

РАСЧЕТ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СТРУКТУР МИНЕРАЛОВ ГРУППЫ СЛЮД

Бразовская Н.В., Бразовский В.Е., Троицкий В.С. *e-mail*: braz@agtu.secna.ru
Алтайский государственный технический университет, 656038, г. Барнаул, Россия,

Аннотация. Построена компьютерная модель и рассчитаны характеристики кристаллов следующих минералов: мусковит, флогопит, парагонит, маргарит и клинтонаит. В качестве исходных использованы известные параметры слюды мусковит. Кристаллы остальных минералов рассматривались как дефекты замещения последней.

Введение

Слюда широко используется как в технике, так и в физическом эксперименте. Например, в работе [1] описано явление, названное резонансом интенсивностей, имеющее место при лазерном разделении изотопов пористыми мембранами на основе кристаллов слюды и до настоящего времени не получившее адекватного объяснения. Для детального расчета подобных явлений требуется знание структуры кристалла с учетом потенциалов межатомного взаимодействия. Сведения о структуре кристаллов на уровне моделирования и расчета дефектов последних представляют и самостоятельный научный интерес. Работы такого характера для сложных кристаллов типа слюд нам неизвестны.

В группе слюд наиболее хорошо изученным минералом является слюда мусковит. С хорошей точностью изучена его кристаллическая структура и химическое взаимодействие. Известны расстояния между слоями и размещения атомов внутри слоев. Изображения его элементарной ячейки украшают большинство статей о слюде. Но кроме мусковита группа слюд включает еще ряд минералов, о которых столь полная информация отсутствует. В связи со спецификой минералогии сведения о них ограничиваются химической формулой и описательной информацией, применение которой для целей компьютерного моделирования невозможно.

В соответствии с особенностями химического состава слюды подразделяются на подгруппы: мусковит, парагонит, глауконит, флогопит, биотит, лепидолит, циннвальдит, маргарит, клинтонаит и ксантофиллит. Флогопит и биотит представляют собой члены непрерывной серии; как в отношении химизма, так и в структурном отношении многие их характеристики близки к характеристикам мусковита. Нам, прежде всего, будут интересовать кристаллы, пригодные для изготовления мембран. Настоящая работа ограничена расчетом структурных характеристик кристаллов следующих минералов: мусковит, флогопит, парагонит, маргарит и клинтонаит.

Ранее нами была построена модель кристалла слюды мусковит [2]. За основу при построении модели взяты известные парные потенциалы межатомного взаимодействия и описываемая в литературе идеальная кристаллическая структура слюд. Минимизация энергии кристалла производится варьированием пространственных положений атомов и компонентов векторов трансляций элементарной ячейки. Модель описывает пространственное распределение атомов в кристалле и взаимодействие между ними, а также включает средства для наглядного графического представления полученной структуры. Ее функционала достаточно для построения и исследования различных дефектов. Учитывая, что другие минералы группы слюд могут быть рассмотрены как дефекты замещения в слюде мусковит, мы можем получить их компьютерные модели на основе модели слюды мусковит.

Мусковит

Мусковит $KAl_2[AlSi_3O_{10}][OH]_2$, сингония моноклиная; моноклинно-призматический, Пр.гр.

$$C/2c(C_{2h}^6), Z = 2,$$

$$a_0 = 5,19; b_0 = 9,04; c_0 = 20,08; \beta = 95^\circ 30'.$$

Любая компьютерная модель должна содержать две неразрывно связанные части, это данные и методы. Данные несут в себе информацию о событиях происходящих в модели и ее состоянии. А методы преобразуют их (данные) с целью получения нужной нам информации. При построении модели мы сохраним это деление. При таком подходе не накладываются ограничения на среды хранения данных и средства работы с ними.

Все существующие на сегодня методы моделирования процесса взаимодействия налетающей частицы с веществом опираются на данные о координатах атомов (как мишени, так и налетающей частицы) в трехмерном пространстве. Большинству из них также требуются данные о взаимодействии между атомами, в том или ином виде. То есть наша модель как минимум должна содержать эту информацию.

Так как модель должна позволять моделировать сложные трехмерные дефекты, то ограничиться хранением только сведений об элементарной ячейке не представляется возможным. Необходимо рассматривать все атомы кристалла независимо и хранить информацию о каждом в отдельности, что ведет к резкому усложнению задачи. В данной модели эти два подхода объединены. Модель кристалла хранит информацию об его элементарной ячейке и об одиночных атомах принадлежащих его дефектным областям. Исходя из нее “налету” формируется информация о реальном распределении атомов и их свойствах, которая в дальнейшем используется для вычислений.

Вместо традиционного формата задания кристаллографических осей, используется представление в векторном виде и ради сохранения симметрии кристалла (что более важно для нашей модели) вектора трансляций немного изменены:

$$\vec{a} = (5.18 \cdot 10^{-10}, 0, 0), \vec{b} = (0, 5.18 \cdot 10^{-10} \cdot \sqrt{3}, 0), \vec{c} = \left(-\frac{5.18 \cdot 10^{-10}}{3}, 0, 19.88 \cdot 10^{-10}\right)$$

Информация об атомах входящих в элементарную ячейку кристалла включает уникальный номер, пространственные координаты, сорт атома и ряд других необязательных атрибутов. Межатомное взаимодействие описывается при помощи химической связи и подразделяется на ионное, ковалентное и донорно-акцепторное. Все сведения об элементарной ячейке слюды мусковит сведены в таблицу 1. В таблице 2 представлены условные обозначения, используемые в таблице 1. Кроме того, модель кристалла содержит трехмерную битовую маску, определяющую его геометрию. **Анимационное изображение доступно по адресу.**

<http://eftj.secna.ru/0501/ecell.avi>

Кроме перечисленных данных, в программе модели присутствуют методы создания и отображения. Таким образом, наша программа строит кристалл с заданными характеристиками и показывает, как он выглядит. Также определяется энергия полученной структуры и проводится ее минимизация.

Метод построения кристалла позволяет на основе элементарной ячейки создавать модели кристаллов различной геометрии. Метод представления (отображения) кристалла способен отображать результаты моделирования в различном виде (табличное представление, графические изображения, видеоролики).

Мусковит (MUSCOVITE), [1], 2M, $KAl_2[Si_3Al]O_{10}(OH)_2$

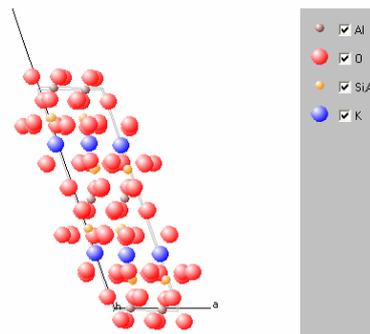


Рис. 1. Условное изображение структуры слюды-мусковит [4].

Таблица 1. Атомы элементарной ячейки слюды мусковит и химические связи между ними

Индекс атома	Сорт атома	Радиус-вектор, 10 ⁻¹⁰ м	Связи атома																	
			1			2			3			4			5			6		
			Тип взаимодей- ствия	Параме- тр ион- ной связи	Индекс атома	Тип взаимодей- ствия	Параме- тр ион- ной связи	Индекс атома	Тип взаимодей- ствия	Параме- тр ион- ной связи	Индекс атома	Тип взаимодей- ствия	Параме- тр ион- ной связи	Индекс атома	Тип взаимодей- ствия	Параме- тр ион- ной связи	Индекс атома	Тип взаимодей- ствия	Параме- тр ион- ной связи	Индекс атома
0,0,0,1	К	(0.000,0.000,0.000)	И	0.5	0,-1,0,5	И	0.5	0,0,-1,72												
0,0,0,2	К	(2.590,4.486,0.000)	И	0.5	0,0,-1,72	И	0.5	0,0,0,5												
0,0,0,3	О	(0.000,4.486,1.680)	К		0,0,0,10	К		0,0,0,9												
0,0,0,4	О	(1.295,2.243,1.680)	К		0,0,0,9	К		0,0,0,11												
0,0,0,5	О	(1.295,6.729,1.680)	К		0,0,0,10	Д		0,0,0,12	И	-0.5	0,1,0,1	И	-0.5	0,0,0,2						
0,0,0,6	О	(2.590,0.000,1.680)	К		0,0,0,11	К		0,-1,0,12												
0,0,0,7	О	(3.885,2.243,1.680)	К		0,0,0,11	К		1,0,0,9												
0,0,0,8	О	(3.885,6.729,1.680)	К		0,0,0,12	К		1,0,0,10												
0,0,0,9	Si	(0.000,2.991,2.270)	К		0,0,0,13	К		0,0,0,4	К		0,0,0,3	К		-1,0,0,7						
0,0,0,10	Si	(0.000,5.981,2.270)	К		0,0,0,14	К		0,0,0,3	К		0,0,0,5	К		-1,0,0,8						
0,0,0,11	Si	(2.590,1.495,2.270)	К		0,0,0,15	К		0,0,0,7	К		0,0,0,6	К		0,0,0,4						
0,0,0,12	Al	(2.590,7.477,2.270)	К		0,0,0,16	К		0,0,0,8	К		0,1,0,6	А		0,0,0,5						
0,0,0,13	О	(0.000,2.991,3.870)	К		0,0,0,9	И	-0.5	0,0,0,19	И	-0.5	0,0,0,20									
0,0,0,14	О	(0.000,5.981,3.870)	К		0,0,0,10	И	-0.5	0,0,0,20	И	-0.5	-1,0,0,22									
0,0,0,15	О	(2.590,1.495,3.870)	К		0,0,0,11	И	-0.5	0,0,0,19	И	-0.5	0,0,0,21									
0,0,0,16	О	(2.590,7.477,3.870)	К		0,0,0,12	И	-0.5	0,1,0,21	И	-0.5	0,0,0,22									
0,0,0,17	ОН	(0.000,0.000,3.870)	И	-0.5	-1,0,0,21	И	-0.5	0,0,0,19												
0,0,0,18	ОН	(2.590,4.486,3.870)	И	-0.5	0,0,0,20	И	-0.5	0,0,0,22												
0,0,0,19	Al	(0.863,1.495,4.970)	И	0.5	0,0,0,17	И	0.5	0,-1,0,26	И	0.5	0,0,0,13	И	0.5	0,0,0,15	И	0.5	0,0,0,25	И	0.5	0,0,0,27
0,0,0,20	Al	(0.863,4.486,4.970)	И	0.5	0,0,0,18	И	0.5	0,0,0,13	И	0.5	0,0,0,14	И	0.5	0,0,0,23	И	0.5	0,0,0,25	И	0.5	0,0,0,28
0,0,0,21	Al	(3.453,0.000,4.970)	И	0.5	1,0,0,17	И	0.5	0,-1,0,16	И	0.5	0,-1,0,26	И	0.5	0,0,0,15	И	0.5	1,-1,0,24	И	0.5	1,0,0,27
0,0,0,22	Al	(3.453,5.981,4.970)	И	0.5	0,0,0,18	И	0.5	0,0,0,16	И	0.5	0,0,0,28	И	0.5	1,0,0,14	И	0.5	1,0,0,23	И	0.5	1,0,0,24
0,0,0,23	О	(-0.863,4.486,6.070)	К		0,0,0,29	И	-0.5	0,0,0,20	И	-0.5	-1,0,0,22									
0,0,0,24	О	(-0.863,7.477,6.070)	К		0,0,0,30	И	-0.5	-1,1,0,21	И	-0.5	-1,0,0,22									
0,0,0,25	О	(1.727,2.991,6.070)	К		0,0,0,31	И	-0.5	0,0,0,19	И	-0.5	0,0,0,20									
0,0,0,26	О	(1.727,8.972,6.070)	К		0,0,0,32	И	-0.5	0,1,0,19	И	-0.5	0,1,0,21									
0,0,0,27	ОН	(-0.863,1.495,6.070)	И	-0.5	0,0,0,19	И	-0.5	-1,0,0,21												
0,0,0,28	ОН	(1.727,5.981,6.070)	И	-0.5	0,0,0,20	И	-0.5	0,0,0,22												
0,0,0,29	Si	(-0.863,4.486,7.670)	К		0,0,0,23	К		0,0,0,33	К		0,0,0,34	К		-1,0,0,37						
0,0,0,30	Si	(-0.863,7.477,7.670)	К		0,0,0,24	К		0,0,0,33	К		0,0,0,35	К		-1,0,0,38						
0,0,0,31	Al	(1.727,2.991,7.670)	К		0,0,0,25	А		0,0,0,34	К		0,0,0,36	К		0,0,0,37						
0,0,0,32	Si	(1.727,8.972,7.670)	К		0,0,0,26	К		0,0,0,35	К		0,0,0,38	К		0,1,0,36						
0,0,0,33	О	(-0.863,5.981,8.260)	К		0,0,0,29	К		0,0,0,30												
0,0,0,34	О	(0.432,3.738,8.260)	Д		0,0,0,31	К		0,0,0,29	И	-0.5	0,0,0,39	И	-0.5	0,0,0,40						
0,0,0,35	О	(0.432,8.224,8.260)	К		0,0,0,32	К		0,0,0,30												
0,0,0,36	О	(1.727,1.495,8.260)	К		0,0,0,31	К		0,-1,0,32												
0,0,0,37	О	(3.022,3.738,8.260)	К		0,0,0,31	К		1,0,0,29												
0,0,0,38	О	(3.022,8.224,8.260)	К		0,0,0,32	К		1,0,0,30												
0,0,0,39	К	(-0.863,1.495,9.940)	И	0.5	0,-1,0,43	И	0.5	0,0,0,34												

Таблица 1. Атомы элементарной ячейки слюды мусковит и химические связи между ними

Индекс атома	Сорт атома	Радиус-вектор, 10 ⁻¹⁰ м	Связи атома																	
			1			2			3			4			5			6		
			Тип взаимодей- ствия	Параме- тр ион- ной связи	Индекс атома	Тип взаимодей- ствия	Параме- тр ион- ной связи	Индекс атома	Тип взаимодей- ствия	Параме- тр ион- ной связи	Индекс атома	Тип взаимодей- ствия	Параме- тр ион- ной связи	Индекс атома	Тип взаимодей- ствия	Параме- тр ион- ной связи	Индекс атома	Тип взаимодей- ствия	Параме- тр ион- ной связи	Индекс атома
0,0,0,40	К	(1.727,5.981,9.940)	И	0.5	0,0,0,34	И	0.5	0,0,0,43												
0,0,0,41	О	(-0.863,5.981,11.620)	К		0,0,0,47	К		0,0,0,48												
0,0,0,42	О	(0.432,3.738,11.620)	К		0,0,0,49	К		0,0,0,47												
0,0,0,43	О	(0.432,8.224,11.620)	Д		0,0,0,50	К		0,0,0,48	И	-0.5	0,1,0,39	И	-0.5	0,0,0,40						
0,0,0,44	О	(1.727,1.495,11.620)	К		0,0,0,49	К		0,-1,0,50												
0,0,0,45	О	(3.022,3.738,11.620)	К		0,0,0,49	К		1,0,0,47												
0,0,0,46	О	(3.022,8.224,11.620)	К		0,0,0,50	К		1,0,0,48												
0,0,0,47	Si	(-0.863,4.486,12.210)	К		0,0,0,51	К		0,0,0,41	К		0,0,0,42	К		-1,0,0,45						
0,0,0,48	Si	(-0.863,7.477,12.210)	К		0,0,0,52	К		0,0,0,41	К		0,0,0,43	К		-1,0,0,46						
0,0,0,49	Si	(1.727,2.991,12.210)	К		0,0,0,53	К		0,0,0,45	К		0,0,0,42	К		0,0,0,44						
0,0,0,50	Al	(1.727,8.972,12.210)	К		0,0,0,54	К		0,0,0,46	А		0,0,0,43	К		0,1,0,44						
0,0,0,51	О	(-0.863,4.486,13.810)	К		0,0,0,47	И	-0.5	0,0,0,57	И	-0.5	-1,0,0,60									
0,0,0,52	О	(-0.863,7.477,13.810)	К		0,0,0,48	И	-0.5	0,0,0,57	И	-0.5	0,0,0,58									
0,0,0,53	О	(1.727,2.991,13.810)	К		0,0,0,49	И	-0.5	0,0,0,59	И	-0.5	0,0,0,60									
0,0,0,54	О	(1.727,8.972,13.810)	К		0,0,0,50	И	-0.5	0,0,0,58	И	-0.5	0,1,0,59									
0,0,0,55	OH	(-0.863,1.495,13.810)	И	-0.5	-1,0,0,59	И	-0.5	0,-1,0,58												
0,0,0,56	OH	(1.727,5.981,13.810)	И	-0.5	0,0,0,57	И	-0.5	0,0,0,60												
0,0,0,57	Al	(0.000,5.981,14.910)	И	0.5	0,0,0,56	И	0.5	0,0,0,51	И	0.5	0,0,0,52	И	0.5	0,0,0,62	И	0.5	0,0,0,64	И	0.5	0,0,0,66
0,0,0,58	Al	(0.000,8.972,14.910)	И	0.5	0,1,0,55	И	0.5	0,0,0,52	И	0.5	0,0,0,54	И	0.5	0,0,0,64	И	0.5	0,1,0,63	И	0.5	0,1,0,65
0,0,0,59	Al	(2.590,1.495,14.910)	И	0.5	1,0,0,55	И	0.5	0,-1,0,54	И	0.5	0,0,0,53	И	0.5	0,0,0,63	И	0.5	1,0,0,61	И	0.5	1,0,0,65
0,0,0,60	Al	(2.590,4.486,14.910)	И	0.5	0,0,0,56	И	0.5	0,0,0,53	И	0.5	0,0,0,66	И	0.5	1,0,0,51	И	0.5	1,0,0,61	И	0.5	1,0,0,62
0,0,0,61	О	(-1.727,2.991,16.010)	К		0,0,0,67	И	-0.5	-1,0,0,59	И	-0.5	-1,0,0,60									
0,0,0,62	О	(-1.727,5.981,16.010)	К		0,0,0,68	И	-0.5	0,0,0,57	И	-0.5	-1,0,0,60									
0,0,0,63	О	(0.863,1.495,16.010)	К		0,0,0,69	И	-0.5	0,-1,0,58	И	-0.5	0,0,0,59									
0,0,0,64	О	(0.863,7.477,16.010)	К		0,0,0,70	И	-0.5	0,0,0,57	И	-0.5	0,0,0,58									
0,0,0,65	OH	(-1.727,0.000,16.010)	И	-0.5	0,-1,0,58	И	-0.5	-1,0,0,59												
0,0,0,66	OH	(0.863,4.486,16.010)	И	-0.5	0,0,0,57	И	-0.5	0,0,0,60												
0,0,0,67	Si	(-1.727,2.991,17.610)	К		0,0,0,61	К		0,0,0,72	К		0,0,0,71	К		-1,0,0,75						
0,0,0,68	Si	(-1.727,5.981,17.610)	К		0,0,0,62	К		0,0,0,71	К		0,0,0,73	К		-1,0,0,76						
0,0,0,69	Al	(0.863,1.495,17.610)	К		0,0,0,63	К		0,0,0,74	К		0,0,0,75	А		0,0,0,72						
0,0,0,70	Si	(0.863,7.477,17.610)	К		0,0,0,64	К		0,1,0,74	К		0,0,0,76	К		0,0,0,73						
0,0,0,71	О	(-1.727,4.486,18.200)	К		0,0,0,68	К		0,0,0,67												
0,0,0,72	О	(-0.432,2.243,18.200)	К		0,0,0,67	Д		0,0,0,69	И	-0.5	0,0,1,1	И	-0.5	0,0,1,2						
0,0,0,73	О	(-0.432,6.729,18.200)	К		0,0,0,68	К		0,0,0,70												
0,0,0,74	О	(0.863,0.000,18.200)	К		0,-1,0,70	К		0,0,0,69												
0,0,0,75	О	(2.158,2.243,18.200)	К		0,0,0,69	К		1,0,0,67												
0,0,0,76	О	(2.158,6.729,18.200)	К		0,0,0,70	К		1,0,0,68												

Методы вычисления энергии кристалла и его оптимизации в приближении парного взаимодействия, используя соответствующие потенциалы способны вычислять энергетические характеристики структуры и проводить ее релаксацию [1].

Это исходная модель. Внося дефекты замещения в ее элементарную ячейку с последующей минимизацией энергии, мы рассчитываем структуры других минералов группы слюды.

Таблица 2 – Условные обозначения в таблице 1

Обозначение	Описание
И	Ионная связь (меру разделения заряда характеризует параметр ионной связи)
К	Ковалентная связь
Д	Донорно-акцепторная связь, выступает в роли донора
А	Донорно-акцепторная связь, выступает в роли акцептора

Флогопит

Флогопит $K(Mg, Fe^{+2})_3[Si_3AlO_{10}][F, OH]_2$, сингония моноклинная; моноклинно-призматический в.с. L^2PC , Пр.гр. $C/2c(C_{2h}^6)$.

$a_0 = 5,32; b_0 = 9,21; c_0 = 20,48; \beta = 100^\circ 12'$. Точнее флогопит - это целая группа слюды, отличающихся отношением Mg к Fe. Но термин флогопит применяется для обозначения крайнего члена группы $KMg_3[Si_3AlO_{10}][OH]_2$ (Рисунок 2).

Элементарная ячейка флогопита повторяет ячейку слюды мусковит ($KAl_2[AlSi_3O_{10}][OH]_2$) с немного измененными длинами и углами кристаллографических осей. Кроме того, атомы алюминия не входившие в тетраэдрический слой заменены магнием. Причем магний заполняет все полости, в отличие от атомов алюминия в мусковите которые находились лишь в 2/3 возможных положений. Таким образом, пространственное расположение атомов в кристалле практически аналогично мусковиту. После совершения указанной замены атомов в элементарной ячейке слюды мусковит, ее атомарный состав будет соответствовать флогопиту. Изменения приведены в таблице 3.

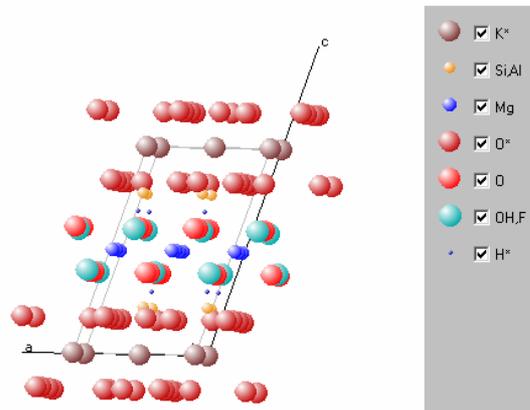


Рис. 2. Условное изображение структуры слюды флогопит [4].

Таблица 3. Отличающиеся атомы в элементарных ячейках слюды мусковит и слюды флогопит		
Индекс атома	Сорт атома в слюде мусковит	Сорт атома в слюде флогопит
0,0,0,19	Al	Mg
0,0,0,20	Al	Mg
0,0,0,21	Al	Mg
0,0,0,22	Al	Mg
0,0,0,57	Al	Mg
0,0,0,58	Al	Mg
0,0,0,59	Al	Mg
0,0,0,60	Al	Mg
0,0,0,77	НЕТ	Mg
0,0,0,78	НЕТ	Mg
0,0,0,79	НЕТ	Mg
0,0,0,80	НЕТ	Mg

Теперь необходимо решить вопрос о координатах атомов внутри ячейки. Координаты замещаемых атомов пока оставим без изменения. А в качестве центров новых атомов примем радиус-вектора представленные в таблице 4. Здесь a и b – длины соответствующих векторов трансляций слюды мусковит. Использование параметров слюды мусковит обусловлено сохранением симметрии структуры на данном этапе.

Таблица 4. Радиус-вектора новых атомов.		
Индекс атома	Сорт атома	Радиус-вектор, 10^{-10} м
0,0,0,77	Mg	($a/6, 5b/6, 4.97$)
0,0,0,78	Mg	($4a/6, 2b/6, 4.97$)
0,0,0,79	Mg	($a/6, b/6, 14.91$)
0,0,0,80	Mg	($4a/6, 4b/6, 14.91$)

Так как замена ионов алюминия на магний не изменила заряд ионного слоя, а только перераспределила его, то все используемые нами для описания химических связей потенциалы взаимодействия сохранят адекватность. В результате данных действий мы получили “черновую” модель слюды флогопит.

В таблице 5 представлено ее описание. Координаты атомов и параметры элементарной ячейки пока остались от мусковита. Количество атомов в элементарной ячейке флогопит больше чем в мусковит, что немного изменило химическое взаимодействие между слоями.

Таблица 5. Атомы элементарной ячейки слюды флогопит и химические связи между ними. Радиус-вектора представлены до минимизации энергии.

Индекс атома	Сорт атома	Радиус-вектор, 10^{-10}м	Связи атома																	
			1			2			3			4			5			6		
			Тип взаимодействия	Параметр ионной связи	Индекс атома	Тип взаимодействия	Параметр ионной связи	Индекс атома	Тип взаимодействия	Параметр ионной связи	Индекс атома	Тип взаимодействия	Параметр ионной связи	Индекс атома	Тип взаимодействия	Параметр ионной связи	Индекс атома	Тип взаимодействия	Параметр ионной связи	Индекс атома
0,0,0,1	K	(0.000,0.000,0.000)	И	1.0	0,-1,0,5															
0,0,0,2	K	(2.660,4.607,0.000)	И	1.0	0,0,0,5															
0,0,0,3	O	(0.000,4.607,1.680)	К		0,0,0,10	К		0,0,0,9												
0,0,0,4	O	(1.330,2.304,1.680)	К		0,0,0,9	К		0,0,0,11												
0,0,0,5	O	(1.330,6.911,1.680)	К		0,0,0,10	Д		0,0,0,12	И	-0.5	0,1,0,1	И	-0.5	0,0,0,2						
0,0,0,6	O	(2.660,0.000,1.680)	К		0,0,0,11	К		0,-1,0,12												
0,0,0,7	O	(3.990,2.304,1.680)	К		0,0,0,11	К		1,0,0,9												
0,0,0,8	O	(3.990,6.911,1.680)	К		0,0,0,12	К		1,0,0,10												
0,0,0,9	Si	(0.000,3.072,2.270)	К		0,0,0,13	К		0,0,0,4	К		0,0,0,3	К		-1,0,0,7						
0,0,0,10	Si	(0.000,6.143,2.270)	К		0,0,0,14	К		0,0,0,3	К		0,0,0,5	К		-1,0,0,8						
0,0,0,11	Si	(2.660,1.536,2.270)	К		0,0,0,15	К		0,0,0,7	К		0,0,0,6	К		0,0,0,4						
0,0,0,12	Al	(2.660,7.679,2.270)	К		0,0,0,16	К		0,0,0,8	К		0,1,0,6	А		0,0,0,5						
0,0,0,13	O	(0.000,3.072,3.870)	К		0,0,0,9	И	-0.3	0,0,0,19	И	-0.3	0,0,0,20	И	-0.3	-1,0,0,78						
0,0,0,14	O	(0.000,6.143,3.870)	К		0,0,0,10	И	-0.3	0,0,0,20	И	-0.3	-1,0,0,22	И	-0.3	0,0,0,77						
0,0,0,15	O	(2.660,1.536,3.870)	К		0,0,0,11	И	-0.3	0,0,0,19	И	-0.3	0,0,0,21	И	-0.3	0,0,0,78						
0,0,0,16	O	(2.660,7.679,3.870)	К		0,0,0,12	И	-0.3	0,1,0,21	И	-0.3	0,0,0,22	И	-0.3	0,0,0,77						
0,0,0,17	OH	(0.000,0.000,3.870)	И	-0.3	-1,0,0,21	И	-0.3	0,-1,0,77	И	-0.3	0,0,0,19									
0,0,0,18	OH	(2.660,4.607,3.870)	И	-0.3	0,0,0,20	И	-0.3	0,0,0,22	И	-0.3	0,0,0,78									
0,0,0,19	Mg	(0.887,1.536,4.970)	И	0.3	0,0,0,17	И	0.3	0,-1,0,26	И	0.3	0,0,0,13	И	0.3	0,0,0,15	И	0.3	0,0,0,25	И	0.3	0,0,0,27
0,0,0,20	Mg	(0.887,4.607,4.970)	И	0.3	0,0,0,18	И	0.3	0,0,0,13	И	0.3	0,0,0,14	И	0.3	0,0,0,23	И	0.3	0,0,0,25	И	0.3	0,0,0,28
0,0,0,21	Mg	(3.547,0.000,4.970)	И	0.3	1,0,0,17	И	0.3	0,-1,0,16	И	0.3	0,-1,0,26	И	0.3	0,0,0,15	И	0.3	1,-1,0,24	И	0.3	1,0,0,27
0,0,0,22	Mg	(3.547,6.143,4.970)	И	0.3	0,0,0,18	И	0.3	0,0,0,16	И	0.3	0,0,0,28	И	0.3	1,0,0,14	И	0.3	1,0,0,23	И	0.3	1,0,0,24
0,0,0,23	O	(-0.887,4.607,6.070)	К		0,0,0,29	И	-0.3	0,0,0,20	И	-0.3	-1,0,0,22	И	-0.3	-1,0,0,78						
0,0,0,24	O	(-0.887,7.679,6.070)	К		0,0,0,30	И	-0.3	-1,1,0,21	И	-0.3	-1,0,0,22	И	-0.3	0,0,0,77						
0,0,0,25	O	(1.773,3.072,6.070)	К		0,0,0,31	И	-0.3	0,0,0,19	И	-0.3	0,0,0,20	И	-0.3	0,0,0,78						
0,0,0,26	O	(1.773,9.215,6.070)	К		0,0,0,32	И	-0.3	0,1,0,19	И	-0.3	0,1,0,21	И	-0.3	0,0,0,77						
0,0,0,27	OH	(-0.887,1.536,6.070)	И	-0.3	0,0,0,19	И	-0.3	-1,0,0,21	И	-0.3	-1,0,0,78									
0,0,0,28	OH	(1.773,6.143,6.070)	И	-0.3	0,0,0,20	И	-0.3	0,0,0,22	И	-0.3	0,0,0,77									
0,0,0,29	Si	(-0.887,4.607,7.670)	К		0,0,0,23	К		0,0,0,33	К		0,0,0,34	К		-1,0,0,37						
0,0,0,30	Si	(-0.887,7.679,7.670)	К		0,0,0,24	К		0,0,0,33	К		0,0,0,35	К		-1,0,0,38						
0,0,0,31	Al	(1.773,3.072,7.670)	К		0,0,0,25	А		0,0,0,34	К		0,0,0,36	К		0,0,0,37						
0,0,0,32	Si	(1.773,9.215,7.670)	К		0,0,0,26	К		0,0,0,35	К		0,0,0,38	К		0,1,0,36						
0,0,0,33	O	(-0.887,6.143,8.260)	К		0,0,0,29	К		0,0,0,30												
0,0,0,34	O	(0.443,3.839,8.260)	Д		0,0,0,31	К		0,0,0,29	И	-0.5	0,0,0,39	И	-0.5	0,0,0,40						
0,0,0,35	O	(0.443,8.447,8.260)	К		0,0,0,32	К		0,0,0,30												
0,0,0,36	O	(1.773,1.536,8.260)	К		0,0,0,31	К		0,-1,0,32												
0,0,0,37	O	(3.103,3.839,8.260)	К		0,0,0,31	К		1,0,0,29												
0,0,0,38	O	(3.103,8.447,8.260)	К		0,0,0,32	К		1,0,0,30												
0,0,0,39	K	(-0.887,1.536,9.940)	И	0.5	0,-1,0,43	И	0.5	0,0,0,34												
0,0,0,40	K	(1.773,6.143,9.940)	И	0.5	0,0,0,34	И	0.5	0,0,0,43												
0,0,0,41	O	(-0.887,6.143,11.620)	К		0,0,0,47	К		0,0,0,48												
0,0,0,42	O	(0.443,3.839,11.620)	К		0,0,0,49	К		0,0,0,47												
0,0,0,43	O	(0.443,8.447,11.620)	Д		0,0,0,50	К		0,0,0,48	И	-0.5	0,1,0,39	И	-0.5	0,0,0,40						
0,0,0,44	O	(1.773,1.536,11.620)	К		0,0,0,49	К		0,-1,0,50												
0,0,0,45	O	(3.103,3.839,11.620)	К		0,0,0,49	К		1,0,0,47												

Таблица 5. Атомы элементарной ячейки слюды флогопит и химические связи между ними. Радиус-вектора представлены до минимизации энергии.

Индекс атома	Сорт атома	Радиус-вектор, 10^{-10}м	Связи атома																	
			1			2			3			4			5			6		
			Тип взаимодействия	Параметр ионной связи	Индекс атома	Тип взаимодействия	Параметр ионной связи	Индекс атома	Тип взаимодействия	Параметр ионной связи	Индекс атома	Тип взаимодействия	Параметр ионной связи	Индекс атома	Тип взаимодействия	Параметр ионной связи	Индекс атома	Тип взаимодействия	Параметр ионной связи	Индекс атома
0,0,0,46	O	(3.103,8.447,11.620)	К		0,0,0,50	К		1,0,0,48												
0,0,0,47	Si	(-0.887,4.607,12.210)	К		0,0,0,51	К		0,0,0,41	К		0,0,0,42	К		-1,0,0,45						
0,0,0,48	Si	(-0.887,7.679,12.210)	К		0,0,0,52	К		0,0,0,41	К		0,0,0,43	К		-1,0,0,46						
0,0,0,49	Si	(1.773,3.072,12.210)	К		0,0,0,53	К		0,0,0,45	К		0,0,0,42	К		0,0,0,44						
0,0,0,50	Al	(1.773,9.215,12.210)	К		0,0,0,54	К		0,0,0,46	А		0,0,0,43	К		0,1,0,44						
0,0,0,51	O	(-0.887,4.607,13.810)	К		0,0,0,47	И	-0,3	0,0,0,57	И	-0,3	-1,0,0,60	И	-0,3	0,0,0,79						
0,0,0,52	O	(-0.887,7.679,13.810)	К		0,0,0,48	И	-0,3	0,0,0,57	И	-0,3	0,0,0,58	И	-0,3	-1,0,0,80						
0,0,0,53	O	(1.773,3.072,13.810)	К		0,0,0,49	И	-0,3	0,0,0,59	И	-0,3	0,0,0,60	И	-0,3	0,0,0,79						
0,0,0,54	O	(1.773,9.215,13.810)	К		0,0,0,50	И	-0,3	0,0,0,58	И	-0,3	0,1,0,59	И	-0,3	0,0,0,80						
0,0,0,55	OH	(-0.887,1.536,13.810)	И	-0,3	-1,0,0,59	И	-0,3	0,-1,0,58	И	-0,3	0,0,0,79									
0,0,0,56	OH	(1.773,6.143,13.810)	И	-0,3	0,0,0,57	И	-0,3	0,0,0,60	И	-0,3	0,0,0,80									
0,0,0,57	Mg	(0.000,6.143,14.910)	И	0,3	0,0,0,56	И	0,3	0,0,0,51	И	0,3	0,0,0,52	И	0,3	0,0,0,62	И	0,3	0,0,0,64	И	0,3	0,0,0,66
0,0,0,58	Mg	(0.000,9.215,14.910)	И	0,3	0,1,0,55	И	0,3	0,0,0,52	И	0,3	0,0,0,54	И	0,3	0,0,0,64	И	0,3	0,1,0,63	И	0,3	0,1,0,65
0,0,0,59	Mg	(2.660,1.536,14.910)	И	0,3	1,0,0,55	И	0,3	0,-1,0,54	И	0,3	0,0,0,53	И	0,3	0,0,0,63	И	0,3	1,0,0,61	И	0,3	1,0,0,65
0,0,0,60	Mg	(2.660,4.607,14.910)	И	0,3	0,0,0,56	И	0,3	0,0,0,53	И	0,3	0,0,0,66	И	0,3	1,0,0,51	И	0,3	1,0,0,61	И	0,3	1,0,0,62
0,0,0,61	O	(-1.773,3.072,16.010)	К		0,0,0,67	И	-0,3	-1,0,0,59	И	-0,3	-1,0,0,60	И	-0,3	0,0,0,79						
0,0,0,62	O	(-1.773,6.143,16.010)	К		0,0,0,68	И	-0,3	0,0,0,57	И	-0,3	-1,0,0,60	И	-0,3	-1,0,0,80						
0,0,0,63	O	(0.887,1.536,16.010)	К		0,0,0,69	И	-0,3	0,-1,0,58	И	-0,3	0,0,0,59	И	-0,3	0,0,0,79						
0,0,0,64	O	(0.887,7.679,16.010)	К		0,0,0,70	И	-0,3	0,0,0,57	И	-0,3	0,0,0,58	И	-0,3	0,0,0,80						
0,0,0,65	OH	(-1.773,0.000,16.010)	И	-0,3	0,-1,0,58	И	-0,3	-1,0,0,59	И	-0,3	-1,-1,0,80									
0,0,0,66	OH	(0.887,4.607,16.010)	И	-0,3	0,0,0,57	И	-0,3	0,0,0,60	И	-0,3	0,0,0,79									
0,0,0,67	Si	(-1.773,3.072,17.610)	К		0,0,0,61	К		0,0,0,72	К		0,0,0,71	К		-1,0,0,75						
0,0,0,68	Si	(-1.773,6.143,17.610)	К		0,0,0,62	К		0,0,0,71	К		0,0,0,73	К		-1,0,0,76						
0,0,0,69	Al	(0.887,1.536,17.610)	К		0,0,0,63	К		0,0,0,74	К		0,0,0,75	А		0,0,0,72						
0,0,0,70	Si	(0.887,7.679,17.610)	К		0,0,0,64	К		0,1,0,74	К		0,0,0,76	К		0,0,0,73						
0,0,0,71	O	(-1.773,4.607,18.200)	К		0,0,0,68	К		0,0,0,67												
0,0,0,72	O	(-0.443,2.304,18.200)	К		0,0,0,67	Д		0,0,0,69												
0,0,0,73	O	(-0.443,6.911,18.200)	К		0,0,0,68	К		0,0,0,70												
0,0,0,74	O	(0.887,0.000,18.200)	К		0,-1,0,70	К		0,0,0,69												
0,0,0,75	O	(2.217,2.304,18.200)	К		0,0,0,69	К		1,0,0,67												
0,0,0,76	O	(2.217,6.911,18.200)	К		0,0,0,70	К		1,0,0,68												
0,0,0,77	Mg	(0.887,7.679,4.970)	И	0,3	0,1,0,17	И	0,3	0,0,0,28	И	0,3	0,0,0,14	И	0,3	0,0,0,16	И	0,3	0,0,0,24	И	0,3	0,0,0,26
0,0,0,78	Mg	(3.547,3.072,4.970)	И	0,3	0,0,0,18	И	0,3	1,0,0,27	И	0,3	0,0,0,15	И	0,3	0,0,0,25	И	0,3	1,0,0,13	И	0,3	1,0,0,23
0,0,0,79	Mg	(0.000,3.072,14.910)	И	0,3	0,0,0,55	И	0,3	0,0,0,66	И	0,3	0,0,0,51	И	0,3	0,0,0,53	И	0,3	0,0,0,61	И	0,3	0,0,0,63
0,0,0,80	Mg	(2.660,7.679,14.910)	И	0,3	0,0,0,56	И	0,3	1,1,0,65	И	0,3	0,0,0,54	И	0,3	0,0,0,64	И	0,3	1,0,0,52	И	0,3	1,0,0,62

Изменим, вектора трансляций полученной модели, так чтобы они соответствовали флогопиту. Новые вектора примут вид:

$$\vec{a} = (5.32, 0, 0), \vec{b} = (0, 9.21, 0), \vec{c} = (-1.77, 0, 20.16)$$

Теперь достаточно запустить процедуру минимизации энергии заложенную в нашу модель. Она в приближении парного взаимодействия уменьшит (минимизирует) энергию кристалла по координатам атомов и параметрам кристаллографических осей, что теоретически должно дать истинные координаты атомов. Результаты преобразования приведены ниже в таблице.

Таблица 6. Изменение координат атомов в процессе минимизации			
Индекс атома	Сорт атома	Радиус-вектор до минимизации, 10 ⁻¹⁰ м	Радиус-вектор после минимизации, 10 ⁻¹⁰ м
0,0,0,1	K	(0.000,0.000,0.000)	(0.000,0.000,0.000)
0,0,0,2	K	(2.660,4.607,0.000)	(2.678,4.632,0.077)
0,0,0,3	O	(0.000,4.607,1.680)	(0.008,4.615,1.705)
0,0,0,4	O	(1.330,2.304,1.680)	(1.337,2.315,1.707)
0,0,0,5	O	(1.330,6.911,1.680)	(1.329,6.909,1.677)
0,0,0,6	O	(2.660,0.000,1.680)	(2.660,-0.000,1.679)
0,0,0,7	O	(3.990,2.304,1.680)	(3.988,2.302,1.677)
0,0,0,8	O	(3.990,6.911,1.680)	(3.988,6.909,1.677)
0,0,0,9	Si	(0.000,3.072,2.270)	(-0.002,3.069,2.264)
0,0,0,10	Si	(0.000,6.143,2.270)	(-0.002,6.139,2.264)
0,0,0,11	Si	(2.660,1.536,2.270)	(2.657,1.534,2.264)
0,0,0,12	Al	(2.660,7.679,2.270)	(2.660,7.679,2.270)
0,0,0,13	O	(0.000,3.072,3.870)	(-0.001,3.070,3.868)
0,0,0,14	O	(0.000,6.143,3.870)	(-0.001,6.142,3.868)
0,0,0,15	O	(2.660,1.536,3.870)	(2.659,1.535,3.868)
0,0,0,16	O	(2.660,7.679,3.870)	(2.661,7.681,3.873)
0,0,0,17	OH	(0.000,0.000,3.870)	(0.000,-0.000,3.870)
0,0,0,18	OH	(2.660,4.607,3.870)	(2.660,4.607,3.870)
0,0,0,19	Mg	(0.887,1.536,4.970)	(0.887,1.536,4.970)
0,0,0,20	Mg	(0.887,4.607,4.970)	(0.887,4.607,4.970)
0,0,0,21	Mg	(3.547,0.000,4.970)	(3.547,0.000,4.970)
0,0,0,22	Mg	(3.547,6.143,4.970)	(3.547,6.143,4.970)
0,0,0,23	O	(-0.887,4.607,6.070)	(-0.887,4.606,6.068)
0,0,0,24	O	(-0.887,7.679,6.070)	(-0.887,7.677,6.068)
0,0,0,25	O	(1.773,3.072,6.070)	(1.775,3.073,6.073)
0,0,0,26	O	(1.773,9.215,6.070)	(1.773,9.213,6.068)
0,0,0,27	OH	(-0.887,1.536,6.070)	(-0.887,1.536,6.070)
0,0,0,28	OH	(1.773,6.143,6.070)	(1.773,6.143,6.070)
0,0,0,29	Si	(-0.887,4.607,7.670)	(-0.889,4.604,7.662)
0,0,0,30	Si	(-0.887,7.679,7.670)	(-0.889,7.675,7.662)
0,0,0,31	Al	(1.773,3.072,7.670)	(1.773,3.071,7.668)
0,0,0,32	Si	(1.773,9.215,7.670)	(1.771,9.210,7.662)
0,0,0,33	O	(-0.887,6.143,8.260)	(-0.887,6.141,8.256)
0,0,0,34	O	(0.443,3.839,8.260)	(0.442,3.838,8.256)
0,0,0,35	O	(0.443,8.447,8.260)	(0.442,8.445,8.256)
0,0,0,36	O	(1.773,1.536,8.260)	(1.772,1.535,8.256)
0,0,0,37	O	(3.103,3.839,8.260)	(3.102,3.838,8.256)
0,0,0,38	O	(3.103,8.447,8.260)	(3.102,8.445,8.256)
0,0,0,39	K	(-0.887,1.536,9.940)	(-0.887,1.536,9.940)
0,0,0,40	K	(1.773,6.143,9.940)	(1.773,6.143,9.940)
0,0,0,41	O	(-0.887,6.143,11.620)	(-0.888,6.141,11.616)
0,0,0,42	O	(0.443,3.839,11.620)	(0.442,3.838,11.616)
0,0,0,43	O	(0.443,8.447,11.620)	(0.442,8.444,11.616)
0,0,0,44	O	(1.773,1.536,11.620)	(1.773,1.535,11.619)
0,0,0,45	O	(3.103,3.839,11.620)	(3.102,3.838,11.616)
0,0,0,46	O	(3.103,8.447,11.620)	(3.102,8.444,11.615)
0,0,0,47	Si	(-0.887,4.607,12.210)	(-0.889,4.604,12.201)
0,0,0,48	Si	(-0.887,7.679,12.210)	(-0.889,7.675,12.201)
0,0,0,49	Si	(1.773,3.072,12.210)	(1.771,3.069,12.201)
0,0,0,50	Al	(1.773,9.215,12.210)	(1.773,9.215,12.210)
0,0,0,51	O	(-0.887,4.607,13.810)	(-0.887,4.606,13.807)
0,0,0,52	O	(-0.887,7.679,13.810)	(-0.887,7.677,13.807)
0,0,0,53	O	(1.773,3.072,13.810)	(1.773,3.070,13.807)
0,0,0,54	O	(1.773,9.215,13.810)	(1.774,9.216,13.814)
0,0,0,55	OH	(-0.887,1.536,13.810)	(-0.887,1.536,13.810)
0,0,0,56	OH	(1.773,6.143,13.810)	(1.773,6.143,13.810)
0,0,0,57	Mg	(0.000,6.143,14.910)	(-0.000,6.143,14.910)
0,0,0,58	Mg	(0.000,9.215,14.910)	(-0.000,9.214,14.910)
0,0,0,59	Mg	(2.660,1.536,14.910)	(2.660,1.536,14.910)
0,0,0,60	Mg	(2.660,4.607,14.910)	(2.660,4.607,14.910)
0,0,0,61	O	(-1.773,3.072,16.010)	(-1.774,3.070,16.007)
0,0,0,62	O	(-1.773,6.143,16.010)	(-1.774,6.142,16.007)
0,0,0,63	O	(0.887,1.536,16.010)	(0.888,1.537,16.015)
0,0,0,64	O	(0.887,7.679,16.010)	(0.886,7.677,16.007)
0,0,0,65	OH	(-1.773,0.000,16.010)	(-1.773,-0.000,16.010)
0,0,0,66	OH	(0.887,4.607,16.010)	(0.887,4.607,16.010)
0,0,0,67	Si	(-1.773,3.072,17.610)	(-1.775,3.069,17.599)
0,0,0,68	Si	(-1.773,6.143,17.610)	(-1.775,6.139,17.599)
0,0,0,69	Al	(0.887,1.536,17.610)	(0.886,1.536,17.607)
0,0,0,70	Si	(0.887,7.679,17.610)	(0.884,7.675,17.600)
0,0,0,71	O	(-1.773,4.607,18.200)	(-1.774,4.606,18.195)

Таблица 6. Изменение координат атомов в процессе минимизации			
Индекс атома	Сорт атома	Радиус-вектор до минимизации, 10^{-10} м	Радиус-вектор после минимизации, 10^{-10} м
0,0,0,72	O	(-0.443,2.304,18.200)	(-0.444,2.302,18.195)
0,0,0,73	O	(-0.443,6.911,18.200)	(-0.444,6.909,18.195)
0,0,0,74	O	(0.887,0.000,18.200)	(0.885,-0.001,18.194)
0,0,0,75	O	(2.217,2.304,18.200)	(2.215,2.302,18.194)
0,0,0,76	O	(2.217,6.911,18.200)	(2.215,6.909,18.195)
0,0,0,77	Mg	(0.887,7.679,4.970)	(0.887,7.679,4.970)
0,0,0,78	Mg	(3.547,3.072,4.970)	(3.547,3.072,4.970)
0,0,0,79	Mg	(0.000,3.072,14.910)	(-0.000,3.072,14.910)
0,0,0,80	Mg	(2.660,7.679,14.910)	(2.660,7.679,14.910)

Кроме положений атомов изменились и вектора трансляций. Теперь они имеют вид: $\vec{a} = (5.20, 0, 0)$, $\vec{b} = (-0.05, 9.13, 0)$, $\vec{c} = (-1.83, -0.08, 19.94)$

Таким образом, нами получена модель кристалла слюды флогопит, для которой рассчитана кристаллическая структура, соответствующая минимуму энергии в нашей модели кристалла. Новая ячейка приобрела некоторую устойчивую конфигурацию, более симметричную, чем исходная. Под симметричностью здесь понимается “правильность” окружения атомов. Но необходимо отметить, что мы минимизировали кристалл обладающий “излишней подвижностью”, т.е. минимизация проводилась и по смещениям атомов и по параметрам элементарной ячейки. Это было сделано сознательно, для исключения произвола, при выборе управляющих параметров функции минимизации. Если бы мы ограничились лишь релаксацией атомов, то смещения были бы более значительными.

Парагонит

Парагонит $Na_2Al_4[Si_6Al_2O_{20}][OH]_4$,
Пр.гр. $C/2c$,
 $a_0 = 5,13; b_0 = 8,89; c_0 \cdot \sin \beta = 18,99; \beta = 95^\circ$.

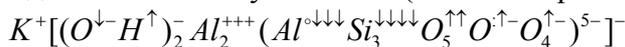
Химический состав парагонита отличается от химического состава мусковита ($KAl_2[AlSi_3O_{10}][OH]_2$) тем, что в парагоните калий замещен натрием (рисунок 3).

Замещение иона калия меньшим ионом натрия сказывается в уменьшении элементарной ячейки парагонита по сравнению с ячейкой мусковита, особенно в направлении z, но сходство между структурами парагонита и мусковита очевидно.

Внешние электронные оболочки обоих атомов идентичны и содержат по одному не спаренному s-электрону. Этот электрон, отрываясь от атома натрия, превращает его в катион. Таким образом, химические связи в парагоните можно выразить следующей формулой:



Идентичность с мусковитом (связи которого представлены ниже) не вызывает сомнений.



С точки зрения нашей модели межатомное взаимодействие в этих двух кристаллах одинаково. Лишь небольшие различия в геометрии элементарных ячеек (различие параметров решетки) могут незначительно повлиять на размещение атомов. Но качественных изменений ожидать не следует.

Построение модели данного кристалла проведем по той же методике, что и в предыдущем пункте со слюдой флогопит. Модифицируем похожую модель элементарной ячейки

Парагонит (PARAGONITE), [2], 2M(1), $NaAl_2 [Si_3Al]O_{10}(OH)_2$

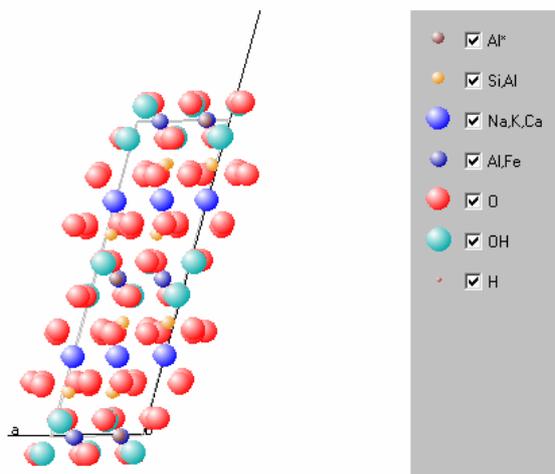


Рис. 3. Условное изображение структуры слюды парагонит [4].

мусковит заменой атомов калия на натрий. После этого откорректируем вектора трансляций в соответствии с параметрами парагонита. Они примут вид:

$$\vec{a} = (5.13, 0, 0), \vec{b} = (0, 8.88, 0), \vec{c} = (-1.71, 0, 18.99)$$

Теперь над полученной моделью проведем процедуру минимизации энергии кристалла. Результаты работы этой процедуры представлены в таблице ниже. Так как химические связи остались идентичны мусковиту, а изменились только радиус-вектора, то в качестве результатов приведены лишь последние. Как видно, значимых изменений в геометрии не последовало. Атомы равномерно “растянулись” в пространстве элементарной ячейки, в результате чего она приобрела большую “симметричность” (относительно координат атомов) чем исходная.

Таблица 7. Координата атомов в слюде парагонит после минимизации		
Индекс атома	Сорт атома	Радиус-вектор, 10^{-10}м
0,0,0,1	Na	(0.000,0.000,0.000)
0,0,0,2	Na	(2.562,4.439,-0.015)
0,0,0,3	O	(-0.001,4.442,1.676)
0,0,0,4	O	(1.281,2.219,1.675)
0,0,0,5	O	(1.283,6.665,1.682)
0,0,0,6	O	(2.565,0.000,1.681)
0,0,0,7	O	(3.847,2.221,1.679)
0,0,0,8	O	(3.848,6.665,1.682)
0,0,0,9	Si	(-0.001,2.961,2.268)
0,0,0,10	Si	(0.001,5.926,2.273)
0,0,0,11	Si	(2.564,1.480,2.268)
0,0,0,12	Al	(2.567,7.407,2.273)
0,0,0,13	O	(-0.000,2.962,3.869)
0,0,0,14	O	(0.000,5.924,3.871)
0,0,0,15	O	(2.565,1.481,3.869)
0,0,0,16	O	(2.565,7.405,3.871)
0,0,0,17	OH	(0.000,-0.000,3.870)
0,0,0,18	OH	(2.565,4.443,3.870)
0,0,0,19	Al	(0.855,1.481,4.970)
0,0,0,20	Al	(0.855,4.443,4.970)
0,0,0,21	Al	(3.420,-0.000,4.970)
0,0,0,22	Al	(3.420,5.924,4.970)
0,0,0,23	O	(-0.855,4.443,6.071)
0,0,0,24	O	(-0.855,7.404,6.069)
0,0,0,25	O	(1.710,2.962,6.071)
0,0,0,26	O	(1.710,8.885,6.069)
0,0,0,27	OH	(-0.855,1.481,6.070)
0,0,0,28	OH	(1.710,5.924,6.070)
0,0,0,29	Si	(-0.854,4.444,7.674)
0,0,0,30	Si	(-0.856,7.403,7.668)
0,0,0,31	Al	(1.711,2.963,7.674)
0,0,0,32	Si	(1.709,8.884,7.668)
0,0,0,33	O	(-0.855,5.924,8.261)
0,0,0,34	O	(0.428,3.703,8.262)
0,0,0,35	O	(0.427,8.144,8.259)
0,0,0,36	O	(1.710,1.481,8.261)
0,0,0,37	O	(2.993,3.703,8.262)
0,0,0,38	O	(2.992,8.144,8.259)
0,0,0,39	Na	(-0.855,1.481,9.940)
0,0,0,40	Na	(1.710,5.924,9.940)
0,0,0,41	O	(-0.855,5.924,11.621)
0,0,0,42	O	(0.427,3.702,11.619)
0,0,0,43	O	(0.428,8.146,11.623)
0,0,0,44	O	(1.710,1.481,11.621)
0,0,0,45	O	(2.992,3.702,11.619)
0,0,0,46	O	(2.993,8.146,11.623)
0,0,0,47	Si	(-0.856,4.442,12.207)
0,0,0,48	Si	(-0.854,7.407,12.215)
0,0,0,49	Si	(1.709,2.961,12.207)
0,0,0,50	Al	(1.711,8.888,12.215)
0,0,0,51	O	(-0.855,4.442,13.809)
0,0,0,52	O	(-0.855,7.405,13.811)
0,0,0,53	O	(1.710,2.962,13.809)
0,0,0,54	O	(1.710,8.886,13.811)
0,0,0,55	OH	(-0.855,1.481,13.810)
0,0,0,56	OH	(1.710,5.924,13.810)
0,0,0,57	Al	(-0.000,5.924,14.910)

Таблица 7. Координата атомов в слюде парагонит после минимизации		
Индекс атома	Сорт атома	Радиус-вектор, 10^{-10}м
0,0,0,58	Al	(-0.000,8.885,14.910)
0,0,0,59	Al	(2.565,1.481,14.910)
0,0,0,60	Al	(2.565,4.443,14.910)
0,0,0,61	O	(-1.710,2.962,16.011)
0,0,0,62	O	(-1.710,5.923,16.009)
0,0,0,63	O	(0.855,1.481,16.011)
0,0,0,64	O	(0.855,7.404,16.009)
0,0,0,65	OH	(-1.710,-0.000,16.010)
0,0,0,66	OH	(0.855,4.443,16.010)
0,0,0,67	Si	(-1.709,2.963,17.616)
0,0,0,68	Si	(-1.711,5.923,17.607)
0,0,0,69	Al	(0.856,1.482,17.616)
0,0,0,70	Si	(0.854,7.403,17.607)
0,0,0,71	O	(-1.710,4.443,18.201)
0,0,0,72	O	(-0.427,2.222,18.203)
0,0,0,73	O	(-0.428,6.663,18.198)
0,0,0,74	O	(0.855,0.000,18.201)
0,0,0,75	O	(2.138,2.222,18.203)
0,0,0,76	O	(2.137,6.663,18.198)

Новые вектора трансляций равны:

$$\vec{a} = (5.15, 0, 0), \vec{b} = (0, 8.89, 0), \vec{c} = (-1.70, 0.01, 19.53)$$

Как и в случае с предыдущим минералом из-за особенностей алгоритма минимизации одновременно изменились и вектора трансляций и координаты атомов внутри ячейки, что весьма своеобразно отразилось на геометрии ячейки полученной модели кристалла слюды парагонит.

Маргарит

Маргарит $Ca_2Al_4[Si_4Al_4O_{20}][OH]_4$, Маргарит (MARGARITE), [1], **DN**, (Ca,Na)_{1.87}
(Al,Fe,Mg,Li)_{4.4}(Si,Al)₈O₂₀(OH)₄

Пр.гр. $C/2c$ (рисунок 4).

В отличие от обычных слюд в Маргарите главный межслоевой катион представлен Ca (кальцием), а не K (калием) или Na (натрием). Его появление в решетке компенсируется увеличением отношения $[Al]^4 : Si$. В отличие от предыдущих образцов Маргарит растворим в H_2SO_4 . По этому его использование в качестве модельного кристалла весьма спорно. Но так как моделью не накладываются ограничения мешающие моделированию, то вычислительный эксперимент можно провести. Это покажет реакцию модели на довольно сильные изменения химического взаимодействия в кристалле.

Изменение кремнекислородных слоев приведет к изменению ковалентных связей в нашей модели. Которые в отличие от ионных, чувствительны к сортам взаимодействующих атомов. Но можно заметить, что в слюдах ковалентное взаимодействие локализовано внутри слоев. Точнее, оно происходит только внутри кремнекислородных и алюмокислородных тетраэдров. Они идентичны для всех слюд. Единственное, что будет меняться в зависимости от типа слюды, это соотношение между ними. Таким образом, модель химического взаимодействия, используемые потенциалы и рассчитанные для слюды мусковит параметры потенциалов без каких либо изменений могут быть использованы для любого минерала группы слюд.

Параметры кристаллографических осей маргарита и мусковита ($a_0 = 5,19; b_0 = 9,04; c_0 = 20,08; \beta = 95^\circ 30'$) очень близки (как и всех слюд). Количество атомов

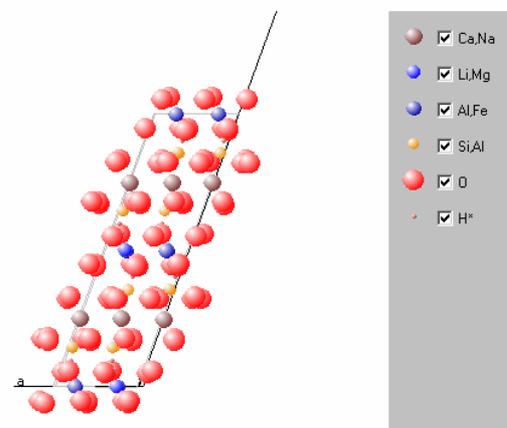
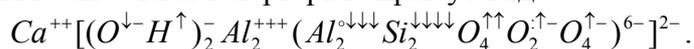


Рис. 4. Условное изображение структуры слюды маргарит [4].

на элементарную ячейку одинаково. Координаты атомов внутри элементарной ячейки, без учета их сортов, также похожи. Изменение координат атомов и векторов трансляций затруднений вызвать не должно, так как эта процедура проделывалась уже много раз. Но в слюде маргарит в результате изменения соотношения $[Al]^4 : Si$ и замены катиона K^+ на Ca^{++} должны будут измениться химические связи как внутри слоев, так и между ними, что и составит основную сложность при построении модели этого минералла.

Если все связи мусковита можно указать в следующей формуле:

$K^+[(O^{\downarrow-}H^{\uparrow})_2 Al_2^{+++} (Al_2^{\circ\downarrow\downarrow\downarrow} Si_3^{\downarrow\downarrow\downarrow} O_5^{\uparrow\uparrow} O^{\uparrow-} O_4^{\uparrow-})^{5-}]^-$ то увеличение заряда катиона в маргарите приведет к перераспределению заряда и увеличению числа донорно-акцепторных связей. Химические связи в маргарите примут вид:



Если не учитывать смещения атомов, а только взаимодействие между ними, то “первоначальный” (до релаксации) шаблон элементарной ячейки слюды маргарит будет следующим:

Таблица 8. Атомы элементарной ячейки слюды маргарит и химические связи между ними.

Индекс атома	Сорт атома	Радиус-вектор, 10^{-10} м	Связи атома																	
			1			2			3			4			5			6		
			Тип взаимодействия	Параметр ионной связи	Индекс атома	Тип взаимодействия	Параметр ионной связи	Индекс атома	Тип взаимодействия	Параметр ионной связи	Индекс атома	Тип взаимодействия	Параметр ионной связи	Индекс атома	Тип взаимодействия	Параметр ионной связи	Индекс атома	Тип взаимодействия	Параметр ионной связи	Индекс атома
0,0,0,1	Ca	(0.000,0.000,0.000)	И	2.0	0,0,-1,72															
0,0,0,2	Ca	(2.565,4.443,0.000)	И	0.7	0,0,-1,71	И	0.7	0,0,-1,72	И	0.7	1,0,-1,71									
0,0,0,3	O	(0.000,4.443,1.680)	К		0,0,0,10	К		0,0,0,9												
0,0,0,4	O	(1.283,2.221,1.680)	К		0,0,0,9	К		0,0,0,11												
0,0,0,5	O	(1.283,6.664,1.680)	К		0,0,0,10	Д		0,0,0,12												
0,0,0,6	O	(2.565,0.000,1.680)	К		0,0,0,11	К		0,-1,0,12												
0,0,0,7	O	(3.847,2.221,1.680)	К		0,0,0,11	К		1,0,0,9												
0,0,0,8	O	(3.847,6.664,1.680)	К		0,0,0,12	Д		1,0,0,10												
0,0,0,9	Si	(0.000,2.962,2.270)	К		0,0,0,13	К		0,0,0,4	К		0,0,0,3	К		-1,0,0,7						
0,0,0,10	Al	(0.000,5.924,2.270)	К		0,0,0,14	К		0,0,0,3	К		0,0,0,5	А		-1,0,0,8						
0,0,0,11	Si	(2.565,1.481,2.270)	К		0,0,0,15	К		0,0,0,7	К		0,0,0,6	К		0,0,0,4						
0,0,0,12	Al	(2.565,7.405,2.270)	К		0,0,0,16	К		0,0,0,8	К		0,1,0,6	А		0,0,0,5						
0,0,0,13	O	(0.000,2.962,3.870)	К		0,0,0,9	И	-0.5	0,0,0,19	И	-0.5	0,0,0,20									
0,0,0,14	O	(0.000,5.924,3.870)	К		0,0,0,10	И	-0.5	0,0,0,20	И	-0.5	-1,0,0,22									
0,0,0,15	O	(2.565,1.481,3.870)	К		0,0,0,11	И	-0.5	0,0,0,19	И	-0.5	0,0,0,21									
0,0,0,16	O	(2.565,7.405,3.870)	К		0,0,0,12	И	-0.5	0,1,0,21	И	-0.5	0,0,0,22									
0,0,0,17	OH	(0.000,0.000,3.870)	И	-0.5	-1,0,0,21	И	-0.5	0,0,0,19												
0,0,0,18	OH	(2.565,4.443,3.870)	И	-0.5	0,0,0,20	И	-0.5	0,0,0,22												
0,0,0,19	Al	(0.855,1.481,4.970)	И	0.5	0,0,0,17	И	0.5	0,-1,0,26	И	0.5	0,0,0,13	И	0.5	0,0,0,15	И	0.5	0,0,0,25	И	0.5	0,0,0,27
0,0,0,20	Al	(0.855,4.443,4.970)	И	0.5	0,0,0,18	И	0.5	0,0,0,13	И	0.5	0,0,0,14	И	0.5	0,0,0,23	И	0.5	0,0,0,25	И	0.5	0,0,0,28
0,0,0,21	Al	(3.420,0.000,4.970)	И	0.5	1,0,0,17	И	0.5	0,-1,0,16	И	0.5	0,-1,0,26	И	0.5	0,0,0,15	И	0.5	1,-1,0,24	И	0.5	1,0,0,27
0,0,0,22	Al	(3.420,5.924,4.970)	И	0.5	0,0,0,18	И	0.5	0,0,0,16	И	0.5	0,0,0,28	И	0.5	1,0,0,14	И	0.5	1,0,0,23	И	0.5	1,0,0,24
0,0,0,23	O	(-0.855,4.443,6.070)	К		0,0,0,29	И	-0.5	0,0,0,20	И	-0.5	-1,0,0,22									
0,0,0,24	O	(-0.855,7.405,6.070)	К		0,0,0,30	И	-0.5	-1,1,0,21	И	-0.5	-1,0,0,22									
0,0,0,25	O	(1.710,2.962,6.070)	К		0,0,0,31	И	-0.5	0,0,0,19	И	-0.5	0,0,0,20									
0,0,0,26	O	(1.710,8.885,6.070)	К		0,0,0,32	И	-0.5	0,1,0,19	И	-0.5	0,1,0,21									
0,0,0,27	OH	(-0.855,1.481,6.070)	И	-0.5	0,0,0,19	И	-0.5	-1,0,0,21												
0,0,0,28	OH	(1.710,5.924,6.070)	И	-0.5	0,0,0,20	И	-0.5	0,0,0,22												
0,0,0,29	Al	(-0.855,4.443,7.670)	К		0,0,0,23	А		0,0,0,33	К		0,0,0,34	К		-1,0,0,37						
0,0,0,30	Si	(-0.855,7.405,7.670)	К		0,0,0,24	К		0,0,0,33	К		0,0,0,35	К		-1,0,0,38						
0,0,0,31	Al	(1.710,2.962,7.670)	К		0,0,0,25	А		0,0,0,34	К		0,0,0,36	К		0,0,0,37						
0,0,0,32	Si	(1.710,8.885,7.670)	К		0,0,0,26	К		0,0,0,35	К		0,0,0,38	К		0,1,0,36						
0,0,0,33	O	(-0.855,5.924,8.260)	Д		0,0,0,29	К		0,0,0,30	И	-0.5	0,0,0,40	И	-0.5	-1,0,0,40						
0,0,0,34	O	(0.427,3.702,8.260)	Д		0,0,0,31	К		0,0,0,29	И	-0.5	0,0,0,39	И	-0.5	0,0,0,40						
0,0,0,35	O	(0.427,8.145,8.260)	К		0,0,0,32	К		0,0,0,30												
0,0,0,36	O	(1.710,1.481,8.260)	К		0,0,0,31	К		0,-1,0,32												
0,0,0,37	O	(2.992,3.702,8.260)	К		0,0,0,31	К		1,0,0,29												
0,0,0,38	O	(2.992,8.145,8.260)	К		0,0,0,32	К		1,0,0,30												
0,0,0,39	Ca	(-0.855,1.481,9.940)	И	1.0	0,-1,0,43	И	1.0	0,0,0,34												
0,0,0,40	Ca	(1.710,5.924,9.940)	И	0.3	0,0,0,33	И	0.3	0,0,0,34	И	0.3	0,0,0,41	И	0.3	0,0,0,43	И	0.3	1,0,0,33	И	0.3	1,0,0,41

0,0,0,41	O	(-0.855,5.924,11.620)	K		0,0,0,47	Д		0,0,0,48	И	-0.5	0,0,0,40	И	-0.5	-1,0,0,40						
0,0,0,42	O	(0.427,3.702,11.620)	K		0,0,0,49	К		0,0,0,47												
0,0,0,43	O	(0.427,8.145,11.620)	Д		0,0,0,50	К		0,0,0,48	И	-0.5	0,1,0,39	И	-0.5	0,0,0,40						
0,0,0,44	O	(1.710,1.481,11.620)	К		0,0,0,49	К		0,-1,0,50												
0,0,0,45	O	(2.992,3.702,11.620)	К		0,0,0,49	К		1,0,0,47												
0,0,0,46	O	(2.992,8.145,11.620)	К		0,0,0,50	К		1,0,0,48												
0,0,0,47	Si	(-0.855,4.443,12.210)	К		0,0,0,51	К		0,0,0,41	К		0,0,0,42	К		-1,0,0,45						
0,0,0,48	Al	(-0.855,7.405,12.210)	К		0,0,0,52	А		0,0,0,41	К		0,0,0,43	К		-1,0,0,46						
0,0,0,49	Si	(1.710,2.962,12.210)	К		0,0,0,53	К		0,0,0,45	К		0,0,0,42	К		0,0,0,44						
0,0,0,50	Al	(1.710,8.885,12.210)	К		0,0,0,54	К		0,0,0,46	А		0,0,0,43	К		0,1,0,44						
0,0,0,51	O	(-0.855,4.443,13.810)	К		0,0,0,47	И	-0.5	0,0,0,57	И	-0.5	-1,0,0,60									
0,0,0,52	O	(-0.855,7.405,13.810)	К		0,0,0,48	И	-0.5	0,0,0,57	И	-0.5	0,0,0,58									
0,0,0,53	O	(1.710,2.962,13.810)	К		0,0,0,49	И	-0.5	0,0,0,59	И	-0.5	0,0,0,60									
0,0,0,54	O	(1.710,8.885,13.810)	К		0,0,0,50	И	-0.5	0,0,0,58	И	-0.5	0,1,0,59									
0,0,0,55	OH	(-0.855,1.481,13.810)	И	-0.5	-1,0,0,59	И	-0.5	0,-1,0,58												
0,0,0,56	OH	(1.710,5.924,13.810)	И	-0.5	0,0,0,57	И	-0.5	0,0,0,60												
0,0,0,57	Al	(0.000,5.924,14.910)	И	0.5	0,0,0,56	И	0.5	0,0,0,51	И	0.5	0,0,0,52	И	0.5	0,0,0,62	И	0.5	0,0,0,64	И	0.5	0,0,0,66
0,0,0,58	Al	(0.000,8.885,14.910)	И	0.5	0,1,0,55	И	0.5	0,0,0,52	И	0.5	0,0,0,54	И	0.5	0,0,0,64	И	0.5	0,1,0,63	И	0.5	0,1,0,65
0,0,0,59	Al	(2.565,1.481,14.910)	И	0.5	1,0,0,55	И	0.5	0,-1,0,54	И	0.5	0,0,0,53	И	0.5	0,0,0,63	И	0.5	1,0,0,61	И	0.5	1,0,0,65
0,0,0,60	Al	(2.565,4.443,14.910)	И	0.5	0,0,0,56	И	0.5	0,0,0,53	И	0.5	0,0,0,66	И	0.5	1,0,0,51	И	0.5	1,0,0,61	И	0.5	1,0,0,62
0,0,0,61	O	(-1.710,2.962,16.010)	К		0,0,0,67	И	-0.5	-1,0,0,59	И	-0.5	-1,0,0,60									
0,0,0,62	O	(-1.710,5.924,16.010)	К		0,0,0,68	И	-0.5	0,0,0,57	И	-0.5	-1,0,0,60									
0,0,0,63	O	(0.855,1.481,16.010)	К		0,0,0,69	И	-0.5	0,-1,0,58	И	-0.5	0,0,0,59									
0,0,0,64	O	(0.855,7.405,16.010)	К		0,0,0,70	И	-0.5	0,0,0,57	И	-0.5	0,0,0,58									
0,0,0,65	OH	(-1.710,0.000,16.010)	И	-0.5	0,-1,0,58	И	-0.5	-1,0,0,59												
0,0,0,66	OH	(0.855,4.443,16.010)	И	-0.5	0,0,0,57	И	-0.5	0,0,0,60												
0,0,0,67	Al	(-1.710,2.962,17.610)	К		0,0,0,61	К		0,0,0,72	А		0,0,0,71	К		-1,0,0,75						
0,0,0,68	Si	(-1.710,5.924,17.610)	К		0,0,0,62	К		0,0,0,71	К		0,0,0,73	К		-1,0,0,76						
0,0,0,69	Al	(0.855,1.481,17.610)	К		0,0,0,63	К		0,0,0,74	К		0,0,0,75	А		0,0,0,72						
0,0,0,70	Si	(0.855,7.405,17.610)	К		0,0,0,64	К		0,1,0,74	К		0,0,0,76	К		0,0,0,73						
0,0,0,71	O	(-1.710,4.443,18.200)	К		0,0,0,68	Д		0,0,0,67	И	-0.5	0,0,1,2	И	-0.5	-1,0,1,2						
0,0,0,72	O	(-0.428,2.221,18.200)	К		0,0,0,67	Д		0,0,0,69	И	-0.5	0,0,1,1	И	-0.5	0,0,1,2						
0,0,0,73	O	(-0.428,6.664,18.200)	К		0,0,0,68	К		0,0,0,70												
0,0,0,74	O	(0.855,0.000,18.200)	К		0,-1,0,70	К		0,0,0,69												
0,0,0,75	O	(2.137,2.221,18.200)	К		0,0,0,69	К		1,0,0,67												
0,0,0,76	O	(2.137,6.664,18.200)	К		0,0,0,70	К		1,0,0,68												

В этой таблице приведены не оптимизированные координаты атомов. Потому что пока не описаны химические связи между атомами нельзя описать потенциалы взаимодействия, которые необходимы для работы процедуры минимизации.

После перестройки химических связей выполняем процедуру минимизации, результаты работы которой приведены ниже. Вектора трансляций значительных изменений не претерпели и по этому не показаны.

Таблица 9. Координаты атомов в слюде маргарит после минимизации		
Индекс атома	Сорт атома	Радиус-вектор, 10 ⁻¹⁰ м
0,0,0,1	Ca	(0.000,0.000,0.000)
0,0,0,2	Ca	(2.562,4.439,-0.015)
0,0,0,3	O	(-0.001,4.442,1.676)
0,0,0,4	O	(1.281,2.219,1.675)
0,0,0,5	O	(1.283,6.665,1.682)
0,0,0,6	O	(2.565,0.000,1.681)
0,0,0,7	O	(3.847,2.221,1.679)
0,0,0,8	O	(3.848,6.665,1.682)
0,0,0,9	Si	(-0.001,2.961,2.268)
0,0,0,10	Al	(0.001,5.926,2.273)
0,0,0,11	Si	(2.564,1.480,2.268)
0,0,0,12	Al	(2.567,7.407,2.273)
0,0,0,13	O	(-0.000,2.962,3.869)
0,0,0,14	O	(0.000,5.924,3.871)
0,0,0,15	O	(2.565,1.481,3.869)
0,0,0,16	O	(2.565,7.405,3.871)
0,0,0,17	OH	(0.000,-0.000,3.870)
0,0,0,18	OH	(2.565,4.443,3.870)
0,0,0,19	Al	(0.855,1.481,4.970)
0,0,0,20	Al	(0.855,4.443,4.970)
0,0,0,21	Al	(3.420,-0.000,4.970)
0,0,0,22	Al	(3.420,5.924,4.970)
0,0,0,23	O	(-0.855,4.443,6.071)
0,0,0,24	O	(-0.855,7.404,6.069)
0,0,0,25	O	(1.710,2.962,6.071)
0,0,0,26	O	(1.710,8.885,6.069)
0,0,0,27	OH	(-0.855,1.481,6.070)
0,0,0,28	OH	(1.710,5.924,6.070)
0,0,0,29	Al	(-0.854,4.444,7.674)
0,0,0,30	Si	(-0.856,7.403,7.668)
0,0,0,31	Al	(1.711,2.963,7.674)
0,0,0,32	Si	(1.709,8.884,7.668)
0,0,0,33	O	(-0.855,5.924,8.261)
0,0,0,34	O	(0.428,3.703,8.262)
0,0,0,35	O	(0.427,8.144,8.259)
0,0,0,36	O	(1.710,1.481,8.261)
0,0,0,37	O	(2.993,3.703,8.262)
0,0,0,38	O	(2.992,8.144,8.259)
0,0,0,39	Ca	(-0.855,1.481,9.940)
0,0,0,40	Ca	(1.710,5.924,9.940)
0,0,0,41	O	(-0.855,5.924,11.621)
0,0,0,42	O	(0.427,3.702,11.619)
0,0,0,43	O	(0.428,8.146,11.623)
0,0,0,44	O	(1.710,1.481,11.621)
0,0,0,45	O	(2.992,3.702,11.619)
0,0,0,46	O	(2.993,8.146,11.623)
0,0,0,47	Si	(-0.856,4.442,12.207)
0,0,0,48	Al	(-0.854,7.407,12.215)
0,0,0,49	Si	(1.709,2.961,12.207)
0,0,0,50	Al	(1.711,8.888,12.215)
0,0,0,51	O	(-0.855,4.442,13.809)
0,0,0,52	O	(-0.855,7.405,13.811)
0,0,0,53	O	(1.710,2.962,13.809)
0,0,0,54	O	(1.710,8.886,13.811)
0,0,0,55	OH	(-0.855,1.481,13.810)
0,0,0,56	OH	(1.710,5.924,13.810)
0,0,0,57	Al	(-0.000,5.924,14.910)
0,0,0,58	Al	(-0.000,8.885,14.910)
0,0,0,59	Al	(2.565,1.481,14.910)
0,0,0,60	Al	(2.565,4.443,14.910)
0,0,0,61	O	(-1.710,2.962,16.011)
0,0,0,62	O	(-1.710,5.923,16.009)
0,0,0,63	O	(0.855,1.481,16.011)
0,0,0,64	O	(0.855,7.404,16.009)
0,0,0,65	OH	(-1.710,-0.000,16.010)
0,0,0,66	OH	(0.855,4.443,16.010)
0,0,0,67	Al	(-1.709,2.963,17.616)
0,0,0,68	Si	(-1.711,5.923,17.607)
0,0,0,69	Al	(0.856,1.482,17.616)
0,0,0,70	Si	(0.854,7.403,17.607)
0,0,0,71	O	(-1.710,4.443,18.201)
0,0,0,72	O	(-0.427,2.222,18.203)
0,0,0,73	O	(-0.428,6.663,18.198)
0,0,0,74	O	(0.855,0.000,18.201)
0,0,0,75	O	(2.138,2.222,18.203)
0,0,0,76	O	(2.137,6.663,18.198)

Клинтонит и ксантофиллит

Клинтонит и ксантофиллит
 $Ca_2(Mg_{4,6}Al_{1,4})[Si_{2,5}Al_{5,5}O_{20}][OH]_4$, сингония моноклинная; Пр.гр. $C/2c$ или $Cm, C2/m$.

$$a_0 = 5,21; b_0 = 9,02; c_0 \cdot \sin \beta = 19,24; \beta = 95^\circ$$

$$\text{и } a_0 = 5,21; b_0 = 9,02; c_0 = 9,81; \beta = 100^\circ 05'$$

соответственно.

Нерастворимы в кислотах. Подобно тому как Маргарит связан с мусковитом посредством замены К на Са, так и клинтонит можно рассматривать в качестве кальциевых аналогов флогопита.

Более высокое по сравнению с маргаритом содержание $[Al]^{4+}$ и $[Mg]^{6+}$, как и следовало ожидать, обуславливает большие значения параметров элементарной ячейки. Однако, несмотря на очень большое количество Al в тетраэдрических положениях, параметры a и b клинтонита неожиданно значительно меньше, чем у флогопита.

Рентгеноструктурные исследования хрупких слюд этой группы свидетельствуют, что в одних случаях они обладают двухслойной, а в других – однослойной структурой. Литературные данные основываются на работе [2] и являются довольно обобщенными. Для моделирования лучше воспользоваться другим, более точным описанием данного минерала [3] рисунки 5 и 6.

Для моделирования мы выберем структурную формулу



$$a_0 = 5,197; b_0 = 9,002; c_0 = 9,812; \beta = 100^\circ 32'$$

Элементарная ячейка данной слюды по объему вдвое меньше, чем у всех рассмотренных выше минералов. Поэтому ее структура намного проще и для понимания не представляет особых сложностей. На одну элементарную ячейку приходится две формульные единицы. Следует отметить, что клинтонит имеет структуру 1M и простое наложение слоев. В отличие от уже рассмотренных слюд, оно осуществляется по схеме показанной на рисунке 7. Это важно учитывать при размещении атомов в модели кристалла.

Рассмотрим химическое взаимодействие между атомами слюды клинтонит. Известно, что атомы центрального слоя (Mg, Al, Fe) могут быть представлены следующими катионами $Mg^{+2}, Al^{+3}, Fe^{+2}, Fe^{+3}$. Тогда все связи клинтонита мож-

Клинтонит (CLINTONITE), [1], 1M, Ca $(Mg, Al, Fe)_3[Al_3Si]O_{10}(OH)_2$

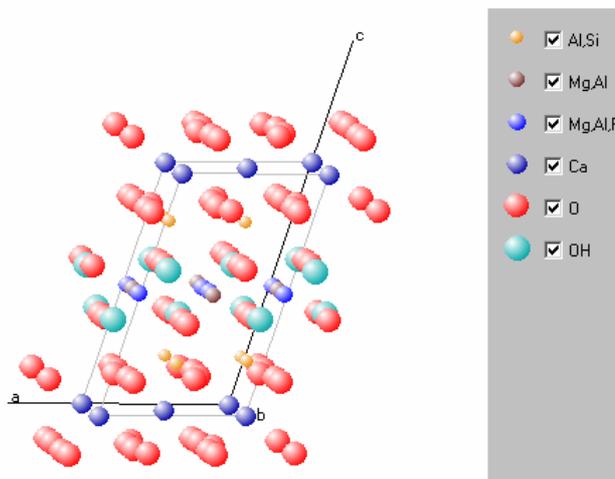


Рис. 5. Условное изображение структуры слюды клинтонит [4].

Клинтонит (CLINTONITE), [2], $Ca_{1,10}Mg_{2,18}Al_{0,72}[Al_{2,95}Si_{1,05}]O_{10}(OH)_2$

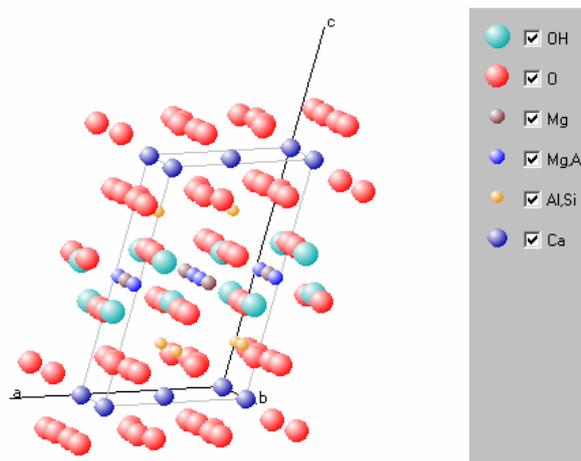


Рис. 6. Условное изображение структуры слюды клинтонит [4].

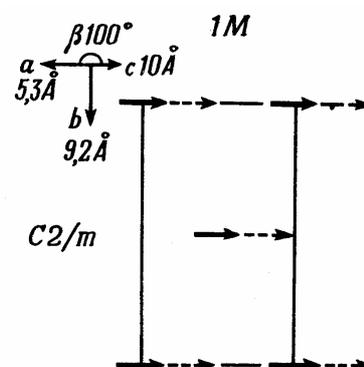


Рис. 7. Наложение слоев в клинтоните

но представить формулой: $Ca^{++}(XX_3)^{+7}[Al_3^{\circ\downarrow\downarrow\downarrow}Si^{\downarrow\downarrow\downarrow}O_3^{\uparrow-}O_4^{\uparrow-}O_3^{\uparrow\uparrow}][OH]_2^-$. Где XX обозначает слой катионов. Как видно его суммарный заряд должен быть +7. Это возможно лишь в том случае, когда 2/3 ионов имеют заряд +2, а 1/3 заряд +3. То есть слой должен состоять на 2/3 из ионов Mg^{+2}, Fe^{+2} и на 1/3 из ионов Al^{+3}, Fe^{+3} .

Применительно к нашей модели сорт иона не имеет решающего значения, важен лишь его заряд. По этому при моделировании ионы Mg^{+2}, Fe^{+2} и Al^{+3}, Fe^{+3} будем считать идентичными и различать не будем. Таким образом, несколько упрощенная формула слюды с указанием химических связей примет вид: $Ca^{++}(Mg_2^{+2}Al^{+3})[Al_3^{\circ\downarrow\downarrow\downarrow}Si^{\downarrow\downarrow\downarrow}O_3^{\uparrow-}O_4^{\uparrow-}O_3^{\uparrow\uparrow}][OH]_2^-$.

Данным выражением и будем пользоваться при построении модели кристалла.

Для упрощения процесса построения модели возьмем уже созданную нами модель элементарной ячейки слюды. Только не слюды мусковит как в предыдущих случаях, а флогопит $KMg_3[Si_3AlO_{10}][OH]_2$. Заметим, что количество атомов в формулах этих двух слюд одинаково. Также близко их пространственное расположение (сорта атомов и их химические связи пока не учитываем). Таким образом, нам будет наиболее удобно получить модель слюды клинтонит именно из слюды флогопит.

Как было сказано выше, в элементарной ячейке клинтонита всего две формульных единицы, в отличии от остальных рассмотренных слюд, у которых на элементарную ячейку приходилось четыре формульных единицы. По этому необходимо удалить половину атомов из модели ячейки флогопита (40 из 80). Удаляются все атомы, начиная со второго слоя калия (К) и выше. После этой процедуры в элементарной ячейке должно остаться только 40 атомов. Далее необходимо заменить все атомы калия (К) на атомы кальция (Са). При замене необходимо также откорректировать заряд иона, так как у атомов калия и кальция они отличаются (Ca^{++}, K^+). После этого заменим 2/3 атомов кремния (Si) в тетраэдрических положениях на атомы алюминия (Al). При замене необходимо откорректировать химические связи. То есть, одна ковалентная связь превратиться в донорно-акцепторную, а атом кислорода играющий роль донора, превратиться в отрицательный ион. И еще одна замена. Изменим 1/3 часть атомов магния (Mg) на атомы алюминия (Al) одновременно откорректировав их заряд (Al^{+++}).

Теперь атомарный состав и химическое взаимодействие в полученной модели и в слюде клинтонит соответствуют друг другу.

Осталось немного откорректировать координаты атомов. Кроме векторов трансляций влияние на геометрию ячейки будет оказывать параметр модели, отвечающий за сдвиги слоев при наложении. Так как у клинтонита структура 1M (рисунок 7), то смещение при наложении примет вид $\left(\frac{a}{3}, 0\right)$. Вектора трансляций установим в соответствии с параметрами элементарной ячейки клинтонита $a_0 = 5,197; b_0 = 9,002; c_0 = 9,812; \beta = 100^\circ 32'$.

Теперь у нас есть модель слюды клинтонит. Единственный ее дефект - это не совсем "правильное" расположение атомов внутри ячейки. Так как их относительные координаты остались от слюды флогопит. Это можно легко исправить, запустив нашу процедуру релаксации атомов. Она минимизирует энергию кристалла, смещая атомы и меняя компоненты векторов трансляций. Так как атомов на ячейку вдвое меньше, чем в остальных слюдах то этот процесс будет проходить намного быстрее. В результате атомы должны принять свои "правильные" положения. Оценить "правильность" положений довольно сложно, но соображениям симметрии полученный кристалл вполне удовлетворяет.

Описание этой элементарной ячейки приведено в таблице 10.

Таблица 10. Атомы элементарной ячейки слюды клинтонит и химические связи между ними.

Индекс атома	Сорт атома	Радиус-вектор, 10^{-10} м	Связи атома																	
			1			2			3			4			5			6		
			Тип взаимодействия	Параметр ионной связи	Индекс атома	Тип взаимодействия	Параметр ионной связи	Индекс атома	Тип взаимодействия	Параметр ионной связи	Индекс атома	Тип взаимодействия	Параметр ионной связи	Индекс атома	Тип взаимодействия	Параметр ионной связи	Индекс атома	Тип взаимодействия	Параметр ионной связи	Индекс атома
0,0,0,1	Ca	(0.000,0.000,0.000)	И	0.3	-1,0,0,6	И	0.3	0,-1,-1,35	И	0.3	0,-1,0,5	И	0.3	0,0,-1,34	И	0.3	0,0,0,4	И	0.3	0,0,0,6
0,0,0,2	Ca	(2.595,4.495,-0.000)	И	0.3	0,0,-1,33	И	0.3	0,0,-1,34	И	0.3	0,0,-1,35	И	0.3	0,0,0,4	И	0.3	0,0,0,5	И	0.3	1,0,-1,33
0,0,0,3	O	(-0.000,4.495,1.680)	К		0,0,0,10	К		0,0,0,9												
0,0,0,4	O	(1.297,2.247,1.680)	К		0,0,0,9	Д		0,0,0,11	И	-0.5	0,0,0,1	И	-0.5	0,0,0,2						
0,0,0,5	O	(1.298,6.742,1.680)	К		0,0,0,10	Д		0,0,0,12	И	-0.5	0,1,0,1	И	-0.5	0,0,0,2						
0,0,0,6	O	(2.595,0.000,1.680)	Д		0,0,0,11	К		0,-1,0,12	И	-0.5	1,0,0,1	И	-0.5	0,0,0,1						
0,0,0,7	O	(3.892,2.247,1.680)	К		0,0,0,11	К		1,0,0,9												
0,0,0,8	O	(3.893,6.742,1.680)	К		0,0,0,12	К		1,0,0,10												
0,0,0,9	Si	(-0.000,2.996,2.270)	К		0,0,0,13	К		0,0,0,4	К		0,0,0,3	К		-1,0,0,7						
0,0,0,10	Al	(0.000,5.993,2.270)	К		0,0,0,14	К		0,0,0,3	К		0,0,0,5	К		-1,0,0,8						
0,0,0,11	Al	(2.595,1.498,2.270)	К		0,0,0,15	К		0,0,0,7	А		0,0,0,6	А		0,0,0,4						
0,0,0,12	Al	(2.595,7.491,2.270)	К		0,0,0,16	К		0,0,0,8	К		0,1,0,6	А		0,0,0,5						
0,0,0,13	O	(-0.000,2.996,3.870)	К		0,0,0,9	И	-0.4	0,0,0,19	И	-0.3	0,0,0,20	И	-0.3	-1,0,0,40						
0,0,0,14	O	(0.000,5.993,3.870)	К		0,0,0,10	И	-0.3	0,0,0,20	И	-0.4	-1,0,0,22	И	-0.3	0,0,0,39						
0,0,0,15	O	(2.595,1.498,3.870)	К		0,0,0,11	И	-0.4	0,0,0,19	И	-0.3	0,0,0,21	И	-0.3	0,0,0,40						
0,0,0,16	O	(2.595,7.491,3.870)	К		0,0,0,12	И	-0.3	0,1,0,21	И	-0.4	0,0,0,22	И	-0.3	0,0,0,39						
0,0,0,17	OH	(-0.000,-0.000,3.870)	И	-0.3	-1,0,0,21	И	-0.3	0,-1,0,39	И	-0.4	0,0,0,19									
0,0,0,18	OH	(2.595,4.495,3.870)	И	-0.3	0,0,0,20	И	-0.4	0,0,0,22	И	-0.3	0,0,0,40									
0,0,0,19	Al	(0.865,1.498,4.970)	И	0.5	0,0,0,17	И	0.5	-1,0,0,25	И	0.5	0,0,0,13	И	0.5	0,0,0,15	И	0.5	0,0,0,23	И	0.5	0,0,0,27
0,0,0,20	Mg	(0.865,4.495,4.970)	И	0.3	0,0,0,18	И	0.3	-1,0,0,28	И	0.3	0,0,0,13	И	0.3	0,0,0,14	И	0.3	0,0,0,23	И	0.3	0,0,0,24
0,0,0,21	Mg	(3.460,0.000,4.970)	И	0.3	1,0,0,17	И	0.3	0,-1,0,16	И	0.3	0,-1,0,26	И	0.3	0,0,0,15	И	0.3	0,0,0,25	И	0.3	0,0,0,27
0,0,0,22	Al	(3.460,5.993,4.970)	И	0.5	0,0,0,18	И	0.5	0,0,0,16	И	0.5	0,0,0,24	И	0.5	0,0,0,26	И	0.5	0,0,0,28	И	0.5	1,0,0,14
0,0,0,23	O	(1.730,2.996,6.070)	К		0,0,0,29	И	-0.4	0,0,0,19	И	-0.3	0,0,0,20	И	-0.3	0,0,0,40						
0,0,0,24	O	(1.730,5.993,6.070)	К		0,0,0,30	И	-0.3	0,0,0,20	И	-0.4	0,0,0,22	И	-0.3	0,0,0,39						
0,0,0,25	O	(4.325,1.498,6.070)	К		0,0,0,31	И	-0.4	1,0,0,19	И	-0.3	0,0,0,21	И	-0.3	0,0,0,40						

Таблица 10. Атомы элементарной ячейки слюды клинтонит и химические связи между ними.

Индекс атома	Сорт атома	Радиус-вектор, 10^{-10} м	Связи атома																	
			1			2			3			4			5			6		
			Тип взаимодействия	Параметр ионной связи	Индекс атома	Тип взаимодействия	Параметр ионной связи	Индекс атома	Тип взаимодействия	Параметр ионной связи	Индекс атома	Тип взаимодействия	Параметр ионной связи	Индекс атома	Тип взаимодействия	Параметр ионной связи	Индекс атома	Тип взаимодействия	Параметр ионной связи	Индекс атома
0,0,0,26	O	(4.325,7.491,6.070)	К		0,0,0,32	И	-0.3	0,1,0,21	И	-0.4	0,0,0,22	И	-0.3	1,0,0,39						
0,0,0,27	OH	(1.730,-0.000,6.070)	И	-0.4	0,0,0,19	И	-0.3	0,0,0,21	И	-0.3	0,-1,0,39									
0,0,0,28	OH	(4.325,4.495,6.070)	И	-0.3	1,0,0,20	И	-0.4	0,0,0,22	И	-0.3	0,0,0,40									
0,0,0,29	Si	(1.730,2.996,7.670)	К		0,0,0,23	К		0,0,0,33	К		0,0,0,34	К		-1,0,0,37						
0,0,0,30	Al	(1.730,5.993,7.670)	К		0,0,0,24	А		0,0,0,33	К		0,0,0,35	К		-1,0,0,38						
0,0,0,31	Al	(4.325,1.498,7.670)	К		0,0,0,25	А		0,0,0,34	К		0,0,0,36	К		0,0,0,37						
0,0,0,32	Al	(4.325,7.491,7.670)	К		0,0,0,26	А		0,0,0,35	К		0,0,0,38	К		0,1,0,36						
0,0,0,33	O	(1.730,4.495,8.260)	К		0,0,0,29	Д		0,0,0,30	И	-0.5	0,0,1,2	И	-0.5	-1,0,1,2						
0,0,0,34	O	(3.027,2.247,8.260)	Д		0,0,0,31	К		0,0,0,29	И	-0.5	0,0,1,1	И	-0.5	0,0,1,2						
0,0,0,35	O	(3.028,6.742,8.260)	Д		0,0,0,32	К		0,0,0,30	И	-0.5	0,1,1,1	И	-0.5	0,0,1,2						
0,0,0,36	O	(4.325,0.000,8.260)	К		0,0,0,31	К		0,-1,0,32												
0,0,0,37	O	(5.622,2.247,8.260)	К		0,0,0,31	К		1,0,0,29												
0,0,0,38	O	(5.623,6.742,8.260)	К		0,0,0,32	К		1,0,0,30												
0,0,0,39	Mg	(0.865,7.491,4.970)	И	0.3	0,1,0,17	И	0.3	0,1,0,27	И	0.3	-1,0,0,26	И	0.3	0,0,0,14	И	0.3	0,0,0,16	И	0.3	0,0,0,24
0,0,0,40	Mg	(3.460,2.996,4.970)	И	0.3	0,0,0,18	И	0.3	0,0,0,28	И	0.3	0,0,0,15	И	0.3	0,0,0,23	И	0.3	0,0,0,25	И	0.3	1,0,0,13

Литература

1. Ursu I., Alexandrescu R., Draganescu V., Mihailescu I.N., Morjan I., Prochorov A.M., Karlov N.V., Kravchenko V.A., Orlov A.N., Petrov Yu.N. On molecular orientability on a fine porous surface. // J. Physique. – 1985. V. 46. P. 883-888.
2. Бразовская Н.В., Бразовский В.Е., Троицкий В.С. Модель кристалла слюды-мусковит. // Горизонты образования. 2002, в. 4, с. 3-22. <http://edu.secna.ru/main/review/2002/n4/braz03.pdf>
3. W.A. Deer, R.A.Howie. Rock-forming minerals. Vol. 3 Sheet Silicates, Longmans, 1962.
4. <http://database.iem.ac.ru/mincryst/rus/>

Получено Редакцией 24.08.06