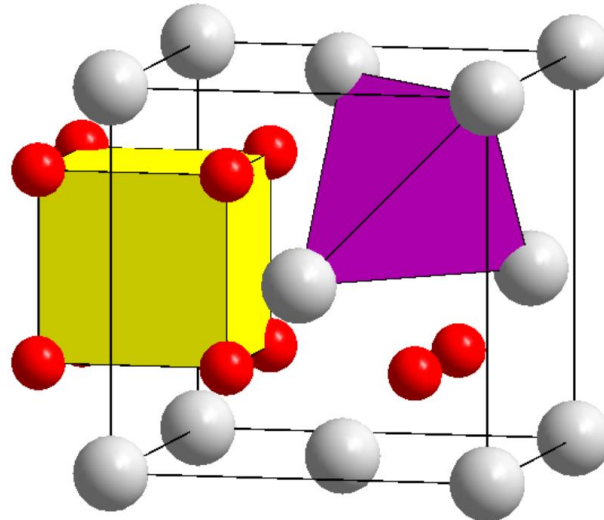
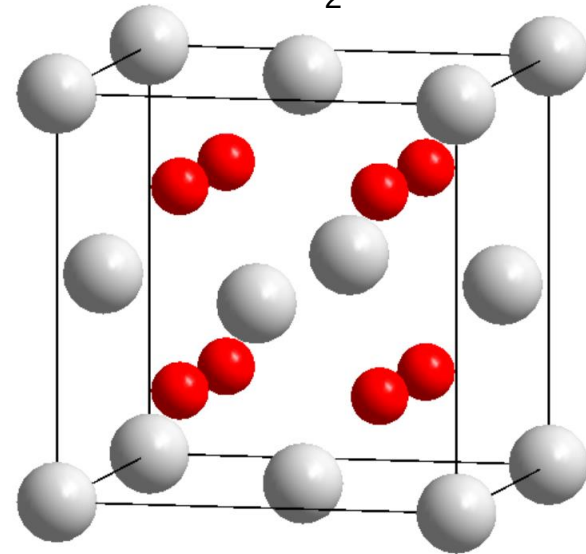


1.1 Плотнейшая упаковка – структуры ионных кристаллов

Упаковка Ca^{2+}



CaF_2

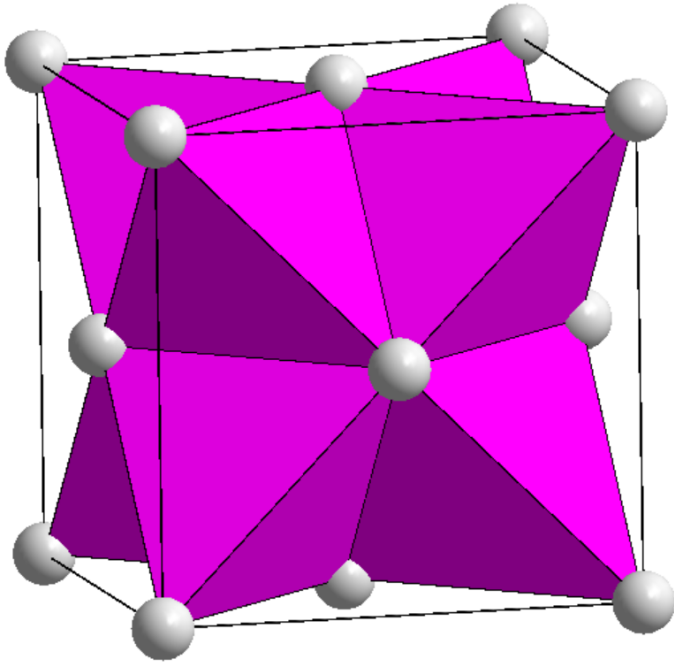


Группа $Fm-3m$

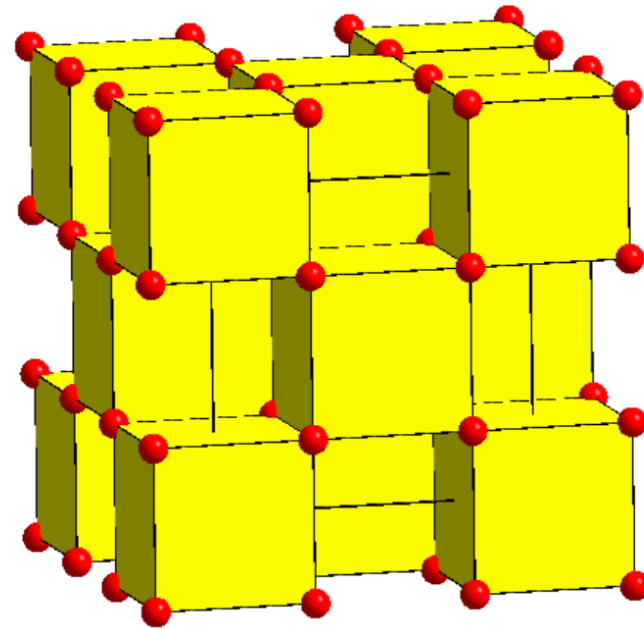
3-х слойная ПШУ

1.1 Плотнейшая упаковка – CaF_2

FCa_4

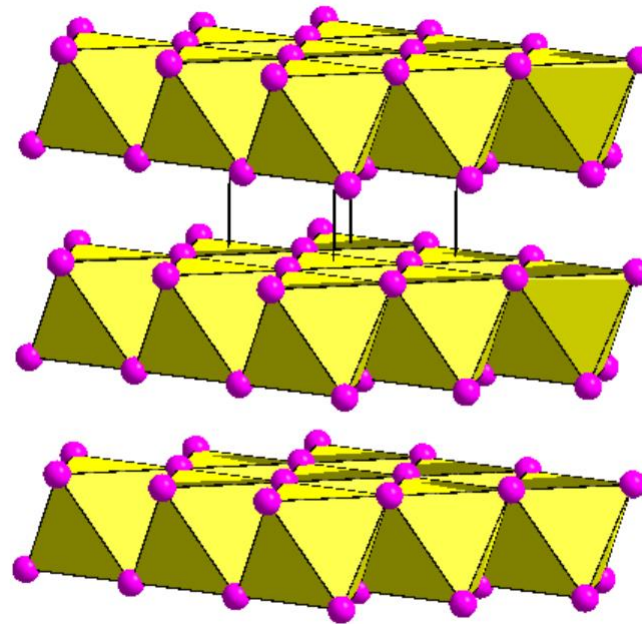
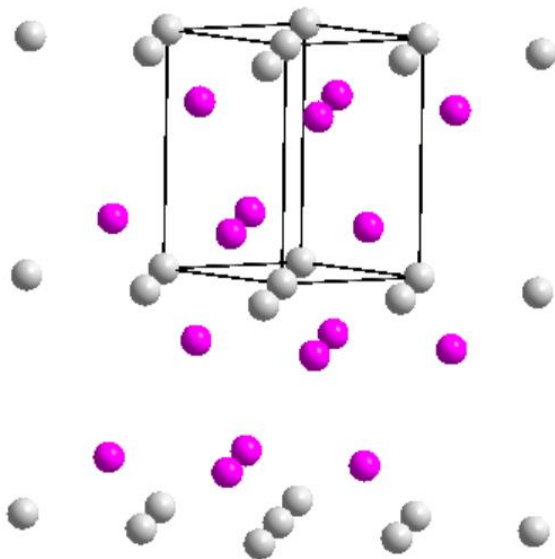
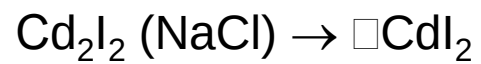


CaF_8



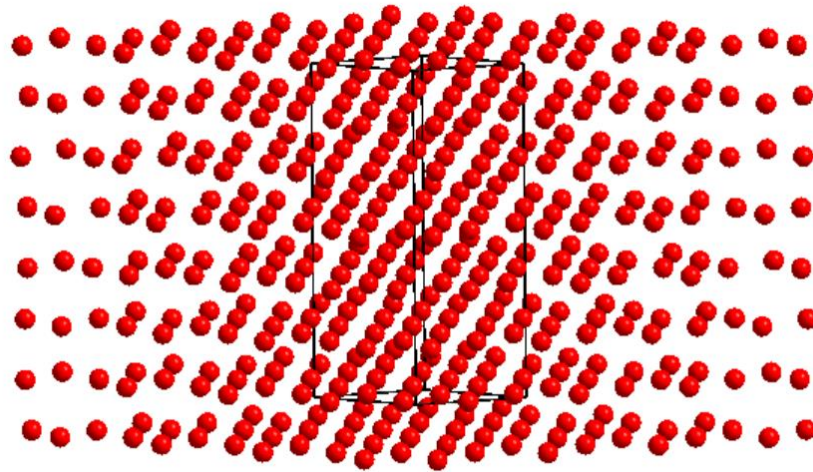
Координационные полиэдры соединены ребрами!

1.1 Плотнейшая упаковка – катионные дефекты



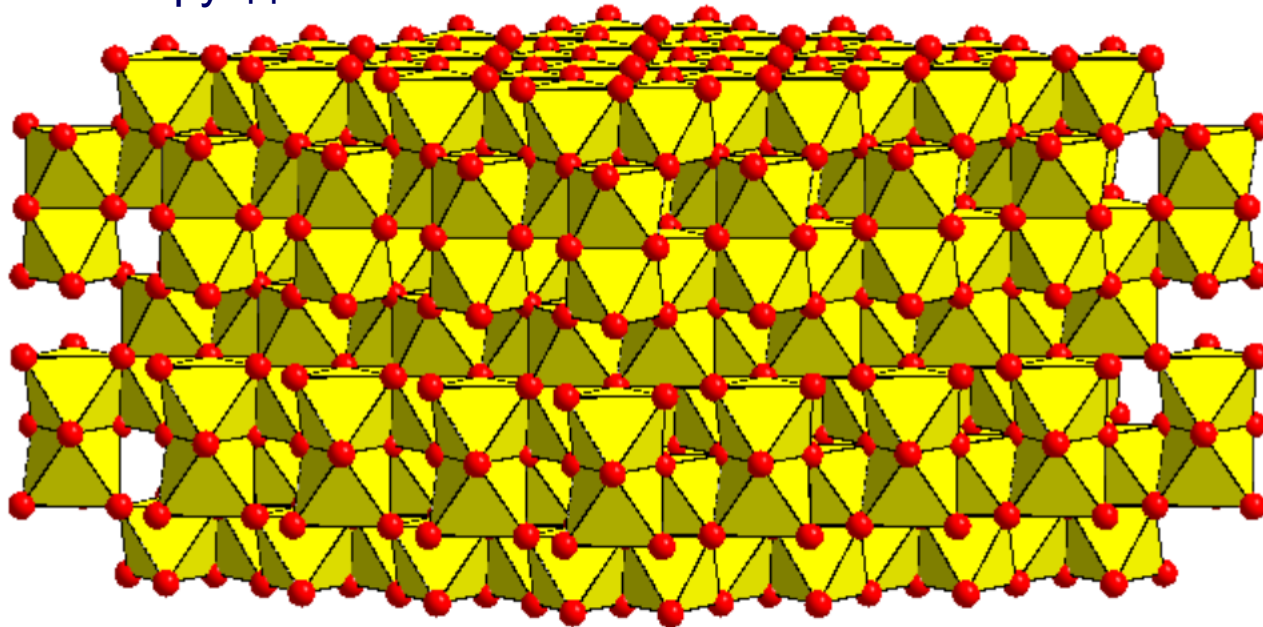
1.1 Плотнейшая упаковка – катионные дефекты

2-х слойная ПШУ O^{2-}



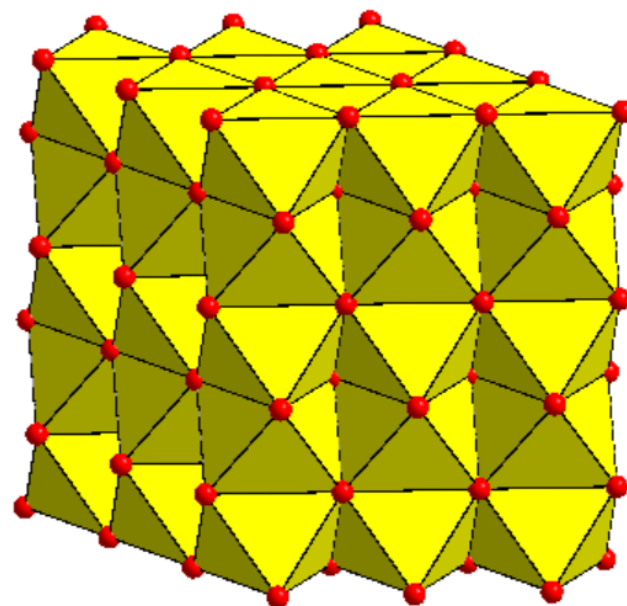
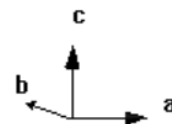
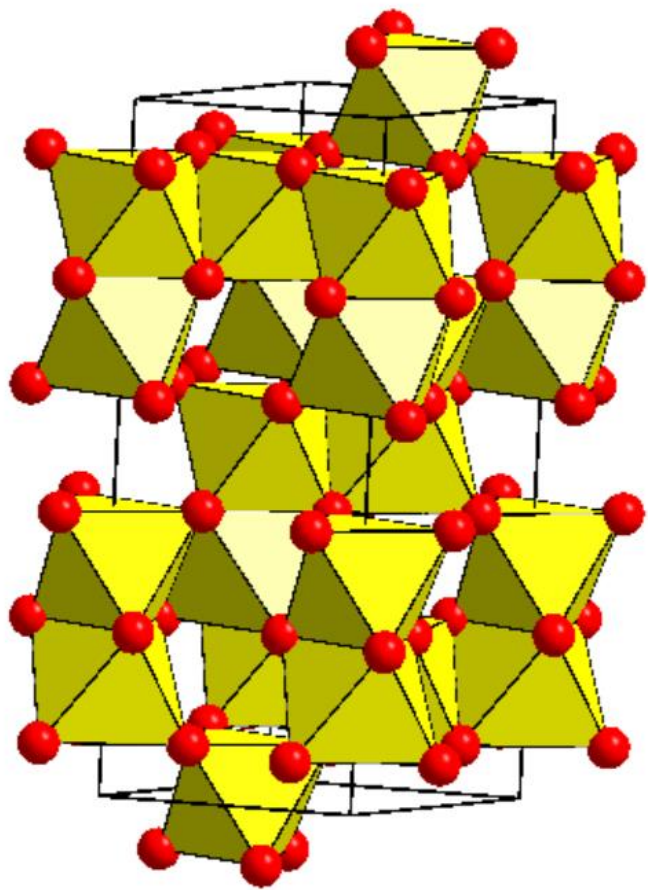
Структурный тип - корунд

Al_2O_3
(*R-3c*)



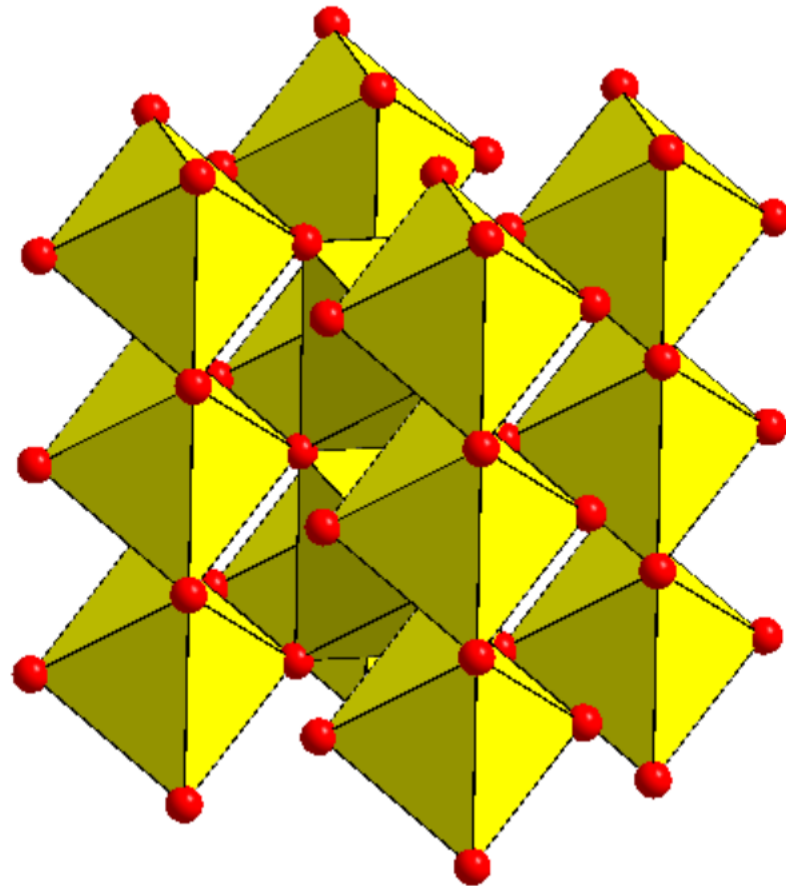
1.1 Плотнейшая упаковка – катионные дефекты

Корунд vs. NiAs



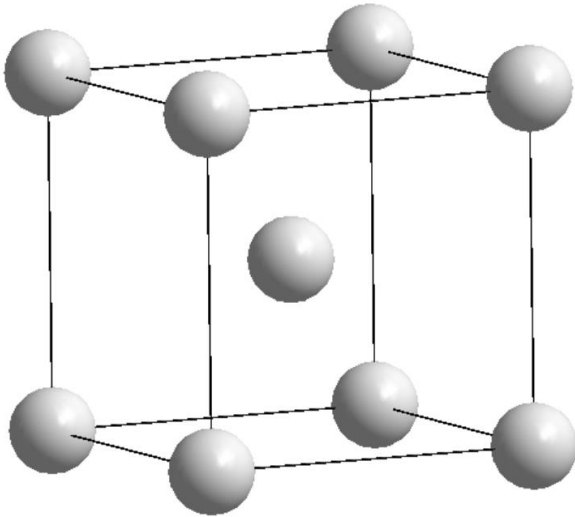
1.2 Структуры, далекие от плотнейшей упаковки

TiO_2
 $P4_2/mnm$

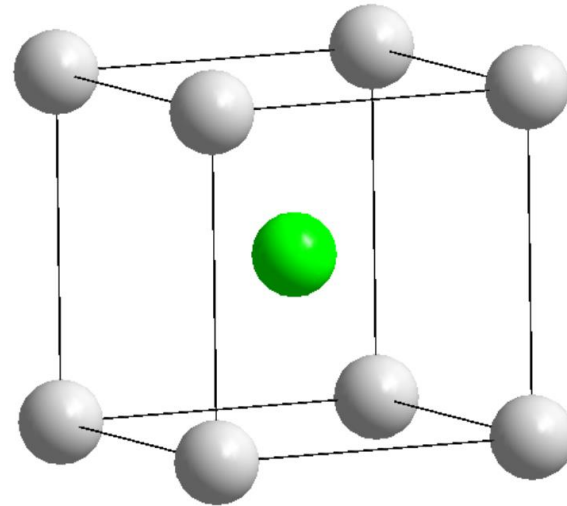


1.3 Плотная кладка

α -Fe ($Im-3m$)

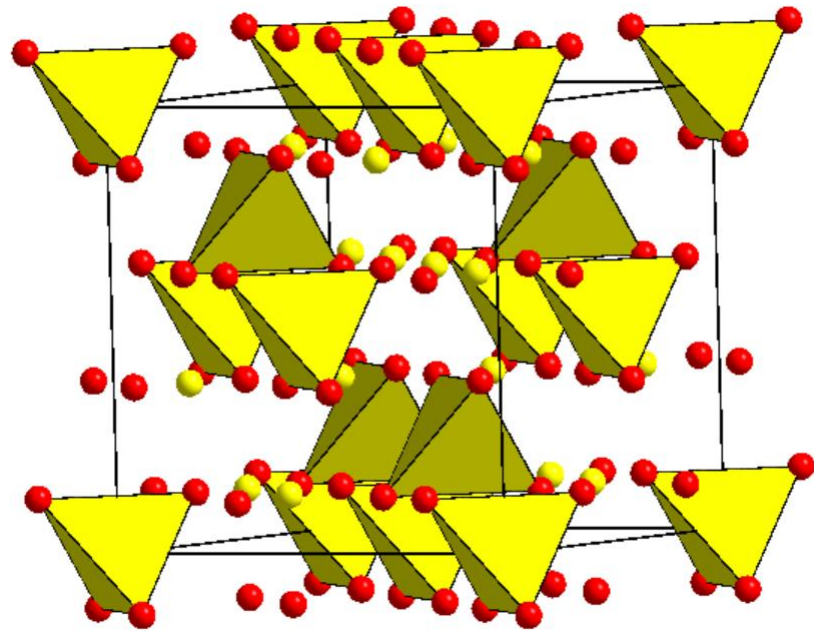
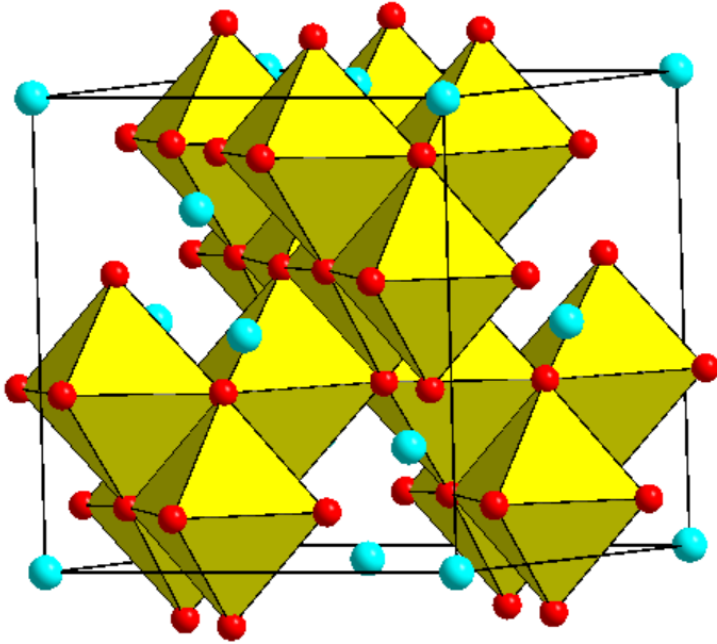


CsCl ($Pm-3m$)



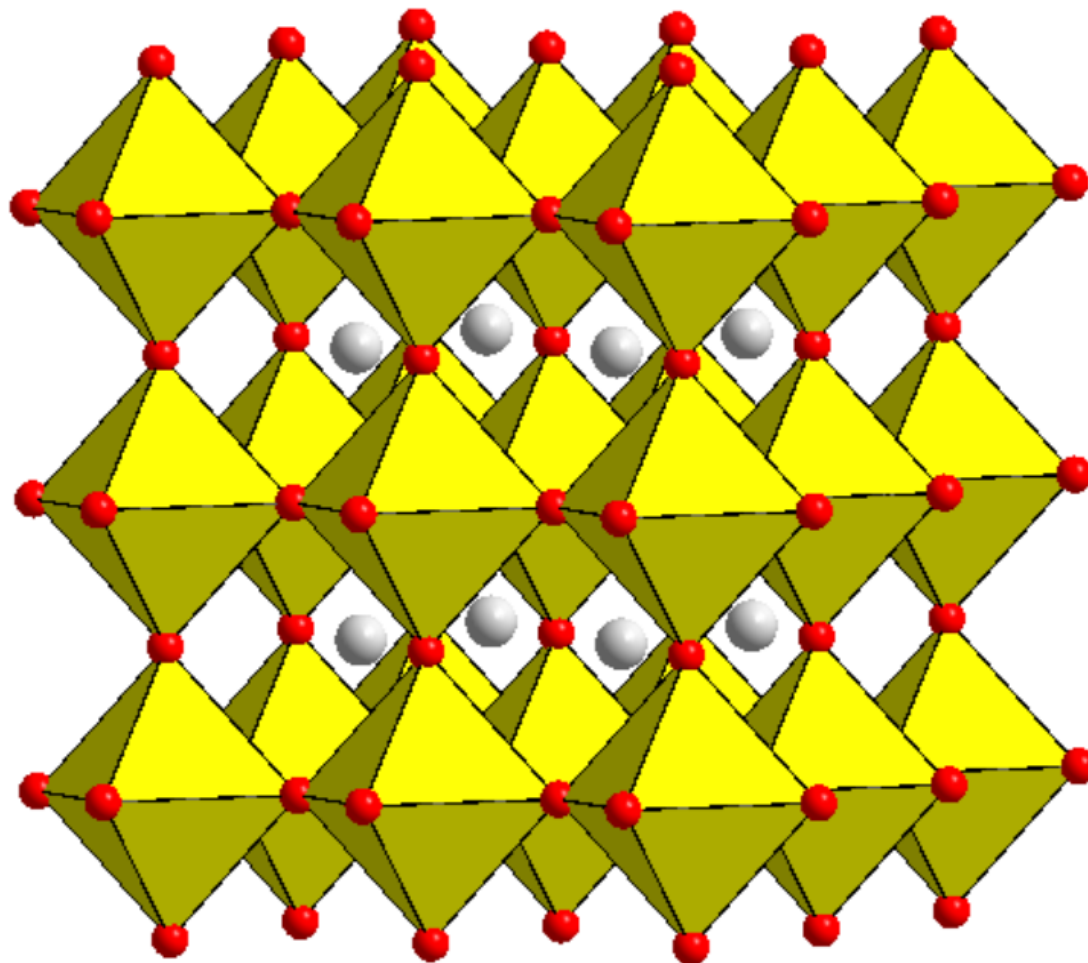
1.4 Тройные соединения

Структурный тип шпинели AB_2O_4 : $MgAl_2O_4$
3-х слойная ПШУ. $Fd-3m$



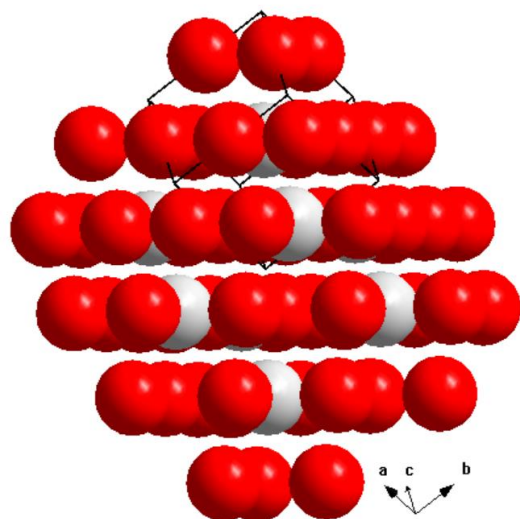
1.4 Тройные соединения

Структурный тип перовскита ABO_3 : $CaTiO_3$

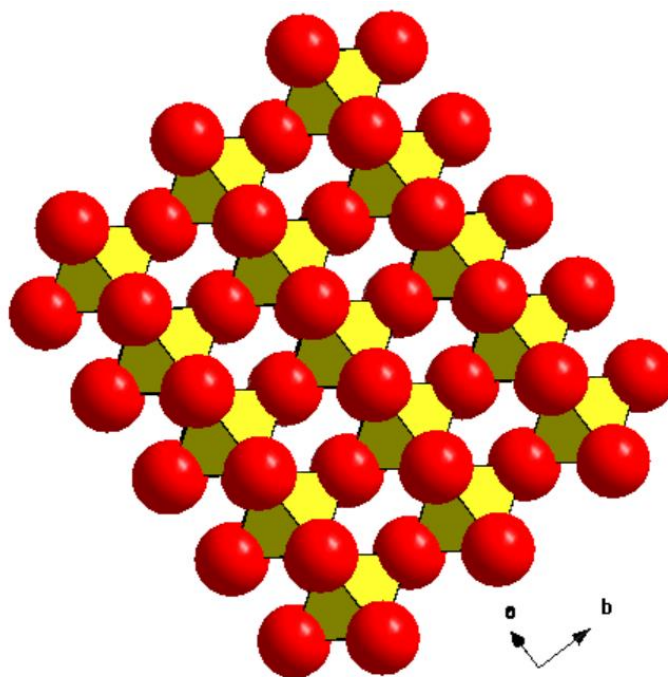
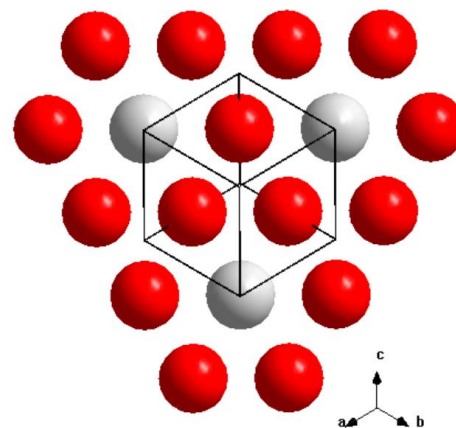


1.4 Тройные соединения

Структурный тип перовскита ABO_3 : $CaTiO_3$



3-х слойная ПШУ CaO_3



Заполнение
 $\frac{1}{4}$ части O_h
пустот Ti

1.4 Структуры срастания

