

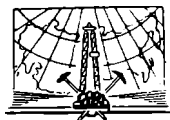
А.Г. БУЛАХ

РАСЧЕТ
ФОРМУЛ
МИНЕРАЛОВ

ИЗДАТЕЛЬСТВО «НЕДРА»

А. Г. БУЛАХ

РУКОВОДСТВО И ТАБЛИЦЫ ДЛЯ РАСЧЕТА ФОРМУЛ МИНЕРАЛОВ



ИЗДАТЕЛЬСТВО «НЕДРА»
МОСКВА 1964

УДК 541.6.001.24

ПРЕДИСЛОВИЕ

Успешное развитие в последние десятилетия рентгеноструктурных исследований дало минералогии основу для классификации природных химических соединений и новый материал для изучения химии земных процессов. В настоящее время почти каждый геолог при детальном изучении условий образования месторождений прибегает к химическому исследованию слагающих их минералов, чтобы путем сопоставления состава минерала с его кристаллохимическими особенностями получить материал для более полных генетических построений. Пересчет результатов химического анализа минералов на кристаллохимические формулы является в этом случае одним из необходимых условий для выяснения закономерностей поведения химических элементов в процессах минералообразования, особенностей их вхождения в кристаллические решетки различного типа и характера связи между химическим составом и физическими свойствами минерала.

Между тем, до сих пор отсутствует какое-либо методическое пособие, излагающее в систематическом виде методы пересчета результатов химического анализа минералов на их формулы. Имеющиеся в литературе сведения о применении подобных расчетов очень кратки и разрозненны. Общий ход вычислений описан М. Хеєм (Hey, 1939, 1950), А. Гровсом (1953), А. Шюллером (Schüller, 1954), Л. Бери и Б. Мэзоном (Berry a Mason, 1959). Некоторые приемы расчета формул силикатов рассмотрены В. С. Соболевым (1949), а разработка одного из вариантов перечисления результатов химических анализов глинистых минералов выполнена В. Келлеем (Kelley, 1945). Более последовательно и систематизированно вопросы расчета формул излагаются в серии регулярно публикуемых статей И. Д. Борнеман-Старынкевич (1958, 1959, 1960, 1962), в которых приводится критический

разбор ошибок, обычно допускаемых при обработке результатов химических анализов, и предлагаются некоторые новые способы расчета формул минералов.

Настоящая работа систематизирует все известные сейчас приемы по выводу формул минералов на основе данных химического анализа. В ней приводятся также некоторые новые, предлагаемые автором способы пересчета результатов химических анализов, рассматриваются возможные источники погрешностей в вычисляемых по результатам анализа формулах и дается оценка вероятных пределов абсолютных и относительных ошибок при расчете формул некоторых минералов. В книге помещены таблицы атомных и молекулярных количеств, составленные для 61 химического элемента.

Автор с благодарностью отмечает помощь, оказанную ему при подготовке рукописи к изданию, и выражает свою признательность О. М. Римской-Корсаковой, Г. М. Виноградской, И. Д. Борнеман-Старынкевич, В. А. Франк-Каменецкому, а также Н. М. Успенскому и А. А. Кухаренко.

ОСНОВНЫЕ ПОНЯТИЯ И ОПРЕДЕЛЕНИЯ

Различные виды записи формул минералов. Образую в природных химических процессах и искусственных реакциях в зависимости от внешних условий те или иные соединения, химические элементы вступают во взаимодействие между собой в соответствии с количественным соотношением простейших структурных единиц — атомов или молекул, принимающих участие в реакции и входящих в состав ее конечных продуктов. Они реагируют между собой согласно закону кратности чисел атомов и молекул, но не кратности их весов. Это основное понятие современной химии нашло место и в геологических науках, где непосредственные результаты химических анализов уже давно пересчитываются на другие параметры с целью получения цифр количественного соотношения чисел атомов в тех или иных объектах исследования. В геохимии таковыми являются атомные кларки, в петрографии — петрохимические характеристики горных пород, вычисляемые различными методами, в минералогии — формулы минералов.

В зависимости от задач и степени детальности проводимого исследования состав минерала может быть изображен разными способами — в виде окислов, простейших химических формул, структурных химических формул разного типа.

Запись состава минерала в виде окислов — $K_2O \cdot Al_2O_3 \cdot 6SiO_2$ (микроклин), $K_2O \cdot 3Al_2O_3 \cdot 6SiO_2 \cdot 2H_2O$ (мусковит) и т. д. — является одной из наиболее старых форм изображения химических особенностей соединения и в настоящее время применима либо для грубой характеристики состава минерала, либо в качестве промежуточной ступени при расчете структурных формул.

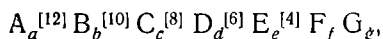
Простейшие химические формулы, широко используемые в настоящее время в неорганической химии, отражают количественные соотношения составных частей минерала, не затрагивая его структурных особенностей. Изображая этим способом, например, состав α - и β -эвкрипитита, мы получим для них одно и то же выражение $LiAlSiO_4$, несмотря на то что в первом соединении алюминий и кремний занимают разные структурные позиции, а во втором оба они находятся в окружении четырех атомов кислорода. Точно так же, при записи состава гипса

и ретгерсита в виде простейших химических формул $\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ и $\text{NiSO}_4 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ будет стерто различие в структурном положении молекул воды в этих минералах: в гипсе они располагаются в виде самостоятельных группировок (между листами, сложенными Ca^{2+} и SO_4^{2-}), в ретгерсита — окружают атомы никеля, как бы образуя вместе с ним комплексный двухзарядный катион $[(\text{H}_2\text{O})_6\text{Ni}]^{2+}$.

Структурно-химические или конституционные химические, или кристаллохимические формулы показывают в той или иной условной форме структурные особенности минерала и количественные соотношения атомов, занимающих в его кристаллической решетке разные структурные позиции. Имеются различные способы записи таких формул, среди них наибольшим распространением пользуются формулы, предложенные Ф. Махачки (Machatschki, 1953).

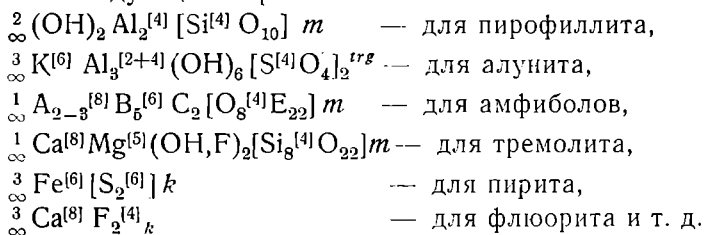
В начале формул Ф. Махачки обычно помещает индекс, показывающий характер повторяемости основного структурного элемента кристаллической решетки минерала в пространстве: ∞^3 — для обозначения трехмерных каркасных структур, ∞^2 — для показа наличия в решетке минерала двухмерных слоев и пакетов, ∞^1 — для выделения минералов с цепочечными, ленточными и им подобными радикалами. Затем выписываются катионы в порядке уменьшения их координационного числа, которое указывается в виде цифр в скобках справа над символом катиона. После катионов в формуле записывается анионный радикал, выделяемый в квадратные скобки; дополнительные анионы — O, F, OH вводятся либо между катионами и анионным радикалом, либо помещаются в начале всей формулы. Коэффициенты атомов во всех случаях сокращаются до наиболее простых значений, но так, чтобы не исказить характер радикала в кристаллической решетке минерала. В конце формулы Ф. Махачки нередко указывает сингонию минерала в виде литер: *trk*, *m*, *r*, *trg*, *te*, *h*, *rd* (ромбоэдрическая), *k*.

В общем виде формула минералов, по Ф. Махачки, будет выглядеть как:



где A, B, C, D, E — катионы; F, G — анионы.

Таким образом, формулы ряда конкретных минералов могут быть записаны следующим образом:



Ввиду сложности записи формул Ф. Махачки обычно пользуются упрощенными структурными формулами минералов — без указания координационных чисел атомов, индексов ∞, ∞, ∞ и без обозначения сингонии минерала. Такие упрощенные формулы прочно вошли в минералогическую литературу и широко используются в справочных руководствах, пособиях и специальных работах.

Нередко в упрощенных структурных формулах минералов для достижения большей их наглядности часть атомов, характеризующую основной узор структуры минерала, заключают в скобки различного вида: квадратные — для выделения изолированных радикалов, круглые — для цепочечных, ленточных, кольцевых и листовых радикалов, фигурные — для показа каркасных структур и выделения радикалов в алюмосиликатах. Так, например, составленная с соблюдением этих условий кристаллохимическая формула бустамита имеет вид $\text{Ca}_3\text{Mn}_3(\text{Si}_3\text{O}_9)_2$, полностью отражающий не только специфику химизма минерала, но и особенности его строения — наличие в кристаллической решетке бустамита цепочечных радикалов типа $(\text{Si}_3\text{O}_9)^{6-}$ и разную роль в ней Ca и Mn. В то же время из формулы родонита $(\text{Mn}, \text{Ca})_5(\text{Si}_5\text{O}_{15})$ следует, что в данном случае Mn и Ca занимают в решетке минерала равнозначные позиции, изоморфно замещая друг друга. Из нее видно также, что для структуры родонита характерны цепочки с периодом повторяемости в пять тетраэдров $(\text{Si}_5\text{O}_{15})^{10-}$. Именно для показа наличия в минерале таких цепочек его формула не сокращается, как правило, до простейшей — $(\text{Mn}, \text{Ca})\text{SiO}_3$.

Несколько иное выделение радикалов в формулах применительно к силикатам использует В. С. Соболев (1949). Предлагая для обозначения конечных радикалов типа одиночных, вдвоенных или соединенных в кольца кремнекислородных тетраэдров квадратные скобки — SiO_4 , Si_2O_7 , Si_6O_{18} и т. д., В. С. Соболев для выделения бесконечных в одном направлении группировок использует квадратные скобки, соединенные внизу: $[\text{SiO}_3]$, $[\text{Si}_4\text{O}_{11}]$, $[\text{Si}_5\text{O}_{15}]$. Для радикалов, бесконечных в двух направлениях, им вводится обозначение в виде прямоугольника — $[\text{Si}_4\text{O}_{10}]$, а для каркасных силикатов и алюмосиликатов — фигурные скобки $\{\text{AlSi}_2\text{O}_6\}$. В этом случае формула родонита будет иметь вид $(\text{Mn}, \text{Ca})_5[\text{Si}_5\text{O}_{15}]$, формула тремолита — $\text{Ca}_2\text{Mg}_5(\text{OH})_2[\text{Si}_6\text{O}_{22}]$, формула пиррофиллита — $(\text{OH})_2\text{Al}_2[\text{Si}_4\text{O}_{10}]$ и т. д.

Некоторыми авторами предлагается вводить в структурную химическую формулу минерала обозначение характера химических связей в нем (Лебедев, 1957) подобно тому, как это делается в квантовой химии. В наиболее детализированном виде такие формулы предлагаются Д. П. Григорьевым, который обозначает типично ковалентные связи вертикальной стрелкой, ионные — знаками $+$ и $-$, промежуточные ионно-ковалентные связи ука-

зываются соответствующей цифрой со знаком «+» для менее электроотрицательного атома и со знаком «—» для более электроотрицательного атома. Примером для первого случая может служить формула молекулы хлора $\text{Cl}^{\downarrow} \text{Cl}^{\uparrow}$, для второго — формула флюорита $\text{Ca}^{++}\text{F}_2^{-}$, для третьего — формула сфалерита $\text{Zn}^{+2}\text{S}^{-2}$. Молекулярная связь отмечается точкой, например $\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ и т. д. Одновременно в формулы вводятся различные скобки: квадратные — для выделения изолированных анионов и их групп, прямые вертикальные линии-скобки — для обозначения бесконечных цепочек и лент, скобки в виде угла — для соединений со слоистыми радикалами, фигурные — для каркасных структур. Примеры записи формул различных минералов приведены в табл. 1.

Принципиально иное изображение состава и особенностей кристаллического строения минерала имеют так называемые формулы структурного типа минералов. Их специфика заключается в показе наряду с составом и характером повторяемости в пространстве основного узора структуры также координационных связей атомов в решетке минерала. Такая формула, например, для энстатита будет выглядеть как $\text{Mg}[\text{SiO}_{\frac{2}{2} + \frac{2}{1}}]^{\infty}$. В ней знак

1^{∞} показывает, что основной узор структуры распространяется непрерывно в одном направлении. Сумма числителей в дробях при О соответствует координационному числу кремния, равному 4, причем первая дробь указывает на то, что два атома кислорода из четырех, окружающих кремний, принадлежат также двум соседним тетраэдрам. Вторая дробь показывает, что два других атома кислорода относятся только к одному тетраэдру. Сумма дробей $(\frac{2}{2} + \frac{2}{1} = 3)$ определит общее число атомов кислорода в формуле.

Подобным образом формула микроклина $\text{K}[(\text{Si}, \text{Al})\text{O}_{\frac{4}{2}}]^{\infty}_4$ свидетельствует о том, что узор структуры минерала одинаково повторяется во всех трех измерениях, координационное число Al и Si равно четырем, каждый атом кислорода в решетке минерала поделен между двумя соседними тетраэдрами, а общее количество атомов кислорода, приходящихся на формулу, равно $\frac{4}{2} \cdot 4$, т. е. 8.

Среди указанных выше способов записи формул минералов наибольшим распространением пользуются формулы Ф. Махачки и особенно упрощенные структурные формулы как самое простое, наглядное и достаточно точное изображение состава и строения минерала. Наиболее полную их сводку можно найти в справочных пособиях и руководствах М. Хейя (Hey, 1950), Ф. Махачки (Machatschki, 1953), А. Шюллера (Schüller, 1954), Х. Штрунца (1962), В. Дира (Deer, 1963) и других работах.

Примеры записи структурных химических формул минералов
(по Д. П. Григорьеву)

Связи	Гомодесмические	Связи	Гетеродесмические соединения			
			с островными группами	с цепочечными группами	со слоистыми группами	с каркасными группами
Ионные	$\text{Na}^+ \text{F}^-$ Видлспит	Ковалентные и молекулярные	$[\text{Sb}_4 \downarrow \downarrow \text{O}_6 \uparrow \uparrow] [\text{Sb}_4 \downarrow \downarrow \text{O}_6 \uparrow \uparrow]$ Сенамонит	$ \text{Se} \downarrow \text{Se} \uparrow \cdot$ $\cdot \text{Se} \downarrow \text{Se} \uparrow $ Селен	$< \text{C} \downarrow \downarrow \text{C} \uparrow \uparrow \uparrow > \cdot$ $\cdot < \text{C} \downarrow \downarrow \text{C} \uparrow \uparrow \uparrow >$ Графит	
Ковалентные	$\text{C} \downarrow \downarrow \downarrow \text{C} \uparrow \uparrow \uparrow \uparrow$ Алмаз	Ковалентные и ионные	$\text{Ca}^{+2} [\text{C} \downarrow \downarrow \downarrow \text{O}_3 \uparrow \uparrow] \text{I}^{-2}$ Кальцит	$\text{Mg}^{+2} \text{Si} \downarrow \downarrow \downarrow \text{O}_3 \uparrow \uparrow \text{I}^{-2}$ Энстатит	$\text{K}^{+1} < (\text{OH})_2 \text{Al}_2^{+3} > \text{Al} \downarrow \downarrow \uparrow$ $\text{Si}_2 \downarrow \downarrow \uparrow \text{Si} \downarrow \downarrow \uparrow \uparrow$ $\text{O}_{10} \uparrow > ^{-5} > ^{-1}$ Мусковит	$\text{K}^{+1} \{ \text{Al} \downarrow \downarrow \text{Si}_6 \downarrow \downarrow \uparrow \uparrow \text{O}_8 \} ^{-1}$ Микроклин
Металлические	$\text{Cu}^+ = \text{Cu}^+$ Медь	Ковалентные, ионные и молекулярные	$\text{Ca}^{+2} [\text{S} \downarrow \downarrow \downarrow \uparrow \uparrow \uparrow \text{O}_4 \uparrow \uparrow] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ Гипс		$\text{K}^{+1} \text{Ca}_4^{+2} \text{F}^- < \text{Si}_4 \downarrow \downarrow \uparrow \uparrow \uparrow \text{O}_{20} \uparrow > ^{-8} \cdot 8\text{H}_2\text{O}$ Апофилит	$\text{Na}^{+1} \{ \text{Al} \downarrow \downarrow \text{Si}_2 \downarrow \downarrow \uparrow \uparrow \text{O}_6 \} ^{-1} \cdot \text{H}_2\text{O}$ Анальим

Для расчета структурных химических формул минералов в настоящее время применяются две группы методов, требующие для своего выполнения различный объем исходных данных о физических свойствах, особенностях строения и химическом составе минерала. К первой из них относятся многочисленные и широко используемые в практике минералогических исследований приемы расчета формул непосредственно по результатам химического анализа; их описание приводится на стр. 20. Другая группа объединяет различные варианты расчета формулы минерала по содержанию его элементарной ячейки, основанные, помимо результатов химического анализа, на определении параметров элементарной ячейки минерала и величины его удельного веса. Принцип и последовательность вычислений по этим методам описываются на стр. 33.

Изоморфные замещения и состав минералов

Одним из важнейших достижений структурного анализа кристаллических веществ является открытие явлений изоморфного замещения элементов, сущность которых заключается в возможности замены при определенных условиях атомов одного элемента в кристаллической решетке на атомы другого*. Таким образом можно объяснить широкое развитие в природе минералов переменного состава, нередко со значительными вариациями количественных соотношений различных компонентов в них.

При изображении состава минеральных видов, для которых характерно изоморфное замещение одних элементов другими, с помощью структурных химических формул атомы, занимающие в кристаллической решетке равноценные положения, объединяются в скобки и пишутся через запятую, если они распределяются в решетке минерала статистически. Формула оливина с учетом вариаций его состава, следовательно, записывается как $(\text{Mg}, \text{Fe})_2[\text{SiO}_4]$, пироксена — $(\text{Ca}, \text{Na}) (\text{Mg}, \text{Fe}^{2+}, \text{Fe}^{3+}, \text{Al}) ((\text{Si}, \text{Al})^2\text{O}_6)$ и т. д.

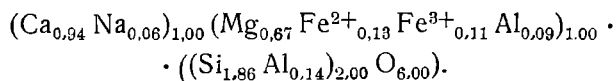
Несколько сложнее оказывается выбор правильного способа написания формул минералов не со статистическим, а с упорядоченным расположением атомов изоморфно примешивающегося элемента в кристаллической решетке минерала. Обобщение сведений о таком типе изоморфных смесей было выполнено в последнее время А. С. Марфуниным (1962).

В качестве примера таких минералов можно указать эпидот при соотношении $\text{Al}:\text{Fe}=2:1$, ортит с упорядоченным замещением кальция церием и микроклин с характерным для него расположением атомов Al по строго определенной системе точек. Во всех этих случаях по существу стирается грань между разновидностью минерала, отличающейся от другой его разновидности

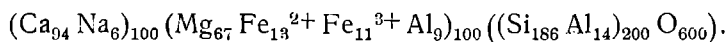
* Для описания этого явления в немецкой и частично в английской литературе используется термин диадохия.

лишь содержанием какого-то компонента, и новым минералом, для которого характерна строго определенная структурная позиция всех элементарных частиц — атомов или ионов. В этом случае в формуле два изоморфно замещающих друг друга элемента лишутся раздельно, как например, в микроклине Si и Al: $K\{AlSi_3O_8\}$, в отличие от санидина $K\{(Al, Si)_4O_8\}$ с его неупорядоченным расположением атомов алюминия, или от ортоклаза $K\{(Al, Si)_2Si_2O_8\}$, где алюминий статистически распределяется только в половине тетраэдров, занимающих строго определенную структурную позицию.

Записывая формулы реальных образцов минералов, обычно придерживаются следующих правил: в пределах каждой группы атомы располагаются в порядке уменьшения их содержания в минерале, запятые между атомами в скобках для большей простоты опускаются, числа за скобками являются суммой коэффициентов атомов. Формула одного из образцов пироксена при соблюдении этих условий будет записана в виде выражения:



Для упрощения эту же формулу можно записать и без дробных коэффициентов:



Не останавливаясь на всесторонней характеристике и классификации типов изоморфных замещений в минералах, которую можно найти во многих специальных руководствах и учебниках (Лебедев, 1957; Макаров, 1947; Бокий, 1954, 1960), отметим лишь те стороны этого сложного явления, которые должны приниматься во внимание при расчете структурных химических формул минералов. Одним из главных вопросов здесь является установление тех критериев, которые могли бы определить возможность изоморфного вхождения одного элемента на место другого, а также пределы замещения для конкретных пар элементов и минералов.

Потенциальная возможность проявления изоморфных замещений и их пределы определяются способностью вхождения атомов одного элемента в кристаллическую решетку на место атомов другого элемента без существенного изменения параметров этой решетки, искажения характера расположения структурных единиц в ней, а также нарушения химических связей в минерале и электронейтральности кристаллической решетки в целом. Одним из условий, необходимых для соблюдения этого общего закона, является близость размеров замещающих друг друга частиц-атомов или ионов (их радиусы даны в приложениях). Это условие хорошо иллюстрируется на примере кислородных соединений большим постоянством координационного числа катионов в минералах разного состава и структуры (Эванс, 1948).

Кислородные координационные числа	Катионы
3	B^{3+} , C^{4+} , N^{5+}
4	Be^{2+} , B^{3+} , Al^{3+} , Si^{4+} , P^{5+} , S^{6+} , Cl^{7+} , V^{5+} , Cr^{6+} , Mn^{7+} , Zn^{2+} , Ga^{3+} , Ge^{4+} , As^{5+} , Se^{6+}
6	Li^{1+} , Mg^{2+} , Al^{3+} , Se^{3+} , Ti^{4+} , Cr^{3+} , Mn^{2+} , Fe^{2+} , Fe^{3+} , Co^{2+} , Ni^{2+} , Cu^{2+} , Zn^{2+} , Ga^{3+} , Nb^{5+} , Ta^{5+} , Sn^{4+}
6—8	Na^{1+} , Ca^{2+} , Sr^{2+} , V^{3+} , Zn^{4+} , Cd^{2+} , Ba^{2+} , Ce^{4+} , Sm^{3+} , Lu^{3+} , Hf^{4+} , Th^{4+} , U^{4+}
8—12	Na^{1+} , K^{1+} , Ca^{2+} , Rb^{1+} , Sr^{2+} , Cs^{1+} , Ba^{2+} , La^{3+} , Ce^{3+} , Sm^{3+} , Pb^{2+}

Несмотря на то что геометрический фактор является далеко не единственным при изоморфных замещениях одного элемента другим, сравнение размеров атомов необходимо для полной характеристики изоморфизма и установления схем изоморфного вхождения одного элемента на место другого. При таких сравнениях приходится учитывать, что размеры ионов и атомов в каждом конкретном минерале зависят как от свойств химического элемента, так и от природы самой кристаллической решетки. Попытка учесть влияние характера связи на размеры ионов и атомов была предпринята в последнее время А. С. Поваренных (1956), давшим сводку колебаний величин атомных и ионных радиусов в химических соединениях различного типа (см. приложение 3).

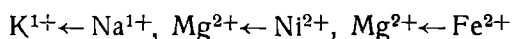
Весьма существенное влияние на проявление изоморфных замещений оказывают различные химические факторы, и в первую очередь, возможность сохранения при изоморфных заменах типа химической связи, характерной для данного минерала. Для оценки такой возможности до сих пор нередко прибегают к сравнению величин электроотрицательностей замещаемого и за-

мещающего атомов, характеризующих в некоторых условных единицах степень сродства атомов к электрону. Предполагается, что хотя бы ориентировочно степень полярности возникающих в минерале химических связей можно оценить по разности электроотрицательностей его атомов: чем разность больше — тем связь более полярна, чем разность меньше — тем больше возрастает доля ковалентных связей.

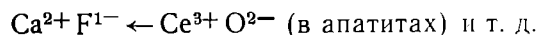
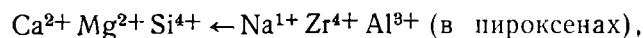
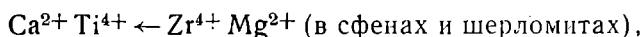
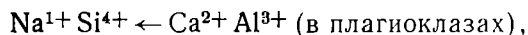
Необходимым условием осуществления тех или иных изоморфных замен является также сходство степени поляризации замещающих друг друга частиц, а кроме того — совпадение знаков их зарядов и их суммарных валентностей. Наконец, для проявления одного из типов изоморфных замещений обязательно наличие в кристаллической решетке минерала свободных, незанятых другими частицами структурных позиций.

Сложность точного учета факторов, обуславливающих возможность различных изоморфных замещений, часто приводит к большим затруднениям при определении характера вхождения тех или иных компонентов в решетку минерала и как следствие этого при объединении атомов в структурных формулах в кристаллохимические группы. Значительную помощь в этом случае может оказать сравнение оригинальных данных и гипотез исследователя с примерами уже установленных ранее схем изоморфных замен. Для силикатов такие примеры приводятся нами по материалам В. С. Соболева (1949) в приложениях 4 и 5.

Следствием изоморфного замещения одних элементов другими является отступление состава минералов от закона о простых постоянных кратных отношениях элементов в химических соединениях. В наиболее простом виде «нестехиометричность» состава минералов проявляется вследствие замещений, происходящих по схемам изовалентного или компенсационного гетеро-валентного изоморфизма:



или



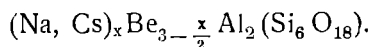
Во всех этих случаях количества замещаемых и замещающих атомов равны между собой. Число атомов в формуле минерала, таким образом, остается постоянным, меняется лишь их соотношение в составе отдельных кристаллохимических групп. Закон постоянных простых кратных чисел при проявлении подобных изоморфных замен должен быть отнесен не к отдельным элементам, а к их группам, занимающим равнозначные позиции в кри-

сталлической решетке минерала. Коэффициенты в формулах при изовалентном и компенсационном гетеровалентном изоморфизме сохраняют целочисленные значения.

Более глубокий, принципиальный характер носят отклонения состава минералов от требований стехиометрии, возникающие вследствие изоморфных замещений с изменением числа структурных единиц (атомов и ионов) в кристаллической решетке минерала. Возможность таких изоморфных замещений определяется существованием минералов и искусственных химических соединений, в кристаллических решетках которых могут иметься свободные структурные позиции. Для описания таких структур нередко употребляется термин — дефектные структуры с незавершенными решетками.

Изменение общего числа частиц в кристаллической решетке минерала, при изоморфных замещениях в наиболее простой форме иллюстрируется на примере амфиболов и щелочных бериллов. Согласно особенностям структуры в кристаллической решетке моноклинных амфиболов часть позиций может быть занятой или свободной в зависимости от состава минерала, что отражено и в общей формуле амфиболов $R_{0-1}^{[8]} R_2^{[8]} R_5^{[6]} (Si, Al)_8 O_{22} (OH, F)_2$, где коэффициент при первом катионе может принимать любые значения от 0 до 1.

В бериллах, кристаллическая решетка которых характеризуется наличием «пустот» в шестичленных кольцах кремнекислородных тетраэдров, весьма обычно присутствие щелочей, входящих в минерал по схеме $Al^{3+} \leftarrow R^{2+} R^{1+}$ с увеличением числа катионов в решетке. Лишние ионы щелочных металлов R^{1+} размещаются в «полостях», а формула берилла с учетом таких изоморфных замещений должна быть записана как $R_x^{1+} Be_3 (Al_{2-x} R_x^{2+})_2 (Si_6 O_{18})$. Еще более интересный тип изоморфных замещений установлен на примере некоторых щелочных бериллов В. А. Франк-Каменецким и Т. А. Соседко (1958). В этих бериллах содержание щелочей закономерно увеличивалось с уменьшением количества в минерале Ве. Очевидно, в этом случае размещение щелочных металлов в «полостях», ограниченных шестичленными кремнекислородными кольцами, сопровождалось образованием «вакантных» мест в бериллиевых тетраэдрах. Формула берилла при такой замене Ве на Na, Cs приобретает следующий вид:



Другими примерами минералов и химических соединений, обладающих дефектными структурами с незавершенными решетками, являются: шпинель состава $MgAl_2 O_4$, содержание алюминия в которой может возрастать за счет магния вплоть до образования $Al_{2,66} O_4$ ($1Mg^{2+} \leftarrow 0,66Al^{3+}$); пирротин с характерным для него постоянным недостатком железа; натровольфрамовые брон-

зы, образующие все переходные по составу разновидности от NaWO_3 к WO_3 (компенсация зарядов в первом соединении происходит за счет изменения валентности вольфрама).

Среди минералов, для которых предполагается возможным образование незавершенных решеток, следует назвать нефелин и слюды. В нефелине считается допустимым изоморфное замещение пары $\text{Na}^{1+}\text{Al}^{3+}$ на Si^{4+} , происходящее с уменьшением числа атомов в решетке минерала, а общую формулу нефелина с учетом таких замен записывают в виде $\text{Na}_{1-x}\{(\text{Al}_{1-x}\text{Si}_{1+x})_2\text{O}_4\}$. Часть позиций натрия при этом оказывается незанятой, а его коэффициент отклоняется от целочисленного значения и становится меньше единицы. Для слюд же почти всегда приводится схема изоморфных замещений $2\text{Al}^{3+} \leftarrow 3\text{Mg}^{2+}$, которая считается возможной для мусковита, благодаря наличию в его решетке незаполненных октаэдрических пустот. В результате такого изоморфного замещения коэффициент при группе алюминия в структурной химической формуле мусковита может превысить 2, и обратно — в формуле флогопита-биотита коэффициент группы магния и железа может принять значение меньше 3.

Подробное описание химических соединений с незавершенными решетками дано Р. Эвансом (1948) и Е. С. Макаровым (1947). Следует особо подчеркнуть, что доказательство наличия «дефектов» в структуре минерала сопряжено с проведением крайне точных измерений удельного веса, электропроводности, магнитных и других свойств минерала и сравнением их с теоретически ожидаемыми величинами. Поэтому существование дефектных структур с незавершенными решетками несомненно доказано лишь для относительно небольшого числа минералов и химических соединений — шпинели, $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$, $\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$, Fe_{1-n}S , NaWO_3 и некоторых других, которые в качестве примеров постоянно повторяются почти во всех руководствах по кристаллохимии. Однако и они убедительно говорят о принципиальной возможности отклонения коэффициентов в структурных химических формулах от целочисленных значений, хотя в каждом конкретном случае существование в минерале таких отступлений от закона химии о простых кратных постоянных отношениях требует особо тщательной проверки и строгого доказательства.

Число формульных единиц и рентгеновская плотность минерала. Кристаллохимические формулы являются условным способом записи состава и структурных особенностей минерала. Естественно, что в реальном кристаллическом веществе, кроме редких случаев молекулярных решеток, нельзя выделить каких-либо индивидуализированных группировок частиц, соответствующих по составу кристаллохимической формуле данного соединения. Связь между формулой минерала и его кристаллической решеткой заключается в том, что в среднем наполнение элементарной ячейки данной решетки отвечает какому-то числу z структурных

химических формул или, как их называют в этом случае, формульных единиц минерала.

Зависимость между числом z , параметрами элементарной ячейки и плотностью минерала выражается формулой

$$\rho V_0 = 1,66020 zM, \quad (1)$$

где ρ — плотность минерала, г/см³;

V_0 — объем элементарной ячейки минерала, Å³;

z — число формульных единиц;

M — «формульный» вес, равный сумме атомных весов элементов в формуле минерала.

При подсчете величины V_0 не в кубических ангстремах, а в килоиксах (кХ) эта формула преобразуется в следующую:

$$\rho V_0 = 1,65029 zM.$$

Из равенства (1) следует:

$$\rho = z \frac{1,6602M}{V_0} \text{ г/см}^3, \quad (2)$$

$$z = \frac{\rho V_0}{1,6602M}. \quad (3)$$

Величина V_0 определяется по параметрам элементарной ячейки минерала по одной из следующих формул в зависимости от сингонии кристаллической решетки:

кубическая $V_0 = a_0^3$

тетрагональная $V_0 = a_0^2 c_0$

гексагональная $V_0 = a_0^2 c_0 \sin 60^\circ = 0,8660 a_0^2 c_0$

ромбическая $V_0 = a_0 b_0 c_0$

моноклинная $V_0 = a_0 b_0 c_0 \sin \beta$

триклинная

$$V_0 = a_0 b_0 c_0 \sqrt{1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma + 2 \cos \alpha \cdot \cos \beta \cdot \cos \gamma}.$$

Величина ρ , подсчитанная по формуле (2) с использованием результатов рентгеновского исследования, называется рентгенометрическим удельным весом в отличие от его удельного веса, определенного методом непосредственного эксперимента (при помощи пикнометра и т. д.). Теоретически рентгенометрический и опытный удельный вес одного и того же образца минерала должны быть равны между собой, поэтому их сопоставление может быть использовано при оценке степени соответствия установленного аналитиком химического состава минерала его идеальному составу и кристаллической структуре. Наиболее отчетливо это видно на примере разных образцов пирротина, для которых по мере возрастания дефицита атомов железа удельный вес за-

кономерно уменьшается по сравнению с рентгенометрическим удельным весом, рассчитанным для идеальной «предельной» формулы этого минерала FeS .

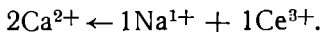
Если условно для минералов, обладающих дефектными структурами с незавершенными решетками, составить формулы, как бы отвечающие составу этих минералов, но без дефектов решетки, то подсчитанный для такого случая рентгенометрический удельный вес будет больше экспериментального для твердых растворов вычитания и меньше — для твердых растворов внедрения. Пользуясь этим принципом, можно получить дополнительные сведения о характере дефектов в структуре минерала и правильном написании его формулы, что было использовано, например, при установлении кристаллохимической формулы линнеита (Казыцын, 1959) и других минералов.

Для слюд, используя сопоставление рентгенометрического удельного веса, подсчитанного по их идеальной формуле, с экспериментальным удельным весом реальных образцов, можно аналогично получить данные о степени проявления изоморфизма по схеме $2\text{Al}^{3+} \rightleftharpoons 3\text{Mg}^{2+}$, т. е. о степени отклонения состава слюд от их типичных дву- и триоктаэдрических разновидностей. Однако все эти сопоставления требуют большой точности измерения удельного веса, чтобы исключить возможность его занижения за счет наличия газовых включений в трещинах и порах минерала или механических примесей в изучавшейся пробе.

Молекулярные количества. Коэффициенты кристаллохимических формул показывают относительное число атомов или молекул того или иного типа в минерале. Непосредственно же по результатам химического анализа судить о количественном соотношении атомов в его составе крайне трудно, так как цифры химического анализа не учитывают различий в атомных и молекулярных весах компонентов минерала. Например, из кристаллохимической формулы карбоцернаита



видно, что в его кристаллической решетке содержится одинаковое количество атомов натрия и церия, которые изоморфно замещают кальций по схеме



Однако в силу различия в весе атомов церия и натрия их процент содержания в минерале не по количеству, а по весу различен — химический анализ показывает, что в карбоцернаите содержится 5,11% Na_2O и 26,10% Ce_2O_3 .

Не менее трудно пользоваться непосредственными цифрами химического анализа при сопоставлении состава ряда образцов даже одного и того же минерала. Это хорошо видно из сравне-

ния приводимых ниже анализов оливина, взятых нами из «Минералогии» Л. Бери и В. Мэсона (Berry, Mason, 1959):

	1	2	3	4
SiO ₂	40,99	38,11	33,72	31,85
FeO	8,58	31,48	47,91	58,64
MnO	0,20	0,22	0,41	0,85
MgO	50,00	30,50	18,07	8,49
	99,77	100,31	100,11	99,83

Несмотря на присутствие в кристаллической решетке оливина любого состава одинакового количества атомов кремния, весовое содержание кремнезема во всех пробах оказывается различным. Особенно показательны в этом отношении цифры анализа 1 и 4. Еще более осложняются подобные сравнения при многокомпонентном составе минерала.

По-видимому, чтобы найти истинное соотношение числа «молекул» различных окислов в минерале необходимо в цифры, выраженные химиком в весовых процентах, ввести поправки на молекулярные веса окислов. Чем больше молекулярный вес окисла, тем меньше будет относительное число его молекул в минерале при данном весовом проценте. Поэтому для нахождения чисел, характеризующих относительное содержание «молекул» каждого окисла в минерале, нужно весовые проценты разделить на соответствующие молекулярные веса. Полученные таким образом числа называются молекулярными количествами.

Так, разделив для SiO₂ из первого анализа оливина его весовой процент 40,99 на молекулярный вес кремнезема 60,09, получим молекулярное количество SiO₂ 0,6825. Точно так же найдем молекулярные количества других окислов:

$$\text{FeO} = \frac{8,58}{71,85} = 0,1193; \quad \text{MnO} = \frac{0,20}{70,94} = 0,0028;$$

$$\text{MgO} = \frac{50,00}{40,32} = 1,2401.$$

Эти новые величины в каком-то едином масштабе показывают число молекул в минерале каждого из окислов, если, конечно, условно допустить их самостоятельное существование в кристаллической решетке исследуемого вещества. Сократив молекулярные количества на общий делитель, мы получим коэффициенты, по которым можно написать брутто-формулу оливина в виде окислов:

$$2(\text{Mg, Fe, Mn})\text{O} \cdot \text{SiO}_2, \text{ где } \text{MgO} : \text{FeO} : \text{MnO} = 1,82 : 0,17 : 0,01.$$

От молекулярных количеств можно перейти также к молекулярным процентам, приняв за 100 сумму молекулярных количеств всех окислов. Этот способ изображения состава минерала, наглядный и удобный для минералогических исследований, по-

видимому, с успехом мог бы заменить запись результатов анализа в весовых процентах. В этом случае цифры состава, например, уже упоминавшихся ранее четырех образцов оливина приобретут следующий вид:

	1	2	3	4
SiO ₂	33,28	34,75	33,43	33,77
FeO	5,81	23,97	39,65	51,88
MnO	0,14	0,16	0,34	0,77
MgO	60,47	41,43	26,69	13,41
	99,71	100,31	100,11	99,83

Молекулярные проценты SiO₂ везде одинаковы (в пределах погрешности анализов), что отвечает природе кристаллической решетки оливинов. Сопоставление химизма образцов самого сложного состава при этом методе уже не вызовет особых трудностей, связанных с дополнительными пересчетами, и в то же время будет наглядным.

Атомные количества. При расчете современных кристаллохимических формул, отражающих количественное соотношение и структурную позицию в решетке минерала не гипотетических молекул, а различных атомов и ионов и их групп, нахождение молекулярных количеств является лишь начальной стадией подсчетов. В этом случае от молекулярных количеств переходят к атомным количествам.

Для нахождения атомных количеств катионов молекулярное количество соответствующих им окислов множат на число катионов в формуле окисла. Так, для взятого в качестве примера в табл. 1 образца эгирина атомное количество кремнезема определится произведением $0,8658 \times 1 = 0,8658$, трехвалентного железа — произведением $0,2167 \times 2 = 0,4334$, натрия — произведением $0,2162 \times 2 = 0,4324$. Аналогичными арифметическими действиями можно подсчитать атомные количества кислорода во всех окислах (для SiO₂ — $0,8658 \times 2 = 1,7316$, для Fe₂O₃ — $0,2167 \times 3 = 0,6501$, для Na₂O — $0,2162 \times 1 = 0,2162$) и, сложив эти числа, получить общее атомное количество кислорода в минерале.

Таблица 2
Расчет молекулярных и атомных количеств в эгирине

Окисел	Содержание в весовых процентах	Молекулярный вес	Молекулярные количества	Атомные количества	
				кислорода	катионов
SiO ₂	52,0	60,09	0,8658	1,7316	0,8658
Fe ₂ O ₃	34,6	159,68	0,2167	0,6501	0,4334
Na ₂ O	13,4	61,994	0,2162	0,2162	0,4324
Сумма	100,0			2,5979	1,7316

Атомные количества катионов и анионов в новом условном масштабе отражают числа содержащихся в решетке минерала уже не гипотетических молекул, а реально существующих частиц. Поэтому по соотношению атомных количеств между собой можно определить относительное число в кристаллической решетке минерала тех или иных ее составных частей. Для образца эгирина из табл. 2 отношение суммарного атомного количества всех катионов к общему атомному количеству кислорода выражается пропорцией $1,7316 : 2,5979 = 3,999 : 6,000 = 4 : 6$, т. е. в структуре минерала на каждые 6 ионов кислорода приходится 4 катиона, что действительно является характерным для эгирина (его теоретическая формула $\text{NaFeSi}_2\text{O}_6$).

РАСЧЕТ ФОРМУЛ НЕПОСРЕДСТВЕННО ПО РЕЗУЛЬТАТАМ ХИМИЧЕСКОГО АНАЛИЗА

Принцип расчетов. Вывод формул кислородных соединений по кислороду и по катионам. Основной смысл всех методов вывода формул непосредственно по результатам химического анализа заключается в пересчете цифр состава минерала в весовых процентах на новые относительные величины, показывающие в едином масштабе количества тех простейших частиц, из которых построена кристаллическая решетка минерала. В качестве этих относительных величин используются атомные количества. Если для какого-то минерала, например брейнерита, подсчитаны атомные количества элементов: $\text{Mg} — 0,157$, $\text{Fe} — 0,140$, $\text{C} — 0,297$, $\text{O} — 0,891$, то соотношение чисел атомов в формуле минерала будет выражаться сложной пропорцией $\text{Mg}:\text{Fe}:\text{C}:\text{O} = 0,157 : 0,140 : 0,297 : 0,891$. Чтобы найти коэффициенты атомов в формуле данного образца брейнерита, остается лишь сократить атомные количества на общий делитель, который проще всего определить, исходя из теоретической формулы минерала. Приравняв, согласно стехиометрии карбонатов ряда кальцита RCO_3 , атомное количество кислорода 3, мы получим величину общего делителя, равную 0,297, и отсюда формулу брейнерита $(\text{Mg}_{0,63}\text{Fe}_{0,47})_{1,00}\text{CO}_3$. Точно так же можно было бы найти общий делитель, исходя из числа в идеальной формуле минерала не кислорода, а катионов*.

В соответствии со способом нахождения величины общего делителя первый метод расчета формулы будет называться расчетом по кислороду, второй — выводом формулы по катионам.

Методы расчета формул по кислороду основаны на предположении о том, что в кристаллической решетке минералов число ато-

* Здесь и в дальнейшем для большей простоты изложения к числу анионов отнесены O^{2-} , OH^{-} , F^{-} , Cl^{-} , S^{2-} , к катионам — все остальные элементы, независимо от их истинной роли в кристаллической решетке минерала и характерных для нее химических связей.

мов кислорода в элементарной ячейке всегда остается постоянным, независимым от характера изоморфных замещений одних катионов другими. Эта предпосылка всех расчетов обосновывается тем фактом, что не известно анионов большей валентности, чем кислород, способных изоморфно замещать его в минералах и, таким образом, возникновение структур с дефицитным числом кислорода с этой точки зрения оказывается невозможным. С другой стороны, часто проявляющиеся замещения кислорода дополнительными анионами (F^{1-} , Cl^{1-} , OH^{1-}), как правило, не могут приводить к появлению избыточных против формулы анионов, так как это явилось бы нарушением принципа плотнейшей упаковки построения кристаллических решеток минералов, который к кислородным соединениям широко применим. Среди методов расчетов формул по кислороду наиболее широко в минералогических исследованиях применяется так называемый обычный способ расчетов; представляют интерес, но имеют ограниченное применение и некоторые видоизменения этого метода — расчет формул по части кислорода и по зарядам.

Методы расчета формул по катионам, все чаще используемые минералогами в последнее время, применяются для вывода формул минералов, содержащих в своем составе воду. Аналитическое определение воды особенно соотношения H_2O^+ и H_2O^- , крайне неточно и поэтому расчет формулы минерала по обычному кислородному методу не всегда возможен. При этих методах расчета по катионам величина общего делителя определяется по теоретическому числу катионов той кристаллохимической группы, общее количество которых в структуре данного минерала по каким-либо соображениям считается строго постоянным, независимым от характера изоморфных замещений.

Обычный метод расчета по кислороду. При выводе формулы минерала по этому методу все вычисления выполняются в следующем порядке:

1. Находятся молекулярные количества каждого компонента по формуле $\frac{\text{весовой процент}}{\text{молекулярный вес}}$ или при помощи специальных таблиц в конце книги. Для избежания дробных величин эти числа нередко множат на 10 000.

2. Рассчитываются атомные количества катионов умножением молекулярного количества компонента на число катионов в его формуле.

4. Подсчитывается сумма атомных количеств кислорода.

5. Вычисляется общий делитель (или расчетный фактор) как частное от деления суммы всех атомных количеств кислорода на число атомов кислорода в теоретической формуле минерала*.

6. Находятся числа каждого из катионов в формуле минерала делением соответствующего ему атомного количества на расчет-

* Иногда вместо общего делителя находят обратную ему величину, называемую общим множителем, в дальнейшем заменяя в пункте 6 деление умножением.

ный фактор. Число атомов кислорода, согласно основному условию всех расчетов, приравнивается к теоретическому.

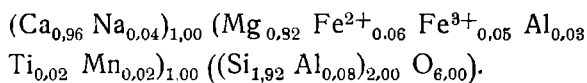
7. Производится проверка точности арифметических вычислений по сумме положительных и отрицательных зарядов. Ввиду неизбежности небольших погрешностей в вычислениях в силу округления различных величин в большую или меньшую сторону допустимо незначительное отклонение количества положительных зарядов от суммы отрицательных.

Таблица 3

Расчет формулы пироксена по обычному кислородному методу

Компоненты	Содержание в весовых процентах	Молекулярные количества ($\times 10\ 000$)	Атомные количества		Коэффициенты
			анионов	катионов	
SiO ₂	52,25	8696	17392	8696	1,920
TiO ₂	0,72	90	180	90	0,019
Al ₂ O ₃	2,54	249	747	498	0,110*
Fe ₂ O ₃	1,81	114	342	228	0,050
FeO	1,95	271	271	271	0,059
MnO	0,64	90	90	90	0,019
MgO	14,97	3713	3713	3713	0,819
CaO	24,38	4348	4348	4348	0,960
Na ₂ O	0,56	90	90	180	0,039
H ₂ O—	0,11				
Сумма	99,93		27173		

Например, при расчете формулы пироксена (табл. 3) общий делитель будет равен $\frac{27173}{6} = 4528,8$. Сумма положительных зарядов — 12,00, сумма отрицательных зарядов — 12,00. В соответствии с производственными расчетами формула будет иметь вид:



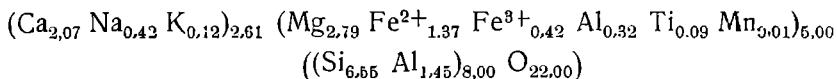
Если в структуру минерала входят гидроксильные группы OH⁻ (или ионы H⁺ в кислых солях), последовательность пересчета результатов анализа в основном сохраняется такой же. Общий

* Здесь, как и в других минералах, где алюминий может одновременно находиться в четверной и шестерной координациях, сначала в формулу записывается то количество алюминия, которое дополняет коэффициент кремния в кремнекислородном радикале до теоретически требуемой величины (в настоящем примере — до 2,00). Остаток алюминия записывают в кристаллохимическую группу атомов с координационным числом 6 (в данном случае — в группу Mg и Fe²⁺).

делитель находится, исходя из числа анионов (O+OH) в теоретической формуле минерала. Затем делением атомных количеств на расчетный фактор определяются числа всех катионов, включая H. Количество атомов кислорода находят по разности между теоретической суммой анионов (OH+O) и подсчитанным по анализу числом гидроксильных групп OH. Пример вывода формулы минерала, содержащего гидроксильные группы, дан в таблице 4.

Здесь общий делитель составляет $\frac{27051}{24} = 1127$. Сумма положительных зарядов 46,16, сумма отрицательных зарядов 46,16.

Таким образом, формула будет иметь вид:



Для минералов, содержащих в своем составе F^{1-} , Cl^{1-} (или S^{2-} , как например, в гельвине), порядок вывода формул по обычному кислородному методу имеет некоторую специфику, вызванную постоянным завышением в них содержания кислорода. Последнее объясняется условностью самой записи результатов анализа, при которой химик-аналитик подсчитывает содержание всех катионов в пробе в виде окислов, без учета того, что вместо какой-то части кислорода роль анионов в кристаллической решетке изучаемого минерала в действительности играют либо F^{1-} и Cl^{1-} , либо S^{2-} . Поэтому в результатах анализа химиком всегда

Таблица 4

Расчет формулы амфибола по обычному кислородному методу

Компоненты	Содержание в весовых процентах	Молекулярные количества ($\times 10000$)	Атомные количества		Коэффициенты
			анионов	катионов	
SiO_2	44,33	7377	14754	7377	6,546
TiO_2	0,83	0104	208	104	0,092
Al_2O_3	10,19	1000	3000	2000	1,774
Fe_2O_3	3,78	0237	711	474	0,420
FeO	11,14	1550	1550	1550	1,374
MnO	0,04	0006	6	6	0,005
MgO	12,68	3145	3145	3145	2,790
CaO	13,08	2332	2332	2332	2,069
Na_2O	1,47	0237	237	474	0,422
K_2O	0,66	0070	70	140	0,124
H_2O^+	1,87	1038	1038	2076	1,841
Сумма	100,07		27051		

должно указываться то избыточное количество кислорода, которое введено им в цифры анализа за счет присутствия в минерале фтора, хлора или серы. Оно обозначается как $O = F_2$, $O = Cl_2$, $O = S$ и записывается химиком под первой суммой анализа. Окончательная сумма за вычетом избытка кислорода теоретически должна быть равна 100%.

Аналогичным образом и в ходе расчета формулы минерала перед определением общего делителя из суммы атомных количеств кислорода, фтора и серы следует вычесть поправку на избыток кислорода ($O = F_2$, $O = Cl_2$, $O = S$). Величину поправки атомного количества кислорода по фтору и хлору можно определить двумя способами, приводящими к одному и тому же результату. В первом случае весовые проценты кислорода, отвечающие $O = F_2$, $O = Cl_2$, $O = S$, делят на атомный (не молекулярный!) вес кислорода, во втором способе поправка на избыток атомного количества кислорода находится как половина атомного количества фтора, хлора, а при вхождении в минерал S^{2-} поправка равна всему атомному количеству S^{2-} .

Последовательность расчетов при выводе формулы фторсодержащего минерала приводится ниже (см. табл. 5).

1. Находятся молекулярные количества окислов и атомные количества анионов и катионов. Для фтора, хлора и серы сразу определяются атомные количества делением их весового процента на соответствующий атомный (не молекулярный!) вес и полученные цифры записываются в столбец анионов.

2. Подсчитывают сумму атомных количеств анионов. Она отвечает завышенному содержанию анионов в минерале.

3. Находят поправки атомных количеств кислорода. В данном примере она равна половине атомного количества фтора ($3411 : 2 = 1706$).

4. Из суммы атомных количеств анионов вычитают поправки атомных количеств кислорода по фтору, хлору, сере, вычисленные ранее (пункт 3). Полученное число является истинным атомным количеством анионов, входящих в минерал.

5. Вычисляется расчетный фактор делением истинного атомного количества анионов на их число в теоретической формуле минерала.

6. Подсчитываются числа катионов, как частное от деления их атомных количеств на расчетный фактор.

7. Определяется количество анионов F^{1-} , Cl^{1-} , S^{2-} делением атомных количеств этих анионов на расчетный фактор.

8. Рассчитывается число атомов кислорода. Оно равно теоретическому числу анионов в типовой формуле минерала за вычетом уже подсчитанных количеств F^{1-} , Cl^{1-} , S^{2-} .

9. Производится проверка точности арифметических вычислений по сумме положительных и отрицательных зарядов.

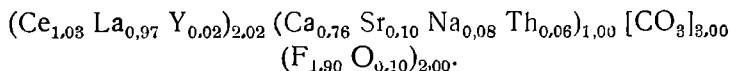
При расчете формулы паризита (табл. 5) общий делитель составит: $\frac{19738}{11} = 1794,4$.

Расчет формулы паразита по обычному кислородному методу

Компоненты	Содержание в весовых процентах	Молекулярные количества ($\times 10\,000$)	Атомные количества		Коэффициенты
			анионов	катионов	
ThO ₂	2,84	0107	0214	0107	0,059
Ce ₂ O ₃	30,34	0924	2772	1848	1,031
La ₂ O ₃	28,36	0870	2610	1740	0,971
Y ₂ O ₃	0,41	0018	0054	0036	0,020
CaO	78,65	1364	1364	1364	0,761
SrO	1,86	0180	0180	0180	0,100
Na ₂ O	0,45	0073	0073	0146	0,081
CO ₂	23,69	5383	10766	5383	3,003
F	6,48	3411	3411	—	1,901
Нерастворим. остаток*	0,55	—	—	—	—
Сумма	102,63		21444		
Поправка —O=F ₂	—2,73		—1706		
Сумма	99,90		19738		

* Механическая примесь кварца.

Сумма положительных зарядов —20,10, сумма отрицательных зарядов 20,10. Соответственно формула будет иметь вид:



Следует отметить, что при расчете формул фтор- и хлорсодержащих минералов систематически повторяются ошибки в определении поправок атомных количеств кислорода по фтору, хлору и сере при расчете их по первому способу. Наиболее часто при этом делают число весовых процентов, соответствующее поправке $\text{O}=\text{F}_2$, на атомный (или даже молекулярный) вес галогена или серы. Это неверно, так как поправка $\text{O}=\text{F}_2$ указывает на завышение содержания в минерале именно кислорода, а не фтора, хлора и серы, причем она дается (совершенно условно) для атомарного, а не молекулярного кислорода. Значит, для получения поправки атомных количеств надо делить весовой процент из графы $\text{O}=\text{F}_2$, $\text{O}=\text{Cl}_2$, $\text{O}=\text{S}$ на атомный вес кислорода.

Расчет формул по части кислорода. Нередко при расчете кристаллохимических формул по кислороду обычным методом для минералов, содержащих в своем составе воду (в виде групп H_2O ,

ОН¹⁻ или Н₃О¹⁺), полученные коэффициенты — все, или часть из них, заметно отличаются от стандартных значений. Причиной этого могут явиться погрешности химического анализа минерала (неточное определение суммарного количества воды в пробе или неверно установленное соотношение между гигроскопической и высокотемпературной Н₂О), обуславливающие неверное определение величины общего делителя по кислороду при расчете формулы минерала. В этих случаях приходится прибегать к иным приемам вывода формулы. Нами предлагается, например, следующий способ подсчетов, принцип которого заключается в вычислении общего делителя, исходя не из всего числа кислорода в типовой формуле минерала, а только той его части, которая как бы «вносится» в формулу всеми другими катионами за исключением водорода. Соответственно и атомное количество кислорода берется только то, которое отвечает всем другим компонентам минерала, кроме Н₂О.

Так, например, рассчитывая анализ малахита Cu₂[CO₃](ОН)₂ (табл. 6), общий делитель по предлагаемому методу вычислений

Таблица 6

Расчет формулы малахита по части кислорода

Компо- ненты	Содержание, в весовых процентах	Молекуляр- ные количе- ства (× 10000)	Атомные количества		Кoeffи- циенты
			анионов	катионов	
CuO	71,31	8962	8962	8962	1,991
ZnO	0,45	0055	0055	0055	0,012
CO ₂	19,78	4494	8988	4494	0,999
H ₂ O	8,80	—	—	—	—
Сумма	100,44		18005		

следует подсчитывать, исходя не из пяти, а из четырех атомов кислорода, согласно формуле в виде окислов 2CuO · CO₂ · Н₂О.

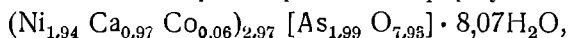
Он будет равен $\frac{18005}{4} = 4501$. После нахождения величины об-

щего делителя рассчитываются числа катионов в формуле минерала делением, как обычно, атомного количества каждого катиона на общий делитель. Число ОН¹⁻ пишется согласно теоретической формуле минерала и затем подсчитывается количество высокотемпературной воды, которое должен был бы указать химик при правильном ее определении в пробе, в данном случае оказавшееся равным 8,10%. Оставшаяся часть воды, очевидно, может быть отнесена к Н₂О⁻. Таким образом, формула будет иметь вид:



Сумма положительных зарядов составит 8,00, сумма отрицательных зарядов 8,00.

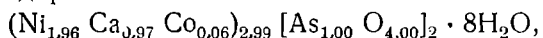
В качестве другого примера описываемых расчетов можно привести вывод формулы аннабергита — $(\text{Ni}, \text{Co})_3[\text{AsO}_4]_2 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$. По результатам анализа в одной из проб минерала содержится 25,01% H_2O (табл. 7), при этом ее разделение на высокотемпературную и гигроскопическую воду не произведено. Если предположить, что вся вода является высокотемпературной и входит в минерал в виде молекул H_2O , пересчет результатов анализа по классическому кислородному методу с вычислением общего делителя по 16 атомам кислорода приводит к формуле:



плохо увязывающейся со стандартной стехиометрией аннабергита.

Расчет формулы аннабергита по описываемому здесь методу приводит к более удовлетворительным результатам. Общий делитель находится по восьми атомам кислорода, которые соответствуют основной части формулы (за вычетом H_2O) и равен: $\frac{13667}{8} = 1708,4$. Исходя из этой цифры, вычисляются коэффициенты всех катионов. Количество молекул воды, входящих в минерал, принимается равным теоретическому.

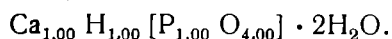
Формула аннабергита при таком способе расчетов почти точно отвечает стандартной:



при сумме отрицательных зарядов, равной 32,00, и сумме положительных зарядов, равной 31,98. Обратные вычисления показывают, что ей соответствует 24,60% H_2O ; остаток определенной химиком суммарной воды составляет 0,41% и, вероятно, является H_2O^- .

При одновременном присутствии в минерале молекулярной воды и ионов H_3O^{1+} , OH^{1-} или H^{1+} (так называемые природные кислые соли) последовательность пересчета результатов анализа сохраняется такой же, как для малахита или аннабергита. Эти вычисления иллюстрируются на примере брушита $\text{CaH}[\text{PO}_4] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ в табл. 8. В цифрах анализа указано содержание в минерале 26,36% H_2O , однако количественное соотношение H_2O^+ и H_2O^- не дано. Поэтому при выводе формулы брушита общий делитель следует находить по числу атомов кислорода, за вычетом той его части, которая как бы вносится в минерал в виде H_2O . Из формулы брушита в виде окислов $\text{CaO} \cdot 0,5\text{P}_2\text{O}_5 \cdot 2,5\text{H}_2\text{O}$ видно, что это число равно 3,5. Расчетный фактор определится как частное от деления суммы атомных количеств кислорода в CaO и P_2O_5 на 3,5, и будет равен $\frac{20414}{3,5} = 5832,6$. Затем при помощи расчетного фактора подсчитывается число катионов в формуле. Количество H^{1+} и H_2O берется равным теоретическому с после-

дующим расчетом соответствующего им содержания в минерале конституционной и молекулярной воды. Формула минерала приобретает при этом следующий вид:



Сумма положительных зарядов 8,00, сумма отрицательных также 8,00.

Таблица 7

Расчет формулы аннабергита по части кислорода

Компоненты	Содержание, в весовых процентах	Молекулярные количества ($\times 10\,000$)	Атомные количества		Коэффициенты
			анионов	катионов	
CaO	9,32	1662	1662	1662	0,973
CoO	0,76	0101	101	101	0,059
NiO	25,01	3349	3349	3349	1,960
As ₂ O ₅	39,33	1711	8555	3422	2,003
H ₂ O	25,01				
Сумма	99,43		13667		

Таблица 8

Расчет формулы брушита по части кислорода

Компоненты	Содержание, в весовых процентах	Молекулярные количества ($\times 10\,000$)	Атомные количества		Коэффициенты
			анионов	катионов	
CaO	32,69	5829	5829	5829	0,999
P ₂ O ₅	41,41	2917	14585	5834	1,000
H ₂ O	26,36				
Сумма	100,46		20414		

Кислородный метод расчета формул по зарядам (Ross, Hendricks, 1945; Shaller, 1962). Метод основан на принципе электронейтральности молекул и необходимости полной взаимной компенсации отрицательных и положительных валентностей, вносимых в формулу минерала анионами и катионами. За исходное при расчетах берется то количество отрицательных зарядов, которое приходится на долю кислорода в стандартной формуле минерала.

Порядок вычислений приведен в табл. 9 на примере расчета формулы пироксена, уже вычислявшейся ранее в табл. 3 по обычному кислородному методу. Сначала находятся молекуляр-

ные количества окислов. Затем для каждого окисла они множатся на сумму валентностей катиона, входящих в этот окисел. Полученные величины, обозначаемые буквой e , отвечают положительным зарядам, вносимым в формулу минерала катионами. Сумма этих зарядов должна быть равна сумме отрицательных валентностей в стандартной формуле. Для пироксена она должна быть равна 12,00, но, согласно расчетам, оказалась равной 5,4346. Поэтому для соблюдения принципа электронейтральности для каждого окисла число e должно быть увеличено в r раз (r будет равно $\frac{12}{5,4346} = 2,2081$) и примет после этого значения, указанные в табл. 9 через e' . Теперь, чтобы получить коэффициент каждого катиона в формуле пироксена, нужно разделить соответствующее ему e' на его валентность. Полученные таким путем цифры табл. 9 полностью совпадают с числами атомов в табл. 3.

Таблица 9

Расчет формулы пироксена по зарядам

Компоненты	Содержание, в весовых процентах	Молекулярные количества	Положительные валентности катионов		Коэффициенты
			e	e'	
S O ₂	52,25	0,8696	3,4784	7,681	1,920
TiO ₂	0,72	0,0090	0,0360	0,079	0,020
Al ₂ O ₃	2,54	0,0249	0,1494	0,330	0,110
Fe ₂ O ₃	1,81	0,0114	0,0684	0,151	0,050
TeO	1,95	0,0271	0,0542	0,120	0,060
MnO	0,64	0,0090	0,0180	0,040	0,020
MgO	14,97	0,3713	0,7426	1,640	0,820
CaO	24,38	0,4348	0,8696	1,920	0,960
Na ₂ O	0,56	0,0090	0,0180	0,039	0,039
H ₂ O—	0,11				
Сумма	99,93		5,4346	12,000	

Методы расчета формул по катионам. Эти методы расчетов, широко применяемые в настоящее время для вывода формул минералов, содержащих в своем составе воду, основаны на определении величины общего делителя по теоретическому числу катионов той кристаллохимической группы, общее количество которых в структуре данного минерала считается строго постоянным. Исходя из найденного таким образом общего делителя подсчитываются коэффициенты всех катионов. Число кислорода и гидроксильных групп подбирается с тем расчетом, чтобы их общее количество отвечало теоретическому и в то же время полностью компенсировало суммарную валентность катионов. Однако при

этом следует учитывать, что количество анионов OH^{1-} не может превысить общее содержание H_2O^+ и H_2O^- в минерале.

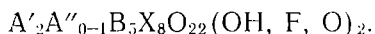
Наибольшее употребление катионные методы вывода формул получили при пересчетах результатов химического анализа ленточных и слоистых силикатов и алюмосиликатов, на примере которых эти приемы расчетов были детально разработаны и введены в практику химико-минералогических исследований И. Д. Борнеман-Старынкевич (1960, 1962). Постоянно используются они и при выводе формул метамиктных тантало-ниобатов (Бородин, 1957; Гинзбург и др., 1958; Сергеев, 1961), а изредка — для кристаллических титанатов (Франк-Каменецкий, 1961) и некоторых других минералов.

Расчет формулы по катионному методу в варианте, предложенном А. А. Кухаренко, дан в табл. 10 на примере амфибола. Общий делитель определен в данном случае, исходя из предположения о равенстве числа катионов в четверной (X) и шестерной

Таблица 10
Расчет формулы амфибола по катионам

Компоненты	Содержание в весовых процентах	Молекулярные количества ($\times 10000$)	Атомные количества		Коэффициенты	Заряды
			анионов	катионов		
SiO_2	37,00	6157		6157	6,048	24,194
TiO_2	0,59	74		74	0,073	0,292
Al_2O_3	11,29	1107		2214	2,174	6,522
Fe_2O_3	11,86	742		1484	1,457	4,371
FeO	19,96	2772		2772	2,722	5,444
MgO	2,16	536		536	0,526	1,052
			$X + B = 13237$			
MnO	0,87	123		123	0,121	0,242
CaO	10,49	1873		1873	1,845	3,690
Na_2O	1,18	191		382	0,375	0,375
K_2O	1,98	212		424	0,416	0,416
			$A = 2802$			
H_2O^+	2,55	1417		2834	—	—
H_2O^-	0,40	210		420		
F	0,58	305	305	—	0,299	0,299
Сумма	100,91					
$\text{O} = \text{F}_2$	—0,24					
Сумма	100,67					

(В) координации тринадцати согласно стандартной формуле амфиболов:



К группе В отнесены Fe^{2+} , Fe^{3+} , Mg, часть Al, к группе X — Si, Ti, часть Al. В группу А попадают все остальные катионы, предполагается, что в ее состав может входить также и оксоний H_3O^{1+} .

Порядок вывода формулы следующий:

1. Подсчитываются молекулярные количества компонентов и по ним — атомные количества катионов.

2. Подсчитываются атомные количества F и Cl (для остальных анионов они не определяются).

3. Вычисляется общий делитель как частное от деления суммы атомных количеств катионов (B+X) на 13 (он равен 1018).

4. Делением атомных количеств катионов, фтора и хлора на общий делитель определяются коэффициенты атомов в формуле.

5. Подсчитывается суммарная валентность катионов W_k (в нашем примере — 46,596).

6. Рассчитывается коэффициент кислорода и групп OH^{1-} , исходя из суммы отрицательных зарядов, которая согласно принципу электронейтральности кристаллической решетки должна быть равна сумме положительных зарядов, т. е. 46,596. В эту величину 0,299 зарядов вносится фтором (так как его коэффициент в формуле 0,299) и 44,000 — двадцатью двумя атомами кислорода, значит на дополнительные ионы кислорода и гидроксила приходится $46,596 - (0,299 + 44,000) = 2,297$ заряда и мы можем написать уравнение: «ОН» + «2О» = 2,297 (здесь «ОН» и «О» — искомые нами коэффициенты кислорода и гидроксила в формуле).

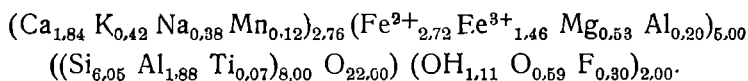
Второе уравнение можно составить, исходя из того, что сумма дополнительных анионов в формуле амфибола равна 2,00, или за вычетом 0,299 фтора — 1,701. Таким образом, пишем равенство: «ОН» + «О» = 1,701.

Решая теперь систему уравнений

$$\begin{cases} \text{«ОН»} + \text{«2О»} = 2,297; \\ \text{«ОН»} + \text{«О»} = 1,701, \end{cases}$$

можем определить число дополнительных ионов кислорода и гидроксила в формуле. В данном случае они соответственно равны 0,596 и 1,105.

7. По найденным коэффициентам пишется формула амфибола:



При учете возможности вхождения в группу А ионов оксония H_3O^{1+} порядок расчета формулы сначала остается таким же, как и в описанном выше примере: определяются молекулярные и

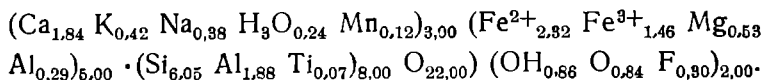
атомные количества, вычисляется общий делитель по 13 катионам (B + X), рассчитываются коэффициенты всех катионов, фтора и хлора. После этого подсчитывается суммарное атомное количество катионов группы А. Оно равно 2802, а максимально возможное значение этого числа определяется произведением величины общего делителя на 3 ($1018 \times 3 = 3054$). Разница $3054 - 2802 = 252$ может быть заполнена ионами оксония. Для их построения потребуется атомов водорода $252 \times 3 = 756$. Кроме того, водород должен войти в состав гидроксильных групп, максимально необходимое его количество определится в этом случае как разница между атомным количеством всех дополнительных анионов в формуле ($1018 \times 2 = 2036$) и атомным количеством фтора (305), т. е. будет равно 1731. В целом для построения оксония и групп OH^{1-} атомное количество водорода составит 2487 ($756 - \text{на оксоний}$ и $1731 - \text{на гидроксил-ион}$), что намного меньше величины, вычисленной по результатам химического анализа, и, таким образом, формула амфибола может быть рассчитана с учетом оксония.

Для этого подсчитывается суммарная положительная валентность всех катионов и оксония, равная 46,837. Состав анионной части формулы $\text{O}_{22}(\text{OH}, \text{F}, \text{O})_2$ должен быть таким, чтобы уравнять эти валентности, т. е. общий заряд дополнительных анионов ($\text{OH}^{1-}, \text{F}^{1-}, \text{O}^{2-}$)₂ равен 2,837, из них на фтор приходится 0,299 отрицательных зарядов, а на OH^{1-} и O^{2-} — 2,538. Кроме того, нам известно, что сумма коэффициентов всех дополнительных анионов равна 2, из которых фтор составляет 0,299, а на $\text{OH}^{1-} + \text{O}^{2-}$ остается 1,701. Отсюда, из системы уравнений:

$$\begin{cases} \langle \text{OH} \rangle + 2\langle \text{O} \rangle = 2,538 \\ \langle \text{OH} \rangle + \langle \text{O} \rangle = 1,701 \end{cases}$$

находим коэффициенты дополнительных анионов кислорода и гидроксила: $\text{O} = 0,837$, $\text{OH} = 0,864$.

В окончательном виде формула выглядит следующим образом:



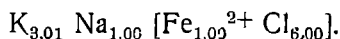
Дополнительные примеры последовательности вычислений формул по катионному методу с их обоснованием можно найти в работах И. Д. Борнеман-Старынкевич (1960, 1962), И. В. Гинзбург (1961, 1962) и др.

Пример расчета формул неокислородных соединений. Принцип и последовательность пересчета результатов химического анализа на формулу для минералов, представляющих собой неокислородные соединения различного типа (галоидные соединения, сульфиды, сульфосоли и т. д.), сохраняются теми же, что и в описанных выше методах. Основное отличие заключается лишь в способе нахождения атомных количеств, так как в резуль-

Расчет формулы риннита

Компоненты	Содержание, в весовых процентах	Атомные количества		Коэффициенты
		анионов	катионов	
K	28,83	—	7373	3,012
Na	5,64	—	2453	1,002
Fe	13,63	—	2441	0,997
Cl	52,08	14688	—	6,000
Сумма	100,18			

татах анализа неокислородных соединений содержание компонентов дается в расчете на «чистый» элемент — K, Pt, Cl, S и т. д. Атомные количества в этом случае находятся непосредственно делением весового процента компонента на его атомный вес (или по таблицам в конце книги). Порядок расчета формулы иллюстрируется в табл. 11 на примере риннита $\text{KNa}[\text{FeCl}_6]$. Общий делитель определен аналогично приемам вычислений по обычному кислородному методу по числу анионов в формуле — Cl_6 . Он равен $\frac{14688}{6} = 2448$. Соответственно формула будет иметь вид:

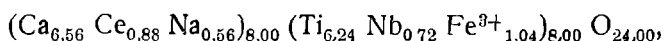


Сумма положительных зарядов равна 6,01; сумма отрицательных 6,00.

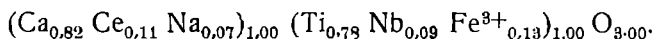
РАСЧЕТ ФОРМУЛ ПО СОДЕРЖИМОМУ ЭЛЕМЕНТАРНОЙ ЯЧЕЙКИ МИНЕРАЛА

Принцип расчетов. Все вычисления основаны на определении действительного числа атомов каждого элемента в элементарной ячейке минерала. За исходные при этих расчетах берутся абсолютный вес элементарной ячейки минерала, молекулярные или атомные веса компонентов, входящих в его решетку и их содержание в минерале, выраженное в весовых процентах. Вес элементарной ячейки определяется по ее параметрам и плотности минерала, измеренной экспериментально.

Получаемые в результате таких расчетов числа атомов характеризуют содержимое элементарной ячейки минерала. Так, если для образца перовскита по результатам анализа найдены числа атомов: Ca — 6,56, Ce — 0,88, Na — 0,56, Ti — 6,24, Nb — 0,72, Fe^{3+} — 1,04, O — 24,00, то наполнение ячейки выразится как



а сама формула минерала, после сокращения всех коэффициентов на одну и ту же величину, будет иметь следующий вид:



Метод М. Хея. Для определения содержимого элементарной ячейки минерала можно прибегнуть к вычислениям по разным формулам. Один из наиболее распространенных способов подсчетов был введен в минералогическую литературу М. Хеем (Heu, 1939). Он основан на определении числа атомов каждого элемента R в ячейке минерала по числу как бы находящихся в этой ячейке молекул окисла данного элемента R_xO_y . Действительно, если каким-либо путем удалось установить, что в элементарной ячейке минерала содержится n «молекул» R_xO_y , то число атомов (N_R) элемента R легко определится произведением:

$$N_R = nx, \quad (1)$$

а число соответствующих этому «окислу» атомов кислорода — произведением:

$$N_o = ny.$$

Количество n молекул R_xO_y можно вычислить, зная общий вес (p) всех молекул R_xO_y в элементарной ячейке и абсолютный вес (m) одной молекулы, прибегнув к расчету по формуле:

$$n = \frac{p}{m},$$

или, заменив абсолютный вес через молекулярный (M), по формуле:

$$n = \frac{p}{M \cdot 1,6602 \cdot 10^{-24}}. \quad (2)$$

Общий вес (p) молекул R_xO_y вычисляется по равенству:

$$p = \frac{rP}{100} [z], \quad (3)$$

исходя из веса (P) элементарной ячейки и весового процента (r) окисла R_xO_y в минерале, которое берется из результатов химического анализа. Так как в силу аналитических погрешностей сумма (S) результатов анализа отклоняется от 100%, выражение (3) должно быть преобразовано в следующее:

$$p = \frac{rP}{S} [z]. \quad (4)$$

В равенстве (4) неизвестно значение P , которое легко рассчитывается по формуле

$$P = V_0 d \cdot 10^{-24} [z], \quad (5)$$

где V_0 — объем элементарной ячейки, в $\text{\AA}^3$.

d — удельный вес, в г/см^3 .

Значение удельного веса (d) минерала определяется экспериментально.

Подставив теперь выражения (4) и (5) в равенство (2), получим основную формулу для расчета числа молекул в элементарной ячейке минерала:

$$\begin{aligned} n &= \frac{p}{M \cdot 1,6602 \cdot 10^{-24}} = \frac{rP}{M \cdot S \cdot 1,6602 \cdot 10^{-24}} = \\ &= \frac{rV_0 d \cdot 10^{-24}}{M \cdot S \cdot 1,6602 \cdot 10^{-24}} = \frac{r}{M} \cdot \frac{V_0 d}{S \cdot 1,6602}. \end{aligned} \quad (6)$$

Здесь величина первой дроби, показывающая отношение $\frac{r}{M}$, представляет собой молекулярное количество (M) окисла $R_x O_y$, значение второй дроби является постоянным для каждого отдельного образца минерала. Поэтому в упрощенном виде формулу (6) можно записать как

$$n = MC. \quad (7)$$

Подставив из равенства (7) значение n в выражение (1), мы получим окончательную формулу для подсчета количества атомов в элементарной ячейке:

$$\boxed{N_R = xMC.} \quad (8)$$

Здесь N_R — число атомов элемента R в ячейке минерала;

x — коэффициент элемента R в формуле его окисла $R_x O_y$;

M — молекулярное количество окисла $R_x O_y$;

$$C = \frac{dV_0}{S \cdot 1,6602}.$$

Аналогичным путем по формуле $N_0 = yMC$ находится количество атомов кислорода, соответствующее каждому окислу, а затем подсчитывается их суммарное количество в ячейке. По той же формуле определяется и содержание F^{1-} , Cl^{1-} , S^{2-} , причем, как обычно, общая сумма анионов в этом случае должна быть уменьшена за счет кислорода на половину количества атомов галогенов и на полное число S^{2-} .

Расчет формулы минерала (паризита) по методу М. Хейя иллюстрируется табл. 12. При вычислениях из результатов анализа было исключено все количество SiO_2 , обязанное присутствию в пробе кварца. Одновременно пришлось ввести поправку в измеренное значение удельного веса на примесь:

$$d_{\text{исправленное}} = \frac{S \cdot d_{\text{изм}} + x d_x}{S - x},$$

где S — сумма анализа;
 x — содержание в пробе минерала-примеси;
 d_x — удельный вес минерала-примеси.

Вычисленное таким образом значение удельного веса оказалось равным 4,18.

Величина C в равенстве (8) составляет:

$$C = \frac{d_{\text{испр}} \cdot V_0}{S \cdot 1,6602} = \frac{4,18 \cdot 1212,37}{99,36 \cdot 1,6602} = 30,72,$$

а содержимое элементарной ячейки паразита согласно расчетам:

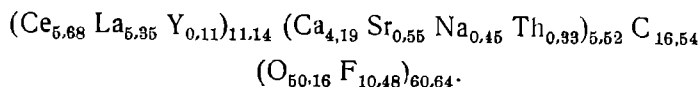


Таблица 12

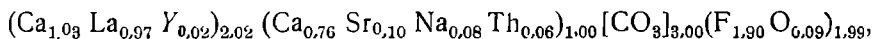
Расчет формулы паразита по методу М. Хей

$$a_0 = 7,082\text{\AA}; \quad c_0 = 27,91\text{\AA}$$

Компо- ненты	Содержание, в весовых процентах	Молекуляр- ные количе- ства, М	Числа молекул в ячейке, $n = 30,72M$	Числа атомов в элементарной ячейке	
				металлов и металлоидов N_R	кислорода и фтора N_O
ThO ₂	2,84	0,0107	0,329	0,329	0,987
Cl ₂ O ₃	30,34	0,0924	2,839	5,678	8,517
La ₂ O ₃	28,36	0,0870	2,673	5,346	8,019
Y ₂ O ₃	0,41	0,0018	0,055	0,110	0,165
CaO	7,65	0,1364	4,190	4,190	4,190
SrO	1,86	0,0180	0,553	0,553	0,553
Na ₂ O	0,45	0,0073	0,224	0,448	0,224
CO ₂	23,69	0,5383	16,537	16,537	33,074
F	6,48	0,3411	10,478	—	10,478
Нераств. остаток*	0,55	—	—	—	—
Сумма	102,63				65,878
Поправка O = F ₂	—2,73				—5,239
Сумма	99,90				60,639
Уд. вес ($d_{\text{изм}}$)	4,154				Число атомов кислорода рав- но 60,639 — — 10,478 = = 50,161

* Механическая примесь кварца.

Для паризита коэффициенты кристаллохимических групп должны отвечать теоретическому наполнению ячейки $\text{Ce}_{12}\text{Ca}_6[\text{CO}_3]_{18}\text{F}_{12}$. Судя же по расчетам, они значительно отличаются от стандартных величин, что связано с неточностями в определении параметров элементарной ячейки и плотности паризита. Действительно, исправленное значение удельного веса (4,18) намного меньше обычного для паризита значения (4,30—4,35). Эти погрешности одинаково сказываются на числах атомов всех элементов, не нарушая фактического соотношения между ними. Поэтому после их сокращения на общий делитель будет получена формула паризита:



полностью совпадающая с результатами ее вычисления по обычному кислородному методу (см. табл. 5).

Метод расчета формулы по числу ионов кислорода в ячейке. Этот способ расчетов формулы минерала, аналогичный описанному выше, приводится Х. Штрунком (1962). Содержимое элементарной ячейки минерала определяют по числу атомов кислорода в ней по уравнению:

$$N_o = \frac{V_o d A_o \cdot 0,6023}{S},$$

где N_o — число атомов кислорода в элементарной ячейке;

V_o — объем элементарной ячейки в $\text{\AA}^3$;

d — удельный вес минерала в $\frac{\text{г}}{\text{см}^3}$;

A_o — сумма атомных количеств кислорода;

S — сумма анализа.

После нахождения числа N_o количество атомов каждого катиона (N_R) подсчитывается, исходя из его атомного количества (A_R), по формуле:

$$N_R = \frac{N_o \cdot A_R}{A_o}.$$

$$N_o = \frac{452,98 \cdot 4,12 \cdot 2,1369 \cdot 0,6023}{100,40} = 23,92 \approx 24,00.$$

Величина

$$N_R = \frac{N_o}{A_o} A_R = \frac{23,92}{2,1369}; A_R = 11,19 \text{ \AA}.$$

Расчет кристаллохимической формулы перовскита по этому методу приведен в табл. 13.

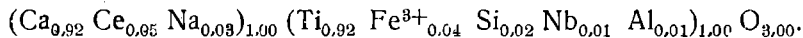
Расчет формулы перовскита по числу атомов кислорода в элементарной ячейке

$$d_{изм} = 4,12; \quad a_0 = 7,66 \text{ \AA}; \quad c_0 = 7,72 \text{ \AA}; \quad V_0 = 452,98 \text{ \AA}^3$$

Компо- ненты	Содержание, в весовых процентах	Молекуляр- ные количества	Атомные количества		Числа катионов в элементарной ячейке $N_R = 11,19 A_R$
			анионов	катионов	
SiO ₂	0,96	0,0160	0,0320	0,0160	0,179
TiO ₂	52,44	0,6563	1,3126	0,6563	7,344
ThO ₂	0,11	0,0004	0,0008	0,0004	0,004
Nb ₂ O ₅	1,26	0,0047	0,0235	0,0094	0,105
Al ₂ O ₃	0,20	0,0020	0,0060	0,0040	0,045
Fe ₂ O ₃	2,40	0,0150	0,0450	0,0300	0,336
Ce ₂ O ₃	5,60	0,0171	0,0513	0,0342	0,383
CaO	36,70	0,6544	0,6544	0,6544	7,323
Na ₂ O	0,63	0,0102	0,0102	0,0204	0,228
K ₂ O	0,10	0,0011	0,0011	0,0022	0,025
Сумма	100,40		2,1369		

Согласно расчетам наполнение элементарной ячейки перовскита оказывается следующим:

$(\text{Ca}_{7,32} \text{Ce}_{0,38} \text{Na}_{0,23} \text{K}_{0,03})_{7,96} (\text{Ti}_{7,34} \text{Fe}^{3+}_{0,34} \text{Si}_{0,18} \text{Nb}_{0,11} \text{Al}_{0,05})_{8,02} \text{O}_{23,92}$,
что после сокращения коэффициентов приводит к окончательной формуле минерала:



Сумма положительных зарядов равна 5,98, сумма отрицательных зарядов — 6,00.

ОСОБЕННОСТИ РАСЧЕТА ФОРМУЛ МЕТАМИКТНЫХ МИНЕРАЛОВ

Степень соответствия результатов изучения метамиктного вещества первичной природе минерала. Расчет формул метамиктных минералов представляет наибольшие трудности и часто не может быть произведен удовлетворительно ни по одному из описанных выше методов. При этом сама принципиальная возможность пересчета результатов химического анализа на точную и достоверную формулу далеко не для всех метамиктных минералов является очевидной и зависит от многих условий. Главным из них является степень соответствия действительности кристаллической структуры, которая приписывается метамиктному веществу на основе рентгеновских данных.

Как показало сопоставление серий дебаеграмм рентгено-аморфных образцов пирохлора, эвксенита и др., полученных при

разных условиях нагревания с порошкограммами неметамиктных образцов тех же минералов, каждому минералу соответствуют свои специфические условия прокаливания и определенная критическая температура, при которых исследуемое метамиктное вещество дает дифракционную картину, характерную для его кристаллического эквивалента. Правильная диагностика минерала при этом нередко осложняется нечеткостью линий и завуалированностью самой дебаеграммы. Оказалось также, что в процессе нагревания проба сначала может давать (из-за неполной ее раскристаллизации) порошкограмму, которая является смесью дебаеграмм различных составных частей пробы, а затем, после перегрева пробы выше критической температуры — новую дебаеграмму, являющуюся результатом разложения минерала на смесь различных кристаллических фаз. Так в дебаеграмме метамиктного приорита при нагревании его выше $800\text{—}1200^\circ$ устанавливаются линии неизвестной кубической фазы и эвксенита, иногда к ним примешиваются линии рутила (Комков, 1959). К порошкограмме пирохлора при нагревании пробы выше $800\text{—}900^\circ$ примешиваются линии ряда новых фаз — перовскита, луешита, ферсмита, фергусонита или самарскита (Горжевская, Сидоренко, 1962).

Таким образом, определяя первичную природу неизвестного метамиктного вещества по характеру его дебаеграммы, необходимо заранее знать условия прокаливания пробы для получения дифракционной картины, отвечающей первичной кристаллической структуре исследуемого соединения. Несовместимость этих двух условий при частом отсутствии точных критериев диагностики минерала по физическим свойствам нередко приводит к невозможности получения однозначного ответа о природе минерала. Это в свою очередь предопределяет неверность пересчета результатов химического анализа изучаемого вещества на кристаллохимическую формулу.

Сложность расчета кристаллохимических формул метамиктных веществ обуславливается также теми изменениями, которые претерпевает химический состав минерала в процессе метамиктного распада его кристаллической решетки и других преобразований его первичной природы. Как известно, в метамиктных образцах обычно содержится большее количество воды, чем в кристаллических разновидностях минерала. Содержание воды нередко возрастает параллельно с увеличением степени метамиктизации вещества. В некоторых минералах, как это установлено на примере пирохлора и других тантало-ниобатов, одновременно уменьшается количество щелочей и частично — кальция. Возможен также переход ряда компонентов минерала в иное валентное состояние.

Отклонение состава метамиктного вещества от первичного, характерного для минерала в момент его кристаллизации, может привести даже при незначительных величинах этих отклонений

к тому, что при дебаевском исследовании минерала окажется невозможным восстановить в процессе нагревания первичную кристаллическую решетку изучаемого минерала и вместо нее могут быть синтезированы совсем иные соединения. Таким образом, и с этой точки зрения оказывается принципиально допустимой неверная диагностика метамиктного вещества и отсюда — ошибки в расчете формул.

Все эти сложности изучения метамиктных минералов и приводят к тому, что коэффициенты в их формулах обычно сильно отличаются от теоретически требуемых значений, а формулы, полученные для разных образцов предположительно одного и того же минерала, нередко трудно сопоставимы друг с другом. Дело осложняется и тем, что даже при точной диагностике минерала невозможно определить какими-либо непосредственными методами характер и степень изменения метамиктного вещества по сравнению с его исходным составом. Это приводит к неясности в выборе способа вычисления общего делителя при расчете формулы минерала. Кроме того, неясной оказывается и сама возможность пересчета реального состава данного метамиктного образца на формулу его кристаллического эквивалента.

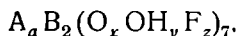
Очевидно, окончательно установленными являются формулы только тех метамиктных минералов, для которых предполагаемую кристаллическую структуру удалось подтвердить хотя бы на единичных кристаллических образцах, как это было выполнено, например для ортита, пирохлора и эвксенита, или, в крайнем случае, путем синтеза аналогичных по составу неметамиктных соединений. Только для таких минералов пересчет результатов химических анализов различных проб может приводить к сопоставимым результатам. В качестве примера тех приемов, которыми пользуются при выводе формул подобных минералов, можно остановиться на способах пересчета результатов химического анализа пирохлора, кристаллическая структура которого является точно установленной.

Расчет формулы метамиктного минерала на примере пирохлора. Идеальная формула минералов группы пирохлора имеет вид $A_2B_2X_7$. К группе А относятся катионы с радиусом около $1\text{\AA}$ — Ca^{2+} , Na^{+} , TR^{3+} , U^{4+} , Th^{4+} , в виде небольших примесей здесь могут присутствовать ионы других размеров — Ba^{2+} , Sr^{2+} и, вероятно, Mn^{2+} и Fe^{2+} . Некоторые авторы предполагают возможность вхождения в группу А также ионов гидроксония H_3O^{+} (Сергеев, 1961 и др.). Катионы группы В имеют радиус около $0,7\text{\AA}$ и представлены Nb^{5+} , Ti^{4+} , Ta^{5+} . Сюда же обычно относят Fe^{3+} , Al^{3+} , Mg^{2+} , Zr^{4+} , а также Si^{4+} . Состав группы Х можно выразить как $(\text{O}_{7-y-z}\text{OH}_y\text{F}_z)_7$, где величина $(y+z)$ обычно принимает различные значения от 0,8 до 1,5.

Сопоставление многочисленных анализов метамиктных и кристаллических образцов пирохлора и их пересчеты, выполненные

Л. С. Бородиным и И. И. Назаренко (1957, 1957а), показали постоянное отклонение состава пироксенов от идеальной формулы, главным образом, за счет недостатка катионов в группе А. Их число в группе А, судя по результатам многочисленных подсчетов (Гинзбург и др., 1958), может принимать любые значения от 0,5 до 2,0. По представлениям Л. С. Бородина (1957); недостаток катионов группы А может быть обусловлен или их первичным дефицитом в минерале благодаря изоморфным замещениям $3\text{Ca}^{2+} \leftarrow 2\text{Tr}^{3+}$, $2\text{Ca}^{2+} \leftarrow \text{Th}^{4+}$, $\text{Nb}^{5+} \leftarrow \text{Ti}^4$ с одновременным уменьшением числа катионов группы А, или выщелачиванием натрия и частично кальция при вторичных изменениях минерала.

В соответствии с указанными изоморфными замещениями одних компонентов другими формула пироксена в общем виде может быть записана так:



Ввиду изменчивости состава пироксенов, их гидратации и недостатка катионов в группе А при расчете формул конкретных образцов минерала оказывается невозможным определение общего делителя, как обычно, по сумме атомных количеств кислорода. Точно так же не пригодна для этой цели сумма атомных количеств группы А. Вычисление общего делителя обычно производится по катионам группы В, количество которых всегда принимается равным теоретическому — 2,00. Предполагается, что общее число катионов кристаллохимической группы В не может иметь первичный дефицит, так как нет ионов с валентностью больше 5, способных замещать в пироксенах ниобий, и что оно не подвергается изменениям также в процессе метамиктного распада минерала и других его изменений.

Существуют два метода расчета формул пироксенов, которые основаны на определении общего делителя по сумме атомных количеств катионов группы В.

Метод Л. С. Бородина (Бородин, Назаренко, 1957). Результаты вычислений приведены в табл. 14. Порядок вычислений формулы пироксена по этому методу следующий.

1. Находятся (как обычно) молекулярные и атомные количества для всех компонентов минерала.

2. Подсчитывается сумма атомных количеств катионов группы В.

3. Находится расчетный фактор делением этой суммы на 2.

4. Определяются коэффициенты катионов в формуле как частное от деления их атомных количеств на расчетный фактор.

5. Исходя из числа атомов каждого катиона и его заряда, определяется суммарное количество валентностей всех катионов W_k .

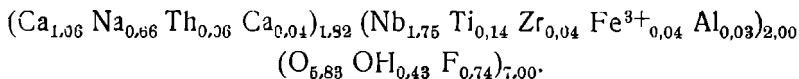
6. Делением атомного количества фтора на расчетный фактор определяется z — коэффициент фтора в формуле.

Расчет формулы пирохлора по методу Л. С. Бородина

Компоненты	Содержание, в весовых процентах	Молекулярные количества ($\times 10\,000$)	Атомные количества		Коэффициенты атомов N_R	Положительные заряды N_O
			анионов	катионов		
В	Nb ₂ O ₅	62,45		4695	1,75	8,75
	Ta ₂ O ₅	0,10		6	—	—
	TiO ₂	2,95		369	0,14	0,56
	ZrO ₂	1,46		118	0,04	0,16
	Fe ₂ O ₃	0,87		109	0,04	0,12
	Al ₂ O ₃	0,45		88	0,03	0,09
				5384	2,00	
Расчетный фактор = $\frac{5384}{2} = 2692$						
А	ThO ₂	4,42	167	167	0,06	0,24
	Ce ₂ O ₃	1,88	57	114	0,04	0,12
	CaO	15,92	2840	2840	1,06	2,12
	MnO	0,07	10	10	—	—
	Na ₂ O	5,46	881	1762	0,66	0,66
	K ₂ O	0,26	27	55		
					1,82(a)	12,82
	H ₂ O+	1,44	(799)	(1598)	(0,59)	—
	F	3,80		2000	0,74	—
	Сумма	101,53	—	—	—	—
	O=F ₂	1,60	—	—	—	—
	Сумма	99,93				

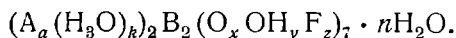
7. Вычисляется суммарное число ионов гидроксила (y) и фтора (z) по уравнению: $y + z = 14 - W$, где 14 — максимально возможная сумма отрицательных зарядов, согласно идеальной формуле пирохлора $A_2B_2O_7$. Число ионов гидроксила в формуле минерала найдем по равенству: $y = 14 - (W_k + z) = 14,00 - (12,82 + 0,74) = 0,43$. Остающаяся часть воды в формулу не вводится. Считается, что она вошла в состав пирохлора в процессе его изменения (гидратации).

8. Число атомов кислорода равно: $x = 7 - (y + z) = 7 - (0,43 + 0,74) = 5,83$. Согласно расчетам получается следующая формула пирохлора:



Метод А. А. Кухаренко и А. С. Сергеева. Принципиальным отличием расчетов по этому способу от вычислений по методу Л. С. Бородиня является введение в формулу пирохлора ионов оксония H_3O^{1+} для компенсации недостатка числа катионов в группе А. При расчетах по способу А. А. Кухаренко и А. С. Сергеева имеющийся в результатах анализа водород должен быть распределен между ионами оксония в группе А, гидроксильными группами в ионной части формулы и молекулами адсорбционной воды, обычно присутствующей в пирохлорах.

Формулу пирохлора с учетом всех этих типов вхождения водорода в минерал можно написать в следующем виде:



Общий порядок вычисления формулы пирохлоров приводится ниже.

1. Находятся (как обычно) молекулярные количества окислов и соответствующие им атомные количества катионов, включая водород, а также атомное количество фтора.

2. Определяется расчетный фактор как частное от деления суммы атомных количеств катионов группы В на 2.

3. Делением атомных количеств на расчетный фактор находятся числа атомов всех катионов, входящих в состав минерала, а также число атомов фтора z .

4. Находится сумма числа атомов катионов в группе А, обозначаемая через a .

5. Подсчитывается сумма валентностей W_k всех катионов групп В и А.

6. Определяется общее число атомов водорода, полученное из результатов анализа. Обозначим его через h .

7. Находится количество n молекулярной воды по формуле

$$n = \frac{W_k + h + z \pm 2a - 18}{2}.$$

8. Дальнейший порядок подсчета числа оксониев, групп ОН и ионов кислорода различен при $n > 0$ (адсорбционная вода имеется) и при $n \leq 0$ (адсорбционная вода отсутствует). В зависимости от абсолютной величины n расчеты ведутся по следующим формулам:

	Первый вариант $n > 0$	Второй вариант $n \leq 0$
Число ионов оксония	$k = 2 - a$	$k = 2 - (a - n)$
„ „ кислорода	$x = W_k - (a + 5)$	$x = W_k + k - z$
„ гидроксильных групп	$y = 7 - (x + 0)$	$y = 14 - (W_k + x + z)$

Примеры расчета формул пирохлора по описанному методу приведены в табл. 15 (вариант $n > 0$) и 16 (вариант $n \leq 0$).

Для пирохлора из табл. 15 $n = \frac{13,02 + 0,95 + 0,73 + 3,50 - 18}{2} = 0,10$.

Дальнейший расчет ведется по уравнениям первого варианта. При этом число ионов H_3O^{1+} будет равно $k = 2 - 1,75 = 0,25$, число ионов кислорода — $x = 12,98 - (1,75 + 5) = 6,23$ и дополнительных групп $\text{OH} - y = 7 - (6,23 + 0,73) = 0,04$. В целом формула пирохлора будет иметь следующий вид:

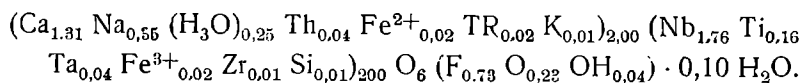
Таблица 15

Расчет формулы пирохлора по методу А. А. Кухаренко и А. С. Сергеева
($n > 0$)

Компо- ненты	Содержание, в весовых прсентах	Молеку- лярные коли- чества ($\times 10\,000$)	Атомные количества		Кoeffи- циенты атомов	Положи- тельные заряды, W_k	
			анионов	катионов			
В {	Nb ₂ O ₅	62,01	2332	—	4664	1,76	8,80
	Ta ₂ O ₅	2,21	50	—	100	0,04	0,20
	TiO ₂	3,47	435	—	435	0,16	0,64
	ZrO ₂	0,37	30	—	30	0,01	0,04
	Fe ₂ O ₃	0,47	29	—	58	0,02	0,06
	SiO ₂	0,17	28	—	28	0,01	0,04
					5315	2,00	

Расчетный фактор равен $\frac{5315}{2} = 2658$

А	UO_3	0,025	—	—	—	—	—
	ThO_2	2,59	98	—	98	0,04	0,16
	TR_2O_3	0,75	23	—	46	0,02	0,03
	FeO	10,44	61	—	61	0,02	0,04
	CaO	9,56	3489	—	3489	1,31	2,62
	MnO	0,06	8	—	8	—	—
	Na_2O	2,87	463	—	926	0,35	0,35
	K_2O	0,17	18	—	36	0,01	0,01
						1,75(a)	13,02
	H_2O^+	1,91	2530	—	2530	0,95(h)	—
	H_2O^-	0,37				—	—
	F^-	3,70	—	1947	—	0,73(z)	—
Сумма		101,15	—	—	—	—	—
Поправка $\text{O}=\text{F}_2$		1,56	—	—	—	—	—
Сумма		99,59	—	—	—	—	—



Для пирохлора из табл. 16

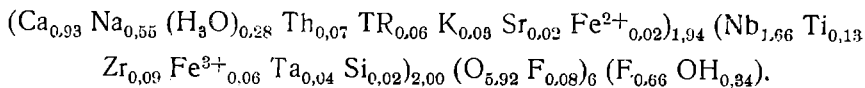
$$n = \frac{12,64 + 1,18 + 0,74 + 3,36 - 18}{2} = -0,04.$$

Таблица 16

Расчет формулы пирохлора по методу А. А. Кухаренко и А. С. Сергеева
($n \leq 0$)

Компо- ненты	Содержание, в весовых процентах	Молеку- лярные количе- ства ($\times 10\,000$)	Атомные количества		Кэффи- циенты атомов	Положи- тельные заряды W_k	
			анионов	катионов			
В	Nb ₂ O ₅	58,18	1689	—	4378	1,66	8,30
	Ta ₂ O ₅	2,15	49	—	98	0,04	0,20
	TiO ₂	2,72	341	—	341	0,13	0,52
	ZrO ₂	3,00	243	—	243	0,09	0,36
	Fe ₂ O ₃	1,24	78	—	156	0,06	0,18
	SiO ₂	0,30	50	—	50	0,02	0,08
				5266	2,00		
Расчетный фактор равен $\frac{5266}{2} = 2633$							
А	UO ₃	0,017	—	—	—	—	—
	ThO ₂	5,00	189	—	189	0,07	0,28
	TR ₂ O ₃	2,71	82	—	164	0,06	0,18
	FeO	0,44	61	—	61	0,02	0,04
	MnO	0,05	7	—	7	—	—
	CaO	13,72	2446	—	2446	0,93	1,84
	SrO	0,53	51	—	51	0,02	0,04
	Na ₂ O	4,51	728	—	1456	0,55	0,55
	K ₂ O	0,34	36	—	72	0,03	0,02
						1,68(a)	12,64
H ₂ O+		2,42	1549	—	3098	1,18(h)	
H ₂ O—		0,37					
F		3,70	—	1947	—	0,74(z)	
Сумма		101,39	—	—	—	—	—
Поправ- ка O = F ₂		1,56	—	—	—	—	—
Сумма		99,83	—	—	—	—	—

Последующий расчет показывает, что число ионов H_3O^{1+} равно $k = 2 - (1,68 + 0,04) = 0,28$, число ионов кислорода — $x = 12,64 + 0,28 - 7 = 5,92$, а число дополнительных групп OH — $y = 14 - (12,64 + 0,28 + 0,74) = 0,34$. В окончательном виде формула пирохлора может быть записана так:



Введение именно F^{1-} на место кислорода в октаэдрическое окружение катионов группы В, как это сделано в изображенной формуле, считается А. А. Кухаренко и А. С. Сергеевым целесообразным на основании большего кристаллохимического сходства O^{2-} и F^{1-} , чем O^{2-} и OH^{1-} .

Оба описанных выше метода обработки результатов химического анализа пирохлора (с переводом или без перевода части H_2O в оксоний) рассчитаны на получение теми или иными математическими приемами формул, максимально приближающихся к идеальной стехиометрии кристаллического пирохлора — $\text{A}_2\text{B}_2\text{X}_7$. В действительности же, полученные таким образом формулы метамиктных образцов минерала весьма условны и иллюстрируют лишь реальный состав анализировавшихся проб, причем степень их отличия от первичного состава кристаллического пирохлора установить невозможно. Это всегда следует иметь в виду при различных генетических построениях, основанных на попытках увязать особенности состава минерала с параметрами элементарной ячейки и физическими свойствами. При таких сопоставлениях очень часто не учитывается, что полученная из анализа формула не характеризует истинный состав пирохлора, а параметры элементарной ячейки, рассчитанные по дебаеграммам, отвечают прокаленному искусственно синтезированному веществу, а не реальной первичной решетке минерала.

Условность формул, полученных по обоим методам, видна также из способа нахождения величины общего делителя по катионам группы В, при котором предполагается, что коэффициент группы В всегда точно равен 2,00. Однако это предположение не доказывалось никакими особыми методами исследования, а возникло из сопоставления цифр многочисленных химических анализов пирохлора. Из них видно, что по отношению к группе В количество катионов А действительно почти всегда меньше, при этом отличается на величину, сильно варьирующую по отдельным анализам. Однако эти цифры могут говорить лишь о большей подвижности катионов группы А по сравнению с компонентами В при разрушении и вторичных изменениях пирохлора, но отнюдь не о сохранении при этих превращениях постоянным числа катионов В.

Таким образом, даже для таких метамиктных минералов, для которых подобно пирохлору кристаллическая структура точно установлена, расчет формул сопряжен с многими трудностями и возможен лишь при некоторых условных допущениях.

О ВЫВОДЕ ФОРМУЛЫ НОВОГО МИНЕРАЛА

Вывод кристаллохимической формулы нового минерала производится только на основе детального структурного исследования, выполнение которого одновременно с минералогическим и химическим изучением нового минерала не всегда возможно. Поэтому большей частью для новых минералов результаты анализа приходится пересчитывать на простейшие химические формулы.

Расчет простейшей химической формулы. Вывод формулы нового минерала начинается с подсчета молекулярных, а затем — атомных количеств всех его компонентов. Отношение суммарного атомного количества катионов к сумме атомных количеств анионов покажет, в какой пропорции находится в минерале число катионов и анионов. Предположим, например, что по атомным количествам определено, что в каком-то минерале число катионов относится к числу анионов (O , OH^{1-} , Cl^{1-} , F^{1-} , S^{2-}) приблизительно как 1 : 2. Очевидно, его формула в простейшем виде может быть записана как RO_2 , или R_2O_4 , или R_3O_6 , или R_4O_8 и т. д.

Выбор одного из вариантов формулы может быть основан либо на каких-то предположениях о структуре минерала (исходя из его физических свойств, особенностей состава, предварительных рентгеновских данных), либо на сопоставлении между собой кристаллохимических особенностей катионов, входящих в состав минерала. Так, для начала, можно группировать катионы в соответствии с их радиусами и определить соотношение суммарных атомных количеств этих групп катионов. Предположим, что в нашем примере в минерале имеются две группы атомов — с R_1 около $1\text{\AA}$ и около $0,7\text{\AA}$, а соотношение их атомных количеств равно 1 : 2. Очевидно, из всех вариантов формул в этом случае возможны лишь такие: $R_1'R_2''O_6$, $R_2'R_4''O_{12}$ и т. д. Подобные подсчеты значительно усложняются тем, что на распределении катионов по кристаллохимическим группам помимо их размера сказывается и ряд других свойств — степень поляризации катионов, величина их электроотрицательности, явления эндокриптии и, наконец, особенности кристаллической решетки самого минерала, природа которого при выводе формулы нового минерала почти всегда неизвестна.

Сопоставление химических формул с рентгеновской плотностью минерала. Неясность положения многих катионов в кристаллической решетке приводит к тому, что для нового минерала может быть получено несколько вариантов формулы. Очевидно, наиболее удачной окажется та, которая ближе всего отвечая предполагаемой химической природе минерала и его гипотетическим структурным особенностям будет приводить к рентгеновской плотности ми-

нерала, равной или близкой к его экспериментально установленной плотности. Однако такое совпадение может быть и случайным, получившимся благодаря погрешностям в исследовании минерала. Окончательно установленной формулу можно будет считать лишь после ее подтверждения детальными исследованиями структуры минерала.

В качестве примера вывода формулы нового минерала и сопоставления ее с удельным весом и данными рентгеновского исследования остановимся на пересчете результатов химического анализа карбоцернита.

Как видно из табл. 17, отношение атомных количеств углерода и кислорода равно $723 : 2175 = 1 : 3$, а атомные количества углерода и остальных катионов практически равны между собой. Таким образом, соотношение главных атомов в карбоцерните может быть выражено как RCO_3 , и описываемый минерал следует считать карбонатом кальция, натрия, стронция и редких земель. Определенное химическим анализом Fe_2O_3 и часть H_2O обусловлено примесью гидроокислов железа в исследовавшемся материале и в формулу не вводится. Остальная часть H_2O , очевидно, является адсорбционной, несмотря на ее удаление из минерала лишь при температуре более 110° .

В простейшем виде формулу карбоцернита можно представить как:

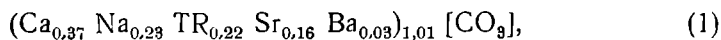
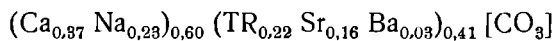


Таблица 17

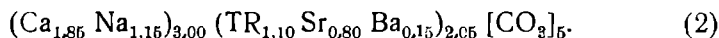
Расчет формулы карбоцернита

Компоненты	Содержание, в весовых процентах	Молеку- лярные количе- ства ($\times 10\,000$)	Атомные количества		Атомные количе- ства групп катионов
			анионов	катионов	
CaO	15,10	269	269	269	732
SrO	12,43	120	120	120	
BaO	3,20	21	21	21	
Fe_2O_3	1,78	—	—	—	
$(\text{Ce}, \text{La})_2\text{O}_3$	26,10	79	237	158	
Na_2O	5,11	82	82	164	723
Нераств. остаток	1,40	—	—	—	
CO_2	31,82	723	1446	723	
H_2O^+	2,10	117	—	—	
H_2O^-	0,33	—	—	—	
Сумма	99,64		2175	1455	

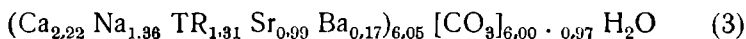
хотя в этом случае в одну кристаллохимическую группу с приблизительно одинаковыми по размеру катионами кальция, натрия и редких земель попадают такие крупные катионы, как стронций и барий. Учитывая, что стронций, барий и редкие земли в кристаллических решетках карбонатов нередко занимают одинаковые структурные позиции, можно предложить для карбоцернаита и другую формулу:



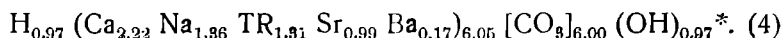
или в виде, приведенном к целым коэффициентам,



Наконец, при попытке ввести в минерал воду, приходим к следующим кристаллохимическим формулам карбоцернаита:



или



Сопоставим рентгеновские плотности минерала, соответствующие всем этим формулам, с его удельным весом, равным 3,53, если известно, что сингония минерала ромбическая, а параметры его ячейки $a_0 = 6,39 \pm 0,01$, $b_0 = 7,27 \pm 0,02$, $c_0 = 5,21 \pm 0,01$ Å. В этом случае для формулы (1) согласно равенству (2) на стр. 16 имеем:

$$\rho = z \frac{129,10 \cdot 1,6602}{242,03} = z \cdot 0,89.$$

Так как число z неизвестно из-за неполноты рентгеновских исследований, приходится придавать ему разные значения от 1 и выше, получая таким образом ряд величин возможной рентгеновской плотности минерала: $z = 1$, $\rho = 0,89$; $z = 2$, $\rho = 1,78$; $z = 3$, $\rho = 2,67$; $z = 4$, $\rho = 3,56$; $z = 5$, $\rho = 4,45$ и т. д. Только при $z = 4$ рентгеновская плотность оказывается близкой к удельному весу минерала.

Аналогичным образом для формулы (2) получаем:

$$\rho = z \cdot \frac{645,50 \cdot 1,6602}{242,03} = z \cdot 4,43,$$

и уже при $z = 1$ величина рентгеновской плотности резко отличается от удельного веса карбоцернаита.

Соответственно для формул (3) и (4) $\rho = z \cdot 5,43$, значительно превышая удельный вес минерала даже при вхождении одной формульной единицы в элементарную ячейку карбоцернаита.

Из сопоставления всех полученных значений z и ρ видно, что наиболее удачен с этой точки зрения первый вариант формулы карбоцернаита. Число формульных единиц в этом случае оказы-

* Небольшой избыток положительных валентностей в формулах вызван округлением коэффициентов катионов.

вается четным ($z=4$), что является характерным для большинства ромбических карбонатов, а рентгеновская плотность минерала ($\rho=3,56$) в этом случае практически равна его удельному весу ($d=3,53$). Напомним еще раз, что такое совпадение не носит, однако, принципиального характера и не является строгим доказательством достоверности предлагаемой формулы карбоцернаита. Окончательное ее установление может быть выполнено лишь после специального рентгеноструктурного исследования.

ИЗОБРАЖЕНИЕ СОСТАВА МИНЕРАЛА В ВИДЕ МИНАЛОВ

Понятие о миналах. Помимо кристаллохимических формул в практике минералогических исследований широко используется метод изображения состава минерала в виде смеси некоторых гипотетических соединений или молекул, называемых миналами. Такovy альбитовая $\text{Na}\{\text{AlSi}_3\text{O}_8\}$ и анортитовая $\text{Ca}\{\text{Al}_2\text{Si}_2\text{O}_8\}$ «молекулы» в плагиоклазах, фаялитовый $\text{Fe}_2[\text{SiO}_4]$ и форстеритовый $\text{Mg}_2[\text{SiO}_4]$ компоненты в оливинах и т. д., причем во всех случаях формула минала строго изотипна по отношению к кристаллохимической формуле самого минерала. Не вскрывая всей сущности процессов изоморфизма, представление состава изучаемого соединения в виде миналов является наиболее наглядным способом изображения основных особенностей химизма минерала. Оно очень удобно при построении графиков, показывающих зависимость оптических свойств, удельного веса, параметров элементарной ячейки минерала от его состава.

Содержание миналов в минерале дается в молекулярных процентах. Оно может быть подсчитано различными способами: исходя из кристаллохимической формулы минерала; по молекулярным количествам окислов или по атомным количествам катионов.

Расчет миналов. Наиболее простым и хорошо увязывающимся с кристаллохимическими особенностями минерала является способ расчета миналов по кристаллохимической формуле минерала. В качестве исходных данных в этом случае используют коэффициенты атомов в формуле. По ним подсчитывается общее число атомов, входящих в каждый минал. Процентное содержание каждого минала в минерале определится отношением числа атомов в этом минале к числу всех атомов в кристаллохимической формуле минерала, которое принимается за 100%.

Так, рассчитывая состав пироксена, с формулой $(\text{Ca}_{0,97}\text{Na}_{0,02})_{0,99}(\text{Mg}_{0,80}\text{Fe}^{3+}_{0,08}\text{Fe}^{2+}_{0,06}\text{Al}_{0,05}\text{Ti}_{0,01})_{10,0}(\text{Si}_{0,85}\text{Al}_{0,15})_{2,00}\text{O}_{6,00}$ на ряд миналов: диопсид $\text{CaMg}(\text{Si}_2\text{O}_6)$; геденбергит $\text{CaFe}(\text{Si}_2\text{O}_6)$; иогансенит $\text{CaMn}(\text{Si}_2\text{O}_6)$; эгирин $\text{NaFe}^{3+}(\text{Si}_2\text{O}_6)$; Fe-Al-минал $\text{CaFe}^{3+}(\text{AlSiO}_6)$; Ti-минал $\text{CaTi}(\text{Al}_2\text{O}_6)$; Al-минал $\text{CaAl}(\text{AlSiO}_6)$, примем сначала сумму атомов в общей формуле этого пироксена, равную 9,99 за 100%.

Содержание диопсидового компонента можно вычислить, исходя из коэффициента Mg в формуле пироксена, так как ни в какие другие из указанных выше мишалов Mg не входит. Общее число атомов в диопсидовом минале будет складываться, согласно его формуле из суммы коэффициента Mg (0,80), равного ему количества Ca (0,80), вдвое большего числа кремния (1,60), шестикратного числа атомов кислорода (4,80), и окажется, таким образом, равным 8,00. Эта цифра составляет 80% от числа всех атомов в кристаллической формуле пироксена и показывает содержание диопсидового минала в изучаемом образце. Точно также можно подсчитать содержание геденбергитового компонента, исходя из коэффициента при двухвалентном железе, иогансенитового минала — по количеству Mn, акмитового — по Na, титановой «молекулы» — по Ti и т. д. Последовательность этих расчетов показана в табл. 18.

Вычисление процентного содержания различных мишалов в том же образце пироксена можно произвести и другими способами, например по молекулярным количествам окислов, по которым подсчитывается молекулярное количество каждого минала и затем определяется их процентное содержание в минерале по отношению к сумме молекулярных количеств всех окислов, указанных в результате анализа. Для этого сначала удобно записать формулы всех мишалов пироксена, на которые будет производиться пересчет его состава, в виде окислов:

1) диопсид — $\text{CaO} \cdot \text{MgO} \cdot 2\text{SiO}_2$; 2) геденбергит — $\text{CaO} \cdot \text{FeO} \cdot 2\text{SiO}_2$; 3) иогансенит — $\text{CaO} \cdot \text{MnO} \cdot 2\text{SiO}_2$; 4) эгирин — $0,5\text{Na}_2\text{O} \cdot 0,5\text{Fe}_2\text{O}_3 \cdot 2\text{SiO}_2$ или $\text{Na}_2\text{O} \cdot \text{Fe}_2\text{O}_3 \cdot 4\text{SiO}_2$; 5) Fe-Al-минал — $\text{CaO} \cdot 0,5\text{Fe}_2\text{O}_3 \cdot 0,5\text{Al}_2\text{O}_3 \cdot 2\text{SiO}_2$; или $2\text{CaO} \cdot \text{Fe}_2\text{O}_3 \cdot \text{Al}_2\text{O}_3 \cdot 4\text{SiO}_2$; 6) Ti-минал — $\text{CaO} \cdot \text{TiO}_2 \cdot \text{Al}_2\text{O}_3$; 7) Al-минал — $\text{CaO} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3 \cdot \text{SiO}_2$.

Содержание диопсидового компонента вычисляется по MgO. Молекулярное количество этого компонента будет складываться из суммы всего молекулярного количества MgO в минерале, равного ему молекулярного количества CaO и вдвое большего молекулярного количества SiO_2 . Для пироксена из табл. 19 искомая сумма сложится из чисел 3611 (MgO), 3611 (CaO) и 7222 (2SiO_2) и будет равна 14444. Это число составляет 83,4% от общего молекулярного количества всех компонентов минерала (17314), отсюда содержание диопсидового минала в пироксене равно 83,4 молекулярным процентам. Аналогично подсчитывается содержание всех других мишалов пироксена (табл. 19).

Характерно, что при любом способе расчетов цифры содержания гипотетических «молекул» в минерале зависят от последовательности производившихся вычислений. Предположим, что по результатам химического анализа пироксена подсчитано, что компоненты присутствуют в нем в следующих молекулярных количествах: CaO — 3806; MgO — 3502; FeO — 340; SiO_2 — 8420 и т. д., а сумма всех молекулярных количеств окислов равна 15820.

Расчет миналов пироксена по его кристаллохимической формуле

Компоненты	Коэффициенты атомов в формуле	М и н а л ы							Остаток
		1 $\text{CaMg}(\text{Si}_2\text{O}_6)$	2 $\text{CaFe}^{2+}(\text{Si}_2\text{O}_6)$	3 $\text{CaMn}(\text{Si}_2\text{O}_6)$	4 $\text{NaFe}^{3+}(\text{Si}_2\text{O}_6)$	5 $\text{CaFe}^{3+}(\text{AlSiO}_6)$	6 $\text{CaTi}(\text{Al}_2\text{O}_6)$	7 $\text{CaAl}(\text{AlSiO}_6)$	
Ca	0,97	0,80	0,06	—	—	0,06	0,01	0,03	0,01
Na	0,02	—	—	—	0,02	—	—	—	—
Mg	0,80	0,80	—	—	—	—	—	—	—
Fe^{3+}	0,08	—	—	—	0,02	0,06	—	—	—
Fe^{2+}	0,06	—	0,06	—	—	—	—	—	—
Al	0,05	—	—	—	—	—	—	0,03	0,02
Ti	0,01	—	—	—	—	—	0,01	—	—
Si	1,85	1,60	0,12	—	0,04	0,06	—	0,03	—
Al	0,15	—	—	—	—	0,06	0,02	0,03	0,04
O	6,00	4,80	0,36	—	0,12	0,36	0,06	0,18	0,12
С у м м а	9,99	8,00	0,60	—	0,20	0,60	0,10	0,30	0,19
Содержание миналов, в %	100	80	6	—	2	6	1	3	2

Если по этим цифрам расчет содержания миналов начать с «диоксида», приняв за основу MgO , его количество в пироксене будет определено в 88,5% ($MgO + CaO + 2SiO_2 = 3502 + 7004 = 14008$; $14008 : 158,2 = 88,5\%$). При этом для CaO останется молекулярное количество 304. Это число меньше молекулярного количества закиси железа, поэтому расчет геденбергитового компонента придется вести не по FeO , а по остатку CaO ($CaO + FeO + 2SiO_2 = 304 + 304 + 608 = 1216$; $1216 : 158,2 = 7,7\%$).

Содержание геденбергитового минала будет определено в этом случае в 7,7%, причем остаток неиспользованного молекулярного количества FeO будет равен 36. Если же все расчеты начать с вычисления содержания в пироксене геденбергитового минала, будут

Таблица 19

Расчет миналов пироксена по молекулярным количествам окислов

Компо- ненты	Содержание, в весовых процентах	Молекулярные количе- ства ($\times 10\,000$)	М и н а л ы							Остаток
			$CaO \cdot MgO \cdot 2SiO_2$	$CaO \cdot FeO \cdot 2SiO_2$	$CaO \cdot MnO \cdot 2SiO_2$	$Na_2O \cdot Fe_2O_3 \cdot 4SiO_2$	$2CaO \cdot Fe_2O_3 \cdot Al_2O_3 \cdot 2SiO_2$	$CaO \cdot TiO_2 \cdot Al_2O_3$	$CaO \cdot Al_2O_3 \cdot SiO_2$	
SiO_2	49,87	8303	7222	558	16	212	270	—	25	—
TiO_2	0,48	60	—	—	—	—	—	60	—	—
Al_2O_3	4,52	443	—	—	—	—	135	60	25	223
Fe_2O_3	3,00	188	—	—	—	53	135	—	—	—
FeO	2,01	279	—	279	—	—	—	—	—	—
MnO	0,06	8	—	—	8	—	—	—	—	—
MgO	14,56	3611	3611	—	—	—	—	—	—	—
CaO	24,50	4369	3611	279	8	—	270	60	25	116
Na_2O	0,33	53	—	—	—	53	—	—	—	—
Сумма	—	17314	14444	1116	32	318	810	180	75	339
Содержание ми- налов в %	—	100	83	6	(0,2)	2	5	1	1	2

Примечание. Полученные содержания миналов несколько отличаются от результатов, приведенных в табл. 18. Это связано с неизбежными погрешностями при округлении различных величин как при вычислении содержания миналов в табл. 18 и 19, так и при выводе самой кристаллохимической формулы, взятой за основу при первом способе подсчета миналов.

получены другие цифры: для «геденбергита» — 8,6%, для «диопсида» — 87,6%.

Как правило, состав минерала не удается расписать без остатка по тем или иным миналам. Чаще всего наличие остатка может быть объяснено неточностями выполнения химического анализа. Однако оно может быть вызвано также вхождением различных элементов в минерал по многообразным и более сложным схемам изоморфизма, чем те, которые подразумеваются при изображении его состава в виде гипотетических миналов.

ПОГРЕШНОСТИ РАССЧИТАННЫХ ФОРМУЛ МИНЕРАЛОВ И ИХ ИСТОЧНИКИ

Погрешности расчетов. Просмотр большого числа опубликованных формул минералов показывает, что среди погрешностей допускаемых при их расчете, наиболее распространены два типа ошибок.

Первый из них, связанный с простыми неточностями арифметических вычислений, главным образом при округлении различных промежуточных величин при подсчетах, сказывается в формуле минерала в отсутствии компенсации положительных и отрицательных валентностей.

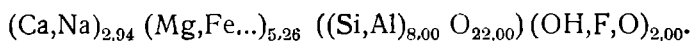
Погрешности второго типа связаны с необходимостью учета механических примесей в составе почти любой анализировавшейся пробы. Они состоят в произвольном исключении из подсчетов части обнаруженных химиков компонентов, которые по мнению автора расчетов не характеризуют состав минерала. При этом не учитывается, что присутствие данного лишнего окисла вызвано примесью какого-то определенного минерала. Следовательно, поправки, как бы мали они ни были, должны быть введены и в результаты других анализов. Так, исключая из расчетов формулы ильменита SiO_2 , связанное с загрязнением изучавшейся пробы сфеном, надо исправить цифры анализа и на соответствующие количества CaO и TiO_2 . Проще всего это сделать по молекулярным количествам окислов, исключив все молекулярное количество SiO_2 и уменьшив на такую же величину молекулярные количества CaO и TiO_2 согласно формуле сфена $\text{CaO} \cdot \text{TiO}_2 \cdot \text{SiO}_2$.

Однако ввести подобные поправки в расчеты удастся лишь в том случае, если в состав минерала-примеси в заранее известном или теоретически предполагаемом количестве входит какой-либо компонент, отсутствующий в исследуемом соединении. В то же время из-за того, что состав минерала-примеси обычно известен очень приблизительно, а чаще всего принимается за теоретический, вводимые нами в цифры анализа поправки сами не лишены неточностей и ошибок, которые будут тем более значительными, чем в большем количестве минерал-примесь присутствовал в пробе. Таким образом, качество рассчитываемой формулы мине-

рала будет прямо зависеть также и от чистоты анализировавшегося материала. Как показывает опыт, для успешного расчета формул содержание примесей в изучаемой пробе минерала не должно превышать 1%.

Несмотря на простоту расчетов подобного рода, ошибки в их выполнении очень часты и нередко приводят к серьезным погрешностям в формулах минералов, что показано на ряде конкретных примеров И. Д. Борнеман-Старынкевич (1959).

Погрешности, связанные с неточностями химического анализа. Нередко при расчете формул, даже при полном соблюдении всех правил вычислений, получающиеся коэффициенты заметно отклоняются от теоретически требуемых значений. Насколько часты такие отклонения, видно, например, из того, что из пересчетов формул 54 новых минералов Ловозерского массива только 5 приводят к удовлетворительным результатам с незначительным отклонением коэффициентов от теоретически требуемых величин. Не менее часты погрешности такого рода и в формулах известных минералов. Так, А. Гровсом (1953) в качестве учебного примера пересчета результатов химического анализа дается формула амфибола, не согласующаяся с кристаллохимическими особенностями минерала:



К сожалению, почти во всех этих случаях отклонения коэффициентов от стандартных значений никак не объясняются, несмотря на их явное противоречие с действительной структурой минерала. Реже, главным образом, в случае сравнительно малых величин отклонений, их пытаются связать с теми или иными специфическими особенностями кристаллической решетки данного минерала, произвольно рассматривая такие отклонения как одно из доказательств наличия дефектов в структуре минерала. Намечается также и другая тенденция в расчете формул — путем исключения из результатов анализа различных гипотетических примесей добиться получения абсолютно точных коэффициентов.

В этой связи интересно оценить, в какой мере в формулах отклонения коэффициентов от теоретических значений зависят от точности химического анализа и, следовательно, насколько достоверно они могут отражать действительные особенности состава и кристаллической структуры данного образца минерала по сравнению со стандартными.

Обычным и, пожалуй, единственным критерием в оценке качества результатов химического анализа, применяемым в широком кругу неспециалистов-химиков, принято считать близость суммы цифр анализа к 100%. Как показывает опыт химико-аналитических исследований, эта сумма для хорошего анализа мо-

жет колебаться в пределах 99,75—100,5%. Иногда указывается и более широкий интервал — от 99,5 до 100,75, хотя он вызывает сомнения у большинства аналитиков. Незначительное завышение всех цифр анализа может происходить из-за неизбежного загрязнения пробы в ходе работы, а при отсутствии холостой пробы — также из-за наличия примесей, хотя бы ничтожных, в реактивах. Сумма цифр менее 100% указывает на неполноту определения части или всех компонентов минерала. Она может свидетельствовать также, при значительном отклонении от 100%, о том, что определение части компонентов в ходе анализа вообще не было выполнено.

Оценка результатов химического анализа по близости суммы цифр к 100% не учитывает того, насколько полно обнаруженные химиком компоненты характеризуют состав минерала и как чисто произведено их отделение друг от друга. Так, например, если химиком при анализе силиката из-за отсутствия предварительных данных о составе минерала или их недостаточности было пропущено определение стронция, то он целиком войдет в цифры анализа вместе с кальцием (если последнего в пробе мало). Незамеченный химиком цирконий увеличит сумму полуторных окислов, аналогично весь бериллий будет объединен с алюминием, но при всех этих погрешностях анализа сумма полученных весовых процентов будет равна 100 или близка к ней. Точно так же, если при исследовании некоторых силикатов, содержащих фтор, присутствие этого галогена окажется незамеченным, количество кремнезема в пробе может быть занижено, а весь фтор может попасть в «потери при прокаливании».

Таким образом, многие погрешности определения состава минерала при оценке качества анализа только по сумме весовых процентов окажутся неучтенными. Между тем даже при их малой величине они могут заметно повлиять на окончательный вид кристаллохимической формулы минерала.

Следовательно, весьма важно получение до начала химического анализа максимально полных сведений о составе изучаемого минерала. Необходимо назвать аналитику также и те компоненты, присутствие которых в минерале ожидается, но не установлено предварительными исследованиями. Все это позволит химику избрать рациональную схему выполнения анализа для получения наиболее полных и достоверных результатов. Весьма полезны при выборе хода анализа также ориентировочные цифры состава минерала, так как при разных количественных соотношениях тех или иных компонентов должны быть применены и разные методы исследования для точного определения состава изучаемого соединения.

Однако и при наиболее удачном выборе хода химического анализа минерала и определении максимально возможного числа компонентов в нем, как правило, не удастся избежать трудностей, систематически повторяющихся в химико-аналитических

исследованиях и приводящих к ошибкам в получаемых цифрах состава минерала.

Обычно результаты химического анализа даются в весовых процентах, вычисляемых до второй значащей цифры после запятой, при этом величины относительных и абсолютных ошибок никогда не указываются, создавая ложное представление о точности приводимых чисел, равной $\pm 0,01$. В действительности же, запись результатов анализа в таком виде отражает лишь точность взвешивания — операции, которой наиболее часто оканчивается определение содержания компонента в пробе после его осаждения из раствора, и совершенно не учитывает полноты выделения компонента и качества выполнения предшествовавших этому аналитических реакций.

Поскольку величины абсолютных и относительных ошибок химических определений в равной мере зависят от содержания компонента в пробе и общего ее состава, установление точности химико-аналитических исследований минералов чрезвычайно затруднительно. Приблизительное представление о точности при аналитических работах может дать сопоставление результатов 33 химических анализов одной и той же пробы гранита и 30 анализов пробы диабазы, которые были выполнены по просьбе Геологической службы США с большой тщательностью и разными методами аналитиками 25 лабораторий ряда стран (Fairbairn, 1951).

Используя цифровой материал, приводимый в отчете об этих исследованиях, после исключения из результатов анализов гигроскопической воды и их пересчета на 100%, мы получили следующие пределы колебаний в содержании компонентов по данным разных анализов:

	Гранит	Диабаз
SiO ₂	71,07 — 72,95	51,32 — 52,57
TiO ₂	0,16 — 0,50	0,10 — 1,41
Al ₂ O ₃	13,19 — 15,99	14,53 — 18,57
Fe ₂ O ₃	0,28 — 1,67	0,28 — 4,24
FeO	0,78 — 1,39	6,75 — 9,39
MgO	0,02 — 0,76	4,67 — 7,10
MnO	0,00 — 0,06	0,11 — 0,53
CaO	1,16 — 1,91	10,56 — 11,44
BaO	0,00 — 0,28	0,00 — 0,06
SrO	0,00 — 0,08	0,00 — 0,09
Na ₂ O	2,62 — 3,95	1,60 — 2,61
K ₂ O	3,86 — 6,88	0,41 — 1,30
H ₂ O ⁺	0,17 — 1,42	0,20 — 1,16

Чтобы уменьшить влияние на дальнейшие расчеты грубых и случайных неточностей в работе аналитиков, для каждого ком-

понента будем исходить не из крайних определений его содержания в пробе, а из среднего по пяти максимальным и пяти минимальным его определениям. Полученные таким образом цифры колебаний составов гранита и диабаз в сравнении со средними арифметическими составами приведены в табл. 20. В работе американских химиков показано, что средний состав гранита и диабаз, подсчитанный по результатам, соответственно 33 и 30 анализов, очень близок к истинному составу проб, что хорошо подтверждается результатами их параллельного изучения другими методами. Величина отклонений крайних результатов, указанных в табл. 20, от среднего значения везде оказывается столь значительной, что в итогах единичного случайного анализа проб состава, сходного с эталонными гранитом или диабазом, достоверными можно считать только первые цифры после запятой, а для ряда компонентов — лишь целые проценты. Несмотря на то, что все эти рассуждения и подсчеты относятся к двум конкретным горным породам и поэтому не могут быть распространены на пробы другого состава, они показывают, насколько осторожно следует оценивать точность химического анализа.

Исходя из приводимых в табл. 20 ошибок, можно показать порядок тех максимальных погрешностей коэффициентов в формулах минералов, которые возможны из-за неточности результатов химических определений. Для этого можно использовать анализ амфибола, по составу близкий к эталонной пробе диабаз (Чирвинский, 1953): SiO_2 — 44,56; TiO_2 — 0,83; Al_2O_3 — 10,24; Fe_2O_3 — 3,80; FeO — 11,20; MnO — 0,04; MgO — 13,53; CaO — 12,05; Na_2O — 1,48; K_2O — 0,66; H_2O — 1,88. Сумма — 100,27%.

Расчет максимально допустимых ошибок велся согласно правилам приближенных вычислений по уравнениям:

$$K_x = \frac{AK_x}{\text{ОД}}$$

$$\Delta K_x = \frac{\text{ОД} \cdot \Delta AK_x + \Delta \text{ОД} \cdot AK_x}{\text{ОД}^2}$$

где K_x — коэффициент элемента в химической формуле амфибола;

AK_x — атомное количество элемента x ;

ОД — общий делитель.

Поскольку эти вычисления преследуют цель показать лишь порядок погрешностей, возможных в формулах минерала, для простоты расчетов были использованы не величины положительных и отрицательных отклонений, приведенные в табл. 20, а их усредненные значения. Полученные в результате пересчетов величины ΔK_x (табл. 21) показывают, что при рядовом химиче-

Пределы колебаний результатов анализа и величины ошибок химических определений

Компоненты	Гранит (по результатам 33 анализов)*				Диабаз (по результатам 30 анализов)			
	пределы колебаний результатов анализа	среднее арифметическое значение	ошибки		пределы колебаний результатов анализа	среднее арифметическое значение	ошибки	
			абсолютные	относительные, в %			абсолютные	относительные, в %
SiO ₂	71,58—72,79	72,31	+0,48 —0,73	+ 0,6 — 1	51,70—52,45	52,34	+0,09 —0,64	+ 0,02 — 1
TiO ₂	0,20— 0,35	0,26	+0,09 —0,06	+34 —23	0,49— 1,21	1,04	+0,17 —0,55	+ 16 — 53
Al ₂ O ₃	13,76—15,17	14,34	+0,83 —0,58	+ 6 — 4	14,64—16,27	15,18	+1,09 —0,54	+ 7 — 4
Fe ₂ O ₃	0,56— 1,49	0,88	+0,61 —0,32	+69 —36	0,88— 3,57	1,75	+1,82 —0,87	+100 — 50
FeO	0,88— 1,36	1,02	+0,34 —0,14	+33 —14	7,02— 9,20	8,55	+0,65 —1,53	+ 8 — 18
MgO	0,16— 0,55	0,38	+0,17 —0,22	+45 —58	5,70— 6,88	6,53	+0,35 —0,83	+ 5 — 13
MnO	0,01— 0,05	0,03	±0,02	±67	0,12— 0,39	0,18	+0,21 —0,06	+117 — 33
CaO	1,22— 1,63	1,36	+0,27 —0,14	+20 —10	10,71—11,22	10,96	+0,26 —0,25	± 2
BaO	0,00— 0,28	0,02	—	—	0,00— 0,06	0,005	—	—
SrO	0,00— 0,08	0,00	—	—	0,00— 0,09	0,003	—	—
Na ₂ O	2,86— 3,67	3,19	+0,52 —0,31	+16 —10	1,78— 2,41	2,08	+0,33 —0,30	+ 16 — 14
K ₂ O	4,80— 5,90	5,34	+0,56 —0,54	±10	0,54— 0,99	0,70	+0,29 —0,16	+ 41 — 23
H ₂ O ⁺	0,22— 0,73	0,38	+0,35 —0,16	+92 —42	0,37— 0,97	0,57	+0,40 —0,20	+ 70 — 35
Прочие**	—	0,50	—	—	—	0,11	—	—

* Из серии анализов гранита нами исключен анализ № 9 из-за большого отклонения суммы от 100%.

** Li₂O, Cr₂O₃, ZrO₂, V₂O₅, P₂O₅.

ском анализе минерала, без параллельных проб и использования разных методов для одних и тех же определений, коэффициенты в формуле минерала достоверны почти всегда только до первой значащей цифры после запятой, хотя при этом нельзя сказать, какой именно коэффициент ошибочен, а какой отвечает истинному содержанию элемента в пробе.

Указанные в табл. 21 максимально возможные величины ΔK_x на первый взгляд кажутся непомерно большими. Их реальность

Таблица 21

Величины возможных абсолютных ошибок в коэффициентах атомов (ΔK_x) в формуле одного из амфиболов

Компоненты	Содержание в пробе, в весовых процентах	Усредненная относительная ошибка химического анализа, в %	Коэффициенты атомов в формуле, K_x	ΔK_x
SiO ₂	44,56	$\pm 0,5$	6,547	$\pm 0,5$
TiO ₂	0,83	± 34	0,092	$\pm 0,04$
Al ₂ O ₃	10,24	± 5	1,774	$\pm 0,2$
Fe ₂ O ₃	3,80	± 75	0,420	$\pm 0,3$
FeO	11,20	± 13	1,374	$\pm 0,3$
MnO	0,04	± 75	0,005	$\pm 0,004$
MgO	13,53	± 9	2,962	$\pm 0,5$
CaO	12,05	± 2	1,897	$\pm 0,2$
Na ₂ O	1,48	± 15	0,422	$\pm 0,05$
K ₂ O	0,66	± 32	0,124	$\pm 0,05$
H ₂ O	1,88	± 53	1,841	$\pm 1,0$

очевидна из результатов произведенного нами по обычному кислородному методу расчета формул пяти амфиболов (табл. 22), для каждого образца из которых было выполнено по два-четыре параллельных анализа (Larsen, 1938).

Произведенное приблизительное вычисление возможных ошибок химических определений показывает, что для удачного расчета формул минералов необходима большая тщательность в проведении анализа минерала, чем в определении химического состава горных пород, так как даже те ошибки в результатах анализа, которые еще не вносят существенных отклонений в петрохимические построения, в расчетах формул минералов вызывают весьма ощутимые погрешности. Лишь при тщательной работе химика-аналитика точность получаемых цифр оказывается большей, чем указывалось выше. Однако даже в этом случае имеют место расхождения между результатами анализа параллельных навесок одной и той же пробы минерала, что видно из

Коэффициенты атомов в формулах амфиболов, рассчитанные по результатам параллельных анализов

№ пробы	1				2			3		4			5		
№ анализа	1	2	3	4	1	2	3	1	2	1	2	3	1	2	3
Si	8,01	7,93	7,92	7,94	7,83	7,95	7,76	7,70	7,58	7,36	7,37	7,50	5,67	5,81	6,04
Ti	0,02	0,00	0,04	0,03	0,03	0,00	0,00	0,17	0,14	0,04	0,27	0,05	0,35	0,07	0,20
Al	0,07	0,29	0,15	0,12	0,26	0,19	0,37	0,55	0,56	0,80	0,76	0,68	2,19	2,68	2,52
Fe ³⁺	0,44	0,43	0,52	0,49	0,92	0,92	0,79	1,11	1,06	0,70	0,55	0,79	0,58	0,55	0,58
Fe ²⁺	0,15	0,20	0,07	0,10	0,32	0,39	0,35	0,52	0,51	1,12	1,19	0,77	0,73	0,77	0,72
Mn	0,00	0,01	0,01	0,01	0,06	0,07	0,06	0,03	0,02	0,03	0,05	0,04	0,02	0,03	0,03
Mg	4,66	4,35	4,66	4,56	3,83	3,92	3,77	3,37	3,20	3,20	2,88	3,33	3,26	3,00	3,33
Ca	1,23	0,98	0,97	0,92	0,61	0,44	0,50	0,51	0,61	0,98	0,79	0,69	2,72	2,13	2,07
Ba	0,00	0,00	0,00	0,00	0,01	0,00	0,00	0,01	0,01	0,00	0,00	0,00	0,00	0,01	0,00
Sr	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,01	0,00
Na	1,38	1,49	1,38	1,39	2,25	2,17	2,16	1,61	1,95	1,94	2,24	2,04	0,69	0,66	0,65
K	0,34	0,42	0,31	0,32	0,51	0,37	0,38	0,54	0,09	0,11	0,22	0,14	0,24	0,33	0,36
OH	0,64	1,02	1,03	0,81	0,62	0,68	0,58	0,58	1,18	1,19	1,24	1,54	1,20	1,86	0,06
F	0,00	0,00	0,00	0,57	0,00	0,00	0,97	0,00	0,35	0,00	0,00	0,18	0,00	0,00	0,37
O	23,36	22,98	22,97	22,62	23,38	23,32	22,45	23,42	22,47	22,81	22,76	22,28	22,80	22,14	23,57

сопоставления цифр состава хегбомита, определенных с большой тщательностью двумя различными аналитиками:

	1	2		1	2
SiO ₂	1,10	1,03	CaO	8,20	8,67
TiO ₂	5,90	5,10	MgO	1,56	1,59
Al ₂ O ₃	72,59	73,67	K ₂ O	нет	нет
Fe ₂ O ₃	10,50	9,90	Na ₂ O	нет	нет
FeO	—	0,35	С у м а	99,85	100,31

Следует особо подчеркнуть, что для получения наиболее достоверных цифр состава минерала весьма желательно проведение анализа на большом количестве материала, позволяющем выполнить повторные определения разными методами для установления количества в пробе ее составных частей. При этом повторное получение тех же цифр не всегда говорит об их точности (т. е. величине отклонения от истинных), но может свидетельствовать также об их хорошей воспроизводимости.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Оценивая описанные выше способы расчетов по степени соответствия получаемых формул истинному составу минерала, трудно отдать предпочтение какому-то одному из них, так как успех вычислений зависит от точности выполнения химического анализа минерала и от результатов его структурного исследования.

Наиболее объективные результаты дает вычисление формулы, исходя из содержимого элементарной ячейки минерала, так как в этом случае в расчеты не вводятся какие-либо ограничительные условия о равенстве числа всех или части атомов или ионов какой-то заранее предопределенной величине. К тому же они одинаково применимы и для известных и для новых минералов. Существенным недостатком этого метода является зависимость результатов расчетов не только от погрешностей химических определений, но и от точности выполнения структурных исследований и измерения удельного веса вещества, что иногда может приводить к значительным отклонениям коэффициентов в формулах от их стандартных величин (Неу, 1954).

Пользуясь для вывода формул другими приемами, все вычисления лучше начинать с обычного метода расчетов по кислороду, так как в этом случае в формуле минерала заранее приравнивается к теоретическому только число атомов кислорода и замещающих его ионов. Можно воспользоваться также для начала и расчетом формулы по зарядам, хотя наиболее удачные результаты он дает для минералов без дополнительных групп OH⁻, либо расчетом формул по части кислорода. Однако этот послед-

ний метод применим в ограниченном числе случаев и может быть использован только для минералов, в которых не проявлено замещение гидроксил-иона анионами F^{1-} и Cl^{1-} .

При получении по обычному кислородному методу формулы минерала с существенными отклонениями коэффициентов от теоретически требуемых значений для их уточнения в общем случае можно прибегнуть лишь к повторным химическим определениям содержания в минерале тех или иных его компонентов. Однако для минералов с дополнительными ионами гидроксила первоначально полученная по кислородному методу неудовлетворительная формула нередко может быть хорошо рассчитана по катионам. Но при таких расчетах принимается, что ошибки анализа заключаются лишь в неверном определении H_2O^+ , а во все вычисления заранее вводится уже два ограничительных условия: 1) обязательно равенство коэффициента катионов в одной из кристаллохимических позиций целому числу; 2) подгонка к теоретическому коэффициенту числа атомов O, F, Cl, гидроксильных групп.

Рассчитываемые по катионам формулы удовлетворяют условию равенства коэффициентов стандартным значениям и внешне кажутся достоверными. Тем не менее проверить их соответствие истинному составу минерала не всегда удается. Это хорошо видно на примере слюд, хлоритов, амфиболов и пироксенов, именно для которых катионные методы расчета были впервые предложены и применяются в настоящее время.

Считается, что во всех указанных выше минералах наряду с кристаллохимическими группами, в которых количество катионов и анионов для образца любого состава должно быть строго постоянным, имеются и такие, в которых количество катионов может варьировать в весьма значительных пределах. Поэтому, рассчитывая, например, формулу амфиболов $A_2'A B_5X_8O_{22}(O, OH, F)_2$, исходя из 13 катионов в группе $B + X$ и приравнивая затем количество ионов кислорода, гидроксила и фтора точно к 24, мы можем получить для катионов $(A' + A'')$ любой коэффициент от 2 до 3, причем в каждом случае достоверность его не может быть проверена никакими методами.

Точно так же в формуле пироксена $A_2B_2X_7$ коэффициент при A теоретически может принимать любые значения примерно от 0,5 до 2,0, аналогично коэффициент одновалентных катионов в слюдах может быть меньше единицы и т. д.

Таким образом, при расчете формул этих минералов по катионному методу все ошибки химического анализа в определении количества катионов в составе изучаемого вещества скрадываются, а несоответствие получаемых формул истинным особенностям химизма минерала может быть замечено лишь в тех случаях, когда либо коэффициент кристаллохимической группы перемещенного состава выходит за свои пределы, либо химиком допущена очень грубая ошибка в определении количества воды или других

компонентов минерала. Особенно с большой осторожностью катионный метод расчетов должен применяться при выводе формул слюд, среди которых известны смешаннослойные образования с переменным коэффициентом при катионах в шестерной координации.

Большим недостатком всех методов является невозможность установления для каждой конкретной формулы тех ошибок в числах атомов, которые могли быть допущены при их расчете в силу неточностей химического анализа. Многочисленные методические трудности химико-аналитических исследований, практически полное отсутствие сведений о точности тех или иных методов химических определений, наконец, прямая зависимость качества выполнения анализа от искусства химика — все это требует для получения достоверных результатов и точных формул минералов превращения химического анализа минерала из рядовой работы в совместное творческое исследование химика и минералога. Для точного определения состава минерала и доказательства проявления в нем тех или иных схем изоморфизма следует прибегать к статистическому методу, с многократным повторением частных химических определений.

ПРИЛОЖЕНИЯ

ТАБЛИЦЫ ДЛЯ ВЫЧИСЛЕНИЯ МОЛЕКУЛЯРНЫХ И АТОМНЫХ КОЛИЧЕСТВ ПО ВЕСОВЫМ ПРОЦЕНТАМ

Таблицы расположены в порядке латинского алфавита. В их заглавии указывается: 1) номер химического элемента по таблице Менделеева; 2) символ элемента или формула его окисла; 3) атомный или молекулярный вес. Таблицы составлены для содержаний компонента в пробе от 0 до 10% (целые проценты указаны в первом и последнем столбцах, десятые доли — в верхней и нижней строках), но позволяют находить молекулярные и атомные количества для любых весовых процентов. Приемы работы с таблицами иллюстрируются следующими примерами.

Первый пример. Весовое содержание компонента в пробе меньше 10% и дано с точностью до десятых: 6,20, 4,30, 7,90% и т. д. Молекулярное (или атомное) количество находится на пересечении строки целых процентов со столбцом десятых долей. Так, для 9,20% TiO_2 молекулярное количество равно 0,1151.

Второй пример. Весовое содержание компонента в пробе меньше 1%: 0,31, 0,28, 0,19 и т. д. Атомные и молекулярные количества равны десятой части величин, соответствующих десятикратному содержанию компонента в минерале, — 3,10; 2,80; 1,90%. Так для 0,92% TiO_2 искомое количество будет в десять раз меньше величины для 9,20% TiO_2 , способ нахождения которой указан в первом примере, т. е. будет равно 0,0115.

Третий пример. При весовом содержании компонента, превышающем 10% и равном целым процентам, (57,00; 75,00; 84,00 и т. д.) молекулярные (атомные) количества находят как и в первом примере в местах таблицы, соответствующих в десять раз меньшему весовому проценту — 5,70, 7,50, 8,40%, но берут на одну значащую цифру больше. Так для 2,20% TiO_2 молекулярное количество — 0,0275, а для 22,00% TiO_2 — 0,2753.

Четвертый пример. Содержание компонента в пробе любое. Сначала определяется молекулярное (атомное) количество, соответствующее сотым долям процента (аналогично второму примеру), затем целым процентам (аналогично третьему примеру). Искомое количество будет равно сумме этих двух величин. Так для 22,92% TiO_2 молекулярное количество определится суммой чисел 0,0115 (см. второй пример) и 0,2753 (см. третий пример) и будет равно 0,2868.

АТОМНЫЕ И МОЛЕКУЛЯРНЫЕ КОЛИЧЕСТВА

47, Ag, АТОМНЫЙ ВЕС 107,88

%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%
0	0,000000	000926	001853	002780	003707	004634	005561	006488	007415	008342	0
1	0,009269	010196	011123	012050	012977	013904	014831	015758	016685	017612	1
2	0,018539	019466	020393	021319	022246	023173	024100	025027	025954	026881	2
3	0,027808	028735	029662	030589	031516	032443	033370	034297	035224	036151	3
4	0,037078	038005	038932	039859	040786	041713	042639	043566	044493	045420	4
5	0,046347	047274	048201	049128	050055	050982	051909	052836	053763	054690	5
6	0,055617	056544	057471	058398	059325	060252	061179	062106	063032	063959	6
7	0,064886	065813	066740	067667	068594	069521	070448	071375	072302	073229	7
8	0,074156	075083	076010	076937	077864	078791	079718	080645	081572	082499	8
9	0,083426	084352	085279	086206	087133	088060	088987	089914	090841	091768	9
10	0,092695										10
%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%

47, Ag₂O, МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ВЕС 231,76

%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%
0	0,000000	000431	000862	001294	001725	002157	002588	003020	003451	003883	0
1	0,004314	004746	005177	005609	006040	006472	006903	007335	007766	008198	1
2	0,008629	009061	009492	009924	010355	010787	011218	011649	012081	012512	2
3	0,012944	013375	013807	014238	014670	015101	015533	015964	016396	016827	3
4	0,017259	017690	018122	018553	018985	019416	019848	020279	020711	021142	4
5	0,021574	022005	022437	022868	023299	023731	024162	024594	025025	025457	5
6	0,025888	026320	026751	027183	027614	028046	028477	028909	029340	029772	6
7	0,030203	030635	031066	031498	031929	032361	032792	033224	033655	034086	7
8	0,034518	034949	035381	035812	036244	036675	037107	037538	037970	038401	8
9	0,038833	039264	039696	040127	040559	040990	041422	041853	042285	042716	9
10	0,043148										10
%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%

13, Al, АТОМНЫЙ ВЕС 26,97

%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%
0	0,000000	003707	007415	011123	014831	018539	022246	025954	029662	033370	0
1	0,037078	040786	044493	048201	051909	055617	059325	063033	066740	070448	1
2	0,074156	077864	081572	085279	088987	092695	096403	100111	103819	107526	2
3	0,111234	114942	118650	122358	126066	129773	133481	137189	140897	144605	3
4	0,148312	152020	155728	159436	163144	166852	170559	174267	177975	181683	4
5	0,185391	189099	192806	196514	200222	203930	207638	211345	215053	218761	5
6	0,222469	226177	229885	233592	237300	241008	244716	248424	252132	255839	6
7	0,259547	263255	266963	270671	274378	278086	281794	285502	289210	292918	7
8	0,296625	300333	304041	307749	311457	315165	318872	322580	326288	329996	8
9	0,333704	337411	341119	344827	348535	352243	355951	359658	363366	367074	9
10	0,370782										10
%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%

13, Al₂O₃, МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ВЕС 101,94

%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%
0	0,000000	000980	001961	002942	003923	004904	005885	006866	007847	008828	0
1	0,009809	010790	011771	012752	013733	014714	015695	016676	017657	018638	1
2	0,019619	020600	021581	022562	023543	024524	025505	026486	027467	028448	2
3	0,029429	030410	031391	032371	033352	034333	035314	036295	037276	038257	3
4	0,039238	040219	041200	042181	043162	044143	045124	046105	047086	048067	4
5	0,049048	050029	051010	051991	052972	053953	054934	055915	056896	057877	5
6	0,058858	059839	060820	061801	062782	063762	064743	065724	066705	067686	6
7	0,068667	069648	070629	071610	072591	073572	074553	075534	076515	077496	7
8	0,078477	079458	080439	081420	082401	083382	084363	085344	086325	087306	8
9	0,088287	089268	090249	091230	092211	093192	094173	095154	096134	097115	9
10	0,098096										10
%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%

33, As, АТОМНЫЙ ВЕС 74,91

%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%
0	0,000000	001334	002669	004004	005339	006674	008009	009344	010679	012014	0
1	0,013349	014684	016019	017354	018689	020024	021358	022693	024028	025363	1
2	0,026698	028033	029368	030703	032038	033373	034708	036043	037378	038713	2
3	0,040048	041382	042717	044052	045387	046722	048057	049392	050727	052062	3
4	0,053397	054732	056067	057402	058737	060072	061407	062741	064076	065411	4
5	0,066746	068081	069416	070751	072086	073421	074756	076091	077426	078761	5
6	0,080096	081431	082765	084100	085435	086770	088105	089440	090775	092110	6
7	0,093445	094780	096115	097450	098785	100120	101455	102790	104124	105459	7
8	0,106794	108129	109464	110799	112134	113469	114804	116139	117474	118809	8
9	0,120144	121479	122814	124148	125483	126818	128153	129488	130823	132158	9
10	0,133493										10
%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,0	%

33, As₂O₅, МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ВЕС 229,82

%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%
0	0,000000	000435	000870	001305	001740	002175	002610	003045	003480	003916	0
1	0,004351	004786	005221	005656	006091	006526	006961	007397	007832	008267	1
2	0,008702	009137	009572	010007	010442	010878	011313	011748	012183	012618	2
3	0,013053	013488	013923	014359	014794	015229	015664	016099	016534	016969	3
4	0,017404	017840	018275	018710	019145	019580	020015	020450	020885	021321	4
5	0,021756	022191	022626	023061	023496	023931	024366	024802	025237	025672	5
6	0,026107	026542	026977	027412	027847	028283	028718	029153	029588	030023	6
7	0,030458	030893	031328	031763	032199	032634	033069	033504	033939	034374	7
8	0,034809	035244	035680	036115	036550	036985	037420	037855	038290	038725	8
9	0,039161	039596	040031	040466	040901	041336	041771	042206	042642	043077	9
10	0,043512										10
%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%

79, АТ, АТОМНЫЙ ВЕС 197,0

%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%
0	0,000000	000507	001015	001522	002030	002538	003045	003553	004060	004568	0
1	0,005076	005583	006091	006599	007106	007614	008121	008629	009137	009644	1
2	0,010152	010659	011167	011675	012182	012690	013198	013705	014213	014720	2
3	0,015228	015736	016243	016751	017259	017766	018274	018781	019289	019797	3
4	0,020304	020812	021320	021827	022335	022843	023350	023858	024365	024873	4
5	0,025380	025888	026395	026903	027411	027919	028426	028934	029442	029949	5
6	0,030457	030964	031472	031979	032487	032995	033502	034010	034518	035025	6
7	0,035563	036040	036548	037056	037563	038071	038578	039086	039594	040101	7
8	0,040609	041117	041624	042132	042639	043147	043655	044162	044670	045177	8
9	0,045685	046193	046700	047208	047716	048223	048730	049238	049746	050254	9
10	0,050761										10
%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%

5, В, АТОМНЫЙ ВЕС 10,82

%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%
0	0,000000	009242	018484	027726	036968	046210	055452	064695	073937	083179	0
1	0,009242	101663	110905	120147	129390	138632	147874	157116	166358	175600	1
2	0,018484	194085	203327	212569	221811	231053	240295	249537	258780	268022	2
3	0,027726	286506	295748	304990	314232	323475	332717	341959	351201	360443	3
4	0,036968	378927	388170	397412	406654	415896	425138	434380	443622	452865	4
5	0,046210	471349	480591	489833	499075	508317	517560	526802	536044	545286	5
6	0,055452	563770	573012	582255	591497	600739	609981	619223	628465	637707	6
7	0,064695	656192	665434	674676	683918	693160	702402	711645	720887	730129	7
8	0,073937	748613	757855	767098	776340	785582	794824	804066	813308	822550	8
9	0,083179	841035	850277	859519	868761	878003	887245	896488	905730	914972	9
10	0,092421										10
%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%

5, В₂O₃, МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ВЕС 69,64

%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%
0	0,000000	001435	002871	004307	005743	007179	008615	010051	011487	012923	0
1	0,014359	015795	017231	018667	020103	021539	022975	024411	025847	027283	1
2	0,028719	030155	031591	033026	034462	035898	037334	038770	040206	041642	2
3	0,043078	044514	045950	047386	048822	050258	051694	053130	054566	056002	3
4	0,057438	058874	060310	061746	063182	064618	066053	067489	068925	070361	4
5	0,071797	073233	074669	076105	077541	078977	080413	081849	083285	084721	5
6	0,086157	087593	089029	090465	091901	093337	094773	096209	097645	099080	6
7	0,100516	101952	103388	104824	106260	107696	109132	110568	112004	113440	7
8	0,114876	116312	117748	119184	120620	122056	123492	124928	126364	127800	8
9	0,129236	130672	132107	133543	134979	136415	137851	139287	140723	142159	9
10	0,143595										10
%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%

56, BaO, МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ВЕС 153,36

%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%
0	0,000000	000652	001304	001956	002608	003260	003912	004564	005216	005868	0
1	0,006520	007172	007824	008476	009128	009780	010432	011085	011737	012389	1
2	0,013041	013693	014345	014997	015649	016301	016953	017605	018257	018909	2
3	0,019561	020213	020865	021517	022170	022822	023474	024126	024778	025430	3
4	0,026082	026734	027386	028038	028690	029342	029994	030646	031298	031950	4
5	0,032603	033255	033907	034559	035211	035863	036515	037167	037819	038471	5
6	0,039123	039775	040427	041079	041731	042383	043035	043688	044340	044992	6
7	0,045644	046296	046948	047600	048252	048904	049556	050208	050860	051512	7
8	0,052164	052816	053468	054121	054773	055425	056077	056729	057381	058033	8
9	0,058685	059337	059989	060641	061293	061945	062597	063249	063901	064553	9
10	0,065206										10
%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%

4, BeO, МОЛЕКУЛЯРНЫЕ ВЕС 25,013

%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%
0	0,000000	003997	007995	011993	015991	019989	023987	027985	031983	035981	0
1	0,039979	043977	047975	051972	055970	059968	063966	067964	071962	075960	1
2	0,079958	083956	087954	091952	095950	099948	103945	107943	111941	115939	2
3	0,119937	123935	127933	131931	135929	139927	143925	147923	151920	155918	3
4	0,159916	163914	167912	171910	175908	179906	183904	187902	191900	195898	4
5	0,199896	203893	207891	211889	215887	219885	223883	227881	231879	235877	5
6	0,239875	243873	247871	251869	255866	259864	263862	267860	271858	275856	6
7	0,279854	283852	287850	291848	295846	299844	303841	307839	311837	315835	7
8	0,319833	323831	327829	331827	335825	339823	343821	347819	351817	355814	8
9	0,359812	363810	367808	371806	375804	379802	383800	387798	391796	395794	9
10	0,399792										10
%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%

83, Bi, АТОМНЫЕ ВЕС 209,00

%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%
0	0,000000	000478	000956	001435	001913	002392	002870	003349	003827	004306	0
1	0,004784	005263	005741	006220	006698	007177	007655	008133	008612	009090	1
2	0,009569	010047	010526	011004	011483	011961	012440	012918	013397	013875	2
3	0,014354	014832	015311	015789	016267	016746	017224	017703	018181	018660	3
4	0,019138	019617	020095	020574	021052	021531	022009	022488	022966	023444	4
5	0,023923	024401	024880	025358	025837	026315	026794	027272	027751	028229	5
6	0,028708	029186	029665	030143	030622	031100	031578	032057	032535	033014	6
7	0,033492	033971	034449	034928	035406	035885	036363	036842	037320	037799	7
8	0,038277	038755	039234	039712	040191	040669	041148	041626	042105	042583	8
9	0,043062	043540	044019	044497	044976	045454	045933	046411	046889	047368	9
10	0,047846										10
%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%

83, В₂O₃, МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ВЕС 466,00

%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%
0	0,000009	000214	000429	000643	000858	001072	001287	001502	001716	001931	0
1	0,002145	002360	002575	002789	003004	003218	003433	003648	003862	004077	1
2	0,004291	004506	004721	004935	005150	005364	005579	005793	006008	006223	2
3	0,006437	006652	006866	007081	007296	007510	007725	007939	008154	008369	3
4	0,008583	008798	009012	009227	009442	009656	009871	010085	010300	010515	4
5	0,010729	010944	011158	011373	011587	011802	012017	012231	012446	012660	5
6	0,012875	013090	013304	013519	013733	013948	014163	014377	014592	014806	6
7	0,015021	015236	015450	015665	015879	016094	016309	016523	016738	016952	7
8	0,017167	017381	017596	017811	018025	018240	018454	018669	018884	019098	8
9	0,019313	019527	019742	019957	020171	020386	020600	020815	021030	021244	9
10	0,021459										10
%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%

35, Вг, АТОМНЫЙ ВЕС 79,916

%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%
0	0,000000	001251	002502	003753	005005	006256	007507	008759	010010	011261	0
1	0,012513	013764	015015	016267	017518	018769	020021	021272	022523	023774	1
2	0,025026	026277	027528	028780	030031	031282	032534	033785	035036	036288	2
3	0,037539	038790	040042	041293	042544	043795	045047	046298	047549	048801	3
4	0,050052	051303	052555	053806	055057	056309	057560	058811	060063	061314	4
5	0,062565	063817	065068	066319	067570	068822	070073	071324	072576	073827	5
6	0,075078	076330	077581	078832	080084	081335	082586	083838	085089	086340	6
7	0,087591	088843	090094	091345	092597	093848	095099	096351	097602	098853	7
8	0,100105	101356	102607	103859	105110	106361	107612	108864	110115	111366	8
9	0,112618	113869	115120	116372	117623	118874	120126	121377	122628	123880	9
10	0,125131										10
%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%

6, CO₂, МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ВЕС 44,011

‰	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	‰
0	0,000000	002272	004544	006816	009088	011360	013632	015905	018177	020449	0
1	0,022721	024993	027265	029538	031810	034082	036354	038626	040898	043171	1
2	0,045443	047715	049987	052259	054531	056803	059076	061348	063620	065892	2
3	0,068164	070436	072709	074981	077253	079525	081797	084069	086342	088614	3
4	0,090886	093158	095430	097702	099975	102247	104519	106791	109063	111335	4
5	0,113607	115880	118152	120424	122696	124968	127240	129513	131785	134057	5
6	0,136329	138601	140873	143146	145418	147690	149962	152234	154506	156778	6
7	0,159051	161323	163595	165867	168139	170411	172684	174956	177228	179500	7
8	0,181772	184044	186317	188589	190861	193133	195405	197677	199950	202222	8
9	0,204494	206766	209038	211310	213582	215855	218127	220399	222671	224943	9
10	0,227215										10
‰	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	‰

20, Ca, АТОМНЫЙ ВЕС 40,08

‰	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	‰
0	0,000000	002495	004990	007485	009980	012475	014970	017465	019960	022455	0
1	0,024950	027445	029940	032435	034930	037425	039920	042415	044910	047405	1
2	0,049900	052395	054890	057385	059880	062375	064870	067365	069860	072355	2
3	0,074850	077345	079840	082335	084830	087325	089820	092315	094810	097305	3
4	0,099800	102295	104790	107285	109780	112275	114770	117265	119760	122255	4
5	0,124750	127245	129740	132235	134730	137225	139720	142215	144710	147205	5
6	0,149700	152195	154690	157185	159680	162175	164670	167165	169660	172155	6
7	0,174650	177145	179640	182135	184630	187125	189620	192115	194610	197105	7
8	0,199600	202095	204590	207085	209580	212075	214570	217065	219560	222055	8
9	0,224550	227045	229540	232035	234530	237025	239520	242015	244510	247005	9
10	0,249501										10
‰	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	‰

20, CaO, МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ВЕС 56,08

%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%
0	0,000000	001783	003566	005349	007132	008915	010699	012482	014265	016048	0
1	0,017831	019614	021398	023181	024964	026747	028530	030313	032097	033880	1
2	0,035663	037446	039229	041012	042796	044579	046362	048145	049928	051711	2
3	0,053495	055278	057061	058844	060627	062410	064194	065977	067760	069543	3
4	0,071326	073109	074893	076676	078459	080242	082025	083808	085592	087375	4
5	0,089158	090941	092724	094507	096291	098074	099857	101640	103423	105206	5
6	0,106990	108773	110556	112339	114122	115905	117689	119472	121255	123038	6
7	0,124821	126604	128388	130171	131954	133737	135520	137303	139087	140870	7
8	0,142653	144436	146219	148002	149786	151569	153352	155135	156918	158701	8
9	0,160485	162268	164051	165834	167617	169400	171184	172967	174750	176533	9
10	0,178316										10
%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%

48, Cd, АТОМНЫЙ ВЕС 112,41

%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%
0	0,000000	000889	001779	002668	003558	004448	005337	006227	007116	008006	0
1	0,008896	009785	010675	011564	012454	013344	014233	015123	016012	016902	1
2	0,017792	018681	019571	020460	021350	022240	023129	024019	024908	025798	2
3	0,026688	027577	028467	029356	030246	031136	032025	032915	033804	034694	3
4	0,035584	036473	037363	038252	039142	040032	040921	041811	042700	043590	4
5	0,044480	045369	046259	047148	048038	048928	049817	050707	051596	052486	5
6	0,053376	054265	055155	056044	056934	057824	058713	059603	060492	061382	6
7	0,062272	063161	064051	064940	065830	066720	067609	068499	069388	070278	7
8	0,071168	072057	072947	073836	074726	075616	076505	077395	078284	079174	8
9	0,080064	080953	081843	082732	083622	084512	085401	086291	087180	088070	9
10	0,088960										10
%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%

48, CdO, МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ВЕС 128,41

‰	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	‰
0	0,000000	000778	001557	002336	003115	003893	004672	005451	006230	007008	0
1	0,007787	008566	009345	010123	010902	011681	012460	013238	014017	014796	1
2	0,015575	016353	017132	017911	018690	019468	020247	021026	021805	022583	2
3	0,023362	024141	024920	025698	026477	027256	028035	028813	029592	030371	3
4	0,031150	031928	032707	033486	034265	035043	035822	036601	037380	038159	4
5	0,038937	039716	040495	041274	042052	042831	043610	044389	045167	045946	5
6	0,046725	047504	048282	049061	049840	050619	051397	052176	052955	053734	6
7	0,054512	055291	056070	056849	057627	058406	059185	059964	060742	061521	7
8	0,062300	063079	063857	064636	065415	066194	066972	067751	068530	069309	8
9	0,070087	070866	071645	072424	073203	073981	074760	075539	076318	077096	9
10	0,077875										10
‰	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	‰

58, Ce, АТОМНЫЙ ВЕС 140,13

‰	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	‰
0	0,000000	000713	001427	002140	002854	003568	004281	004995	005708	006422	0
1	0,007136	007849	008563	009277	009990	010704	011417	012131	012845	013558	1
2	0,014272	014986	015699	016413	017126	017840	018554	019267	019981	020695	2
3	0,021408	022122	022835	023549	024263	024976	025690	026404	027117	027831	3
4	0,028544	029258	029972	030685	031399	032113	032826	033540	034253	034967	4
5	0,035681	036394	037108	037822	038535	039249	039962	040676	041390	042103	5
6	0,042817	043531	044244	044958	045671	046385	047099	047812	048526	049239	6
7	0,049953	050667	051380	052094	052808	053521	054235	054948	055662	056376	7
8	0,057089	057803	058517	059230	059944	060657	061371	062085	062798	063512	8
9	0,064226	064939	065653	066366	067080	067794	068507	069221	069935	070648	9
10	0,071362										10
‰	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	‰

58, CeO_2 , МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ВЕС 172,13

%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%
0	0,000000	000580	001161	001742	002323	002904	003485	004066	004647	005228	0
1	0,005809	006390	006971	007552	008137	008714	009295	009876	010457	011038	1
2	0,011619	012200	012781	013361	013942	014523	015104	015685	016266	016847	2
3	0,017428	018009	018590	019171	019752	020333	020914	021495	022076	022657	3
4	0,023238	023819	024400	024981	025562	026143	026723	027304	027885	028466	4
5	0,029047	029628	030209	030790	031371	031952	032533	033114	033695	034276	5
6	0,034857	035438	036019	036600	037181	037762	038343	038924	039505	040085	6
7	0,040666	041247	041828	042409	042990	043571	044152	044733	045314	045895	7
8	0,046476	047057	047638	048219	048800	049381	049962	050543	051124	051705	8
9	0,052286	052867	053447	054028	054609	055190	055771	056352	056933	057514	9
10	0,058095										10
%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%

58, Ce_2O_3 , МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ВЕС 328,26

%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%
0	0,000000	000304	000609	000913	001218	001523	001827	002132	002437	002741	0
1	0,003046	003351	003655	003960	004264	004569	004874	005178	005483	005788	1
2	0,006092	006397	006702	007006	007311	007615	007920	008225	008529	008834	2
3	0,009139	009443	009748	010053	010357	010662	010966	011271	011576	011880	3
4	0,012185	012490	012794	013099	013404	013708	014013	014317	014622	014927	4
5	0,015231	015536	015841	016145	016450	016755	017059	017364	017668	017973	5
6	0,018278	018582	018887	019192	019496	019801	020106	020410	020715	021019	6
7	0,021324	021629	021933	022238	022543	022847	023152	023457	023761	024066	7
8	0,024370	024675	024980	025284	025589	025894	026198	026503	026808	027112	8
9	0,027417	027721	028026	028331	028635	028940	029245	029549	029854	030159	9
10	0,030463										10
%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%

17, Cl, АТОМНЫЙ ВЕС 35,457

‰	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	‰
0	0,000000	002820	005640	008460	011281	014101	016921	019742	022562	025382	0
1	0,028203	031023	033843	036664	039484	042304	045125	047945	050765	053586	1
2	0,056406	059226	062046	064867	067687	070507	073328	076148	078968	081789	2
3	0,084609	087429	090250	093070	095890	098711	101531	104351	107172	109992	3
4	0,112812	115633	118453	121273	124093	126914	129734	132554	135375	138195	4
5	0,141015	143836	146656	149476	152297	155117	157937	160758	163578	166398	5
6	0,169219	172039	174859	177680	180500	183320	186140	188961	191781	194601	6
7	0,197422	200242	203062	205883	208703	211523	214344	217164	219984	222805	7
8	0,225625	228445	231266	234086	236906	239726	242547	245367	248187	251008	8
9	0,253828	256648	259469	262289	265109	267930	270750	273570	276391	279211	9
10	0,282031										10
‰	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	‰

27, Co, АТОМНЫЙ ВЕС 58,94

‰	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	‰
0	0,000000	001696	003393	005089	006786	008483	010179	011876	013573	015269	0
1	0,016966	018663	020359	022056	023752	025449	027146	028842	030539	032236	1
2	0,033932	035629	037326	039022	040719	042416	044112	045809	047505	049202	2
3	0,050899	052595	054292	055989	057685	059382	061079	062775	064472	066168	3
4	0,067865	069562	071258	072955	074652	076348	078045	079742	081438	083135	4
5	0,084832	086528	088225	089921	091618	093315	095011	096708	098405	100101	5
6	0,101798	103495	105191	106888	108585	110281	111978	113674	115371	117068	6
7	0,118764	120461	122158	123854	125551	127248	128944	130641	132337	134034	7
8	0,135731	137427	139124	140821	142517	144214	145911	147607	149304	151001	8
9	0,152697	154394	156090	157787	159484	161180	162877	164574	166270	167967	9
10	0,169664										10
‰	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	‰

27, CoO, МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ВЕС 74,94

%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%
0	0,000000	001334	002668	004003	005337	006672	008006	009340	010675	012009	0
1	0,013344	014678	016012	017347	018681	020016	021350	022684	024019	025353	1
2	0,026688	028022	029356	030691	032025	033360	034694	036028	037363	038697	2
3	0,040032	041366	042700	044035	045369	046704	048038	049372	050707	052041	3
4	0,053376	054710	056044	057379	058713	060048	061382	062716	064051	065385	4
5	0,066720	068054	069388	070723	072057	073392	074726	076060	077395	078729	5
6	0,080064	081398	082732	084067	085401	086736	088070	089404	090739	092073	6
7	0,093408	094742	096076	097411	098745	100080	101414	102748	104083	105417	7
8	0,106752	108086	109420	110755	112089	113424	114758	116092	117427	118761	8
9	0,120096	121430	122764	124099	125433	126768	128102	129436	130771	132105	9
10	0,133440										10
%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%

27, Co₂O₃, МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ВЕС 165,88

%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%
0	0,000000	000602	001205	001808	002411	003014	003617	004219	004822	005425	0
1	0,006028	006631	007234	007836	008439	009042	009645	010248	010851	011454	1
2	0,012056	012659	013262	013865	014468	015071	015673	016276	016879	017482	2
3	0,018085	018688	019291	019893	020496	021099	021702	022305	022908	023510	3
4	0,024113	024716	025319	025922	026525	027128	027730	028333	028936	029539	4
5	0,030142	030745	031347	031950	032553	033156	033759	034362	034965	035567	5
6	0,036170	036773	037376	037979	038582	039184	039787	040390	040993	041596	6
7	0,042199	042802	043404	044007	044610	045213	045816	046419	047021	047624	7
8	0,048227	048830	049433	050036	050639	051241	051844	052447	053050	053653	8
9	0,054256	054858	055461	056064	056667	057270	057873	058476	059078	059681	9
10	0,060284										10
%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%

24, Cr_2O_3 , МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ВЕС 152,02

‰	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	‰
0	0,000000	000657	001315	001973	002631	003289	003946	004604	005262	005920	0
1	0,006578	007235	007893	008551	009209	009867	010524	011182	011840	012498	1
2	0,013156	013813	014471	015129	015787	016445	017103	017760	018418	019076	2
3	0,019734	020392	021049	021707	022365	023023	023681	024338	024996	025654	3
4	0,026312	026970	027627	028285	028943	029601	030259	030916	031574	032232	4
5	0,032890	033548	034206	034863	035521	036179	036837	037495	038152	038810	5
6	0,039468	040126	040784	041441	042099	042757	043415	044073	044730	045388	6
7	0,046046	046704	047362	048019	048677	049335	049993	050651	051309	051966	7
8	0,052624	053282	053940	054598	055255	055913	056571	057229	057887	058544	8
9	0,059202	059860	060518	061176	061833	062491	063149	063807	064465	065123	9
10	0,065780										10
‰	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	‰

55, Cs_2O , МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ВЕС 281,82

‰	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	‰
0	0,000000	000354	000709	001064	001419	001774	002129	002483	002838	003193	0
1	0,003548	003903	004258	004612	004967	005322	005677	006032	006387	006741	1
2	0,007096	007451	007806	008161	008516	008870	009225	009580	009935	010290	2
3	0,010645	010999	011354	011709	012064	012419	012774	013128	013483	013838	3
4	0,014193	014548	014903	015257	015612	015967	016322	016677	017032	017386	4
5	0,017741	018096	018451	018806	019161	019516	019870	020225	020580	020935	5
6	0,021290	021645	021999	022354	022709	023064	023419	023774	024128	024483	6
7	0,024838	025193	025548	025903	026257	026612	026967	027322	027677	028032	7
8	0,028386	028741	029096	029451	029806	030161	030515	030870	031225	031580	8
9	0,031935	032290	032644	032999	033354	033709	034064	034419	034773	035128	9
10	0,035483										10
‰	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	‰

29, Cu, АТОМНЫЙ ВЕС 63,54

‰	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	‰
0	0,000000	001573	003147	004721	006295	007869	009442	011016	012590	014164	0
1	0,015738	017311	018885	020459	022033	023607	025180	026754	028328	029902	1
2	0,031476	033050	034623	036197	037771	039345	040919	042492	044066	045640	2
3	0,047214	048788	050361	051935	053509	055083	056657	058231	059804	061378	3
4	0,062952	064526	066100	067673	069247	070821	072395	073969	075542	077116	4
5	0,078690	080264	081838	083412	084985	086559	088133	089707	091281	092854	5
6	0,094428	096002	097576	099150	100723	102297	103871	105445	107019	108592	6
7	0,110166	111740	113314	114888	116462	118035	119609	121183	122757	124331	7
8	0,125904	127478	129052	130626	132200	133773	135347	136921	138495	140069	8
9	0,141643	143216	144790	146364	147938	149512	151085	152659	154233	155807	9
10	0,157381										10
‰	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	‰

29, CuO, МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ВЕС 81,54

‰	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	‰
0	0,000000	001226	002452	003678	004905	006131	007357	008584	009810	011036	0
1	0,012263	013489	014715	015941	017168	018394	019620	020847	022073	023299	1
2	0,024526	025752	026978	028204	029431	030657	031883	033110	034336	035562	2
3	0,036789	038015	039241	040467	041694	042920	044146	045373	046599	047825	3
4	0,049052	050278	051504	052730	053957	055183	056409	057636	058862	060088	4
5	0,061315	062541	063767	064993	066220	067446	068672	069899	071125	072351	5
6	0,073578	074804	076030	077256	078483	079709	080935	082162	083388	084614	6
7	0,085841	087067	088293	089519	090746	091972	093198	094425	095651	096877	7
8	0,098104	099330	100556	101782	103009	104235	105461	106688	107914	109140	8
9	0,110367	111593	112819	114045	115272	116498	117724	118951	120177	121403	9
10	0,122630										10
‰	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	‰

29, Cu₂O, МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ВЕС 143,08

‰	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	‰
0	0,000000	000698	001397	002096	002795	003494	004193	004892	005591	006290	0
1	0,006989	007688	008386	009085	009784	010483	011182	011881	012580	013279	1
2	0,013978	014677	015376	016074	016773	017472	018171	018870	019569	020268	2
3	0,020967	021666	022365	023064	023762	024461	025160	025859	026558	027257	3
4	0,027956	028655	029354	030053	030752	031450	032149	032848	033547	034246	4
5	0,034945	035644	036343	037042	037741	038440	039138	039837	040536	041235	5
6	0,041934	042633	043332	044031	044730	045429	046128	046826	047525	048224	6
7	0,048923	049622	050321	051020	051719	052418	053117	053816	054514	055213	7
8	0,055912	056611	057310	058009	058708	059407	060106	060805	061504	062202	8
9	0,062901	063600	064299	064998	065697	066396	067095	067794	068493	069192	9
10	0,069891										10
‰	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	‰

9, F, МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ВЕС 19,00

‰	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	‰
0	0,000000	005263	010526	015789	021052	026315	031578	036842	042105	047368	0
1	0,052631	057894	063157	068421	073684	078947	084210	089473	094736	099999	1
2	0,105263	110526	115789	121052	126315	131578	136842	142105	147368	152631	2
3	0,157894	163157	168421	173684	178947	184210	189473	194736	199999	205263	3
4	0,210526	215789	221052	226315	231578	236842	242105	247368	252631	257894	4
5	0,263157	268421	273684	278947	284210	289473	294736	299999	305263	310526	5
6	0,315789	321052	326315	331578	336842	342105	347368	352631	357894	363157	6
7	0,368421	373684	378947	384210	389473	394736	399999	405263	410526	415789	7
8	0,421052	426315	431578	436842	442105	447368	452631	457894	463157	468421	8
9	0,473684	478947	484210	489473	494736	499999	505263	510526	515789	521052	9
10	0,526315										10
‰	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	‰

26, Fe, АТОМНЫЙ ВЕС 55,85

‰	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	‰
0	0,000000	001790	003581	005371	007162	008952	010743	012533	014324	016114	0
1	0,017905	019695	021486	023276	025067	026857	028648	030438	032229	034019	1
2	0,035810	037600	039391	041181	042972	044762	046553	048343	050134	051924	2
3	0,053715	055505	057296	059086	060877	062667	064458	066248	068039	069829	3
4	0,071620	073410	075201	076991	078782	080572	082363	084153	085944	087735	4
5	0,089525	091316	093106	094897	096687	098478	100268	102059	103849	105640	5
6	0,107430	109221	111011	112802	114592	116383	118173	119964	121754	123545	6
7	0,125335	127126	128916	130707	132497	134288	136078	137869	139659	141450	7
8	0,143240	145031	146821	148612	150402	152193	153983	155774	157564	159355	8
9	0,161145	162936	164726	166517	168307	170098	171888	173679	175470	177260	9
10	0,179051										10
‰	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	‰

26, FeO, МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ВЕС 71,85

‰	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	‰
0	0,000000	001391	002783	004175	005567	006958	008350	009742	011134	012526	0
1	0,013917	015309	016701	018093	019485	020876	022268	023660	025052	026443	1
2	0,027835	029227	030619	032011	033402	034794	036186	037578	038970	040361	2
3	0,041753	043145	044537	045929	047320	048712	050104	051496	052887	054279	3
4	0,055671	057063	058455	059846	061238	062630	064022	065414	066805	068197	4
5	0,069589	070981	072372	073764	075156	076548	077940	079331	080723	082115	5
6	0,083507	084899	086290	087682	089074	090466	091858	093249	094641	096033	6
7	0,097425	098816	100208	101600	102992	104384	105775	107167	108559	109951	7
8	0,111343	112734	114126	115518	116910	118301	119693	121085	122477	123869	8
9	0,125260	126652	128044	129436	130828	132219	133611	135003	136395	137787	9
10	0,139178										10
‰	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	‰

26, Fe₂O₃, МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ВЕС 159,70

‰	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	‰
0	0,000000	000626	001252	001878	002504	003130	003757	004383	005009	005635	0
1	0,006261	006887	007514	008140	008766	009392	010018	010644	011271	011897	1
2	0,012523	013149	013775	014402	015028	015654	016280	016906	017532	018159	2
3	0,018785	019411	020037	020663	021289	021916	022542	023168	023794	024420	3
4	0,025046	025673	026299	026925	027551	028177	028804	029430	030056	030682	4
5	0,031308	031934	032561	033187	033813	034439	035065	035691	036318	036944	5
6	0,037570	038196	038822	039448	040075	040701	041327	041953	042579	043206	6
7	0,043832	044458	045084	045710	046336	046963	047589	048215	048841	049467	7
8	0,050093	050720	051346	051972	052598	053224	053850	054477	055103	055729	8
9	0,056355	056981	057608	058234	058860	059486	060112	060738	061365	061991	9
10	0,062617										10
‰	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	‰

31, Ga₂O₃, МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ВЕС 187,44

‰	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	‰
0	0,000000	000533	001067	001600	002134	002667	003201	003734	004268	004801	0
1	0,005335	005868	006402	006935	007469	008002	008536	009069	009603	010136	1
2	0,010670	011203	011737	012270	012804	013337	013871	014404	014938	015471	2
3	0,016005	016538	017072	017605	018139	018672	019206	019739	020273	020806	3
4	0,021340	021873	022407	022940	023474	024007	024541	025074	025608	026141	4
5	0,026675	027208	027742	028275	028809	029342	029876	030409	030943	031476	5
6	0,032010	032543	033077	033610	034144	034677	035211	035744	036278	036811	6
7	0,037345	037878	038412	038945	039479	040012	040546	041079	041613	042146	7
8	0,042680	043213	043747	044280	044814	045347	045881	046414	046948	047481	8
9	0,048015	048548	049082	049615	050149	050682	051216	051749	052283	052816	9
10	0,053350										10
‰	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	‰

32, GeO₂, МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ВЕС 104,60

%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%
0	0,000000	000956	001912	002868	003824	004780	005736	006692	007648	008604	0
1	0,009560	010516	011472	012428	013384	014340	015296	016252	017208	018164	1
2	0,019120	020076	021032	021988	022944	023900	024856	025812	026768	027724	2
3	0,028680	029636	030592	031548	032504	033460	034416	035372	036328	037284	3
4	0,038240	039196	040152	041108	042065	043021	043977	044933	045889	046845	4
5	0,047801	048757	049713	050669	051625	052581	053537	054493	055449	056405	5
6	0,057361	058317	059273	060229	061185	062141	063097	064053	065009	065965	6
7	0,066921	067877	068833	069789	070745	071701	072657	073613	074569	075525	7
8	0,076481	077437	078393	079349	080305	081261	082217	083173	084130	085086	8
9	0,086042	086998	087954	088910	089866	090822	091778	092734	093690	094646	9
10	0,095602										10
%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%

1, H₂O, МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ВЕС 18,016

%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%
0	0,000000	005550	011101	016651	022202	027753	033303	038854	044404	049955	0
1	0,055506	061056	066607	072158	077708	083259	088809	094360	099911	105461	1
2	0,111012	116563	122113	127664	133214	138765	144316	149866	155417	160967	2
3	0,166518	172069	177619	183170	188721	194271	199822	205372	210923	216474	3
4	0,222024	227575	233126	238676	244227	249777	255328	260879	266429	271980	4
5	0,277531	283081	288632	294182	299733	305284	310834	316385	321935	327486	5
6	0,333037	338587	344138	349689	355239	360790	366340	371891	377442	382992	6
7	0,388543	394094	399644	405195	410745	416296	421847	427397	432948	438499	7
8	0,444049	449600	455150	460701	466252	471802	477353	482903	488454	494005	8
9	0,499555	505106	510657	516207	521758	527308	532859	538410	543960	549511	9
10	0,555062										10
%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%

72, NiO_2 , МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ВЕС 210,5

%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%
0	0,000000	000475	000950	001425	001900	002375	002850	003325	003800	004275	0
1	0,004750	005225	005700	006175	006650	007125	007600	008076	008551	009026	1
2	0,009501	009976	010451	010926	011401	011876	012351	012826	013301	013776	2
3	0,014251	014726	015201	015676	016152	016627	017102	017577	018052	018527	3
4	0,019002	019477	019952	020427	020902	021377	021852	022327	022802	023277	4
5	0,023752	024228	024703	025178	025653	026128	026603	027078	027553	028028	5
6	0,028503	028978	029453	029928	030403	030878	031353	031828	032304	032779	6
7	0,033254	033729	034204	034679	035154	035629	036104	036579	037054	037529	7
8	0,038004	038479	038954	039429	039904	040380	040855	041330	041805	042280	8
9	0,042755	043230	043705	044180	044655	045130	045605	046080	046555	047030	9
10	0,047505										10
%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%

80, Hg, АТОМНЫЙ ВЕС 200,61

%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%
0	0,000000	000498	000996	001495	001993	002492	002990	003489	003987	004486	0
1	0,004984	005483	005981	006480	006978	007477	007975	008474	008972	009471	1
2	0,009969	010468	010966	011465	011963	012461	012960	013458	013957	014455	2
3	0,014954	015452	015951	016449	016948	017446	017945	018443	018942	019440	3
4	0,019939	020437	020936	021434	021933	022431	022930	023428	023927	024425	4
5	0,024923	025422	025920	026419	026917	027416	027914	028413	028911	029410	5
6	0,029908	030407	030905	031404	031902	032401	032899	033398	033896	034395	6
7	0,034893	035392	035890	036389	036887	037385	037884	038382	038881	039379	7
8	0,039878	040376	040875	041373	041872	042370	042869	043367	043866	044364	8
9	0,044863	045361	045860	046358	046857	047355	047854	048352	048851	049349	9
10	0,049847										10
%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%

80, HgO, МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ВЕС 216,61

%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%
0	0,000000	000461	000923	001384	001846	002308	002769	003231	003693	004154	0
1	0,004616	005078	005539	006001	006463	006924	007386	007848	008309	008771	1
2	0,009233	009694	010156	010618	011079	011541	012003	012464	012926	013388	2
3	0,013849	014311	014773	015234	015696	016158	016619	017081	017543	018004	3
4	0,018466	018928	019389	019851	020313	020774	021236	021697	022159	022621	4
5	0,023082	023544	024006	024467	024929	025391	025852	026314	026776	027237	5
6	0,027699	028161	028622	029084	029546	030007	030469	030931	031392	031854	6
7	0,032316	032777	033239	033701	034162	034624	035086	035547	036009	036471	7
8	0,036932	037394	037856	038317	038779	039241	039702	040164	040626	041087	8
9	0,041549	042010	042472	042934	043395	043857	044319	044780	045242	045704	9
10	0,046165										10
%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%

77, Ir, АТОМНЫЙ ВЕС 192,2

%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%
0	0,000000	000520	001040	001560	002081	002601	003121	003642	004162	004682	0
1	0,005202	005723	006243	006763	007284	007804	008324	008844	009365	009885	1
2	0,010405	010926	011446	011966	012486	013007	013527	014047	014568	015088	2
3	0,015608	016129	016649	017169	017689	018210	018730	019250	019771	020291	3
4	0,020811	021331	021852	022372	022892	023413	023933	024453	024973	025494	4
5	0,026014	026534	027055	027575	028095	028616	029136	029656	030176	030697	5
6	0,031217	031737	032258	032778	033298	033818	034339	034859	035379	035900	6
7	0,036420	036940	037460	037981	038501	039021	039542	040062	040582	041103	7
8	0,041623	042143	042663	043184	043704	044224	044745	045265	045785	046305	8
9	0,046826	047346	047866	048387	048907	049427	049947	050468	050988	051508	9
10	0,052029										10
%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%

53, J, АТОМНЫЙ ВЕС 126,91

η/n	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	$\eta/0$
0	0,000000	000787	001575	002363	003151	003939	004727	005515	006303	007091	0
1	0,007879	008667	009455	010243	011031	011819	012607	013395	014183	014971	1
2	0,015759	016547	017335	018123	018911	019699	020486	021274	022062	022850	2
3	0,023638	024426	025214	026002	026790	027578	028366	029154	029942	030730	3
4	0,031518	032306	033094	033882	034670	035458	036246	037034	037822	038610	4
5	0,039398	040185	040973	041761	042549	043337	044125	044913	045701	046489	5
6	0,047277	048065	048853	049641	050429	051217	052005	052793	053581	054369	6
7	0,055157	055945	056733	057521	058309	059097	059884	060672	061460	062248	7
8	0,063036	063824	064612	065400	066188	066976	067764	068552	069340	070128	8
9	0,070916	071704	072492	073280	074068	074856	075644	076432	077220	078008	9
10	0,078796										10
$\eta/0$	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	$\eta/0$

53, J₂O₅ МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ВЕС 333,82

$\eta/0$	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	$\eta/0$
0	0,000000	000299	000599	000898	001198	001497	001797	002096	002396	002695	0
1	0,002995	003294	003594	003893	004193	004492	004792	005091	005391	005690	1
2	0,005990	006289	006589	006888	007188	007487	007787	008086	008386	008685	2
3	0,008985	009284	009584	009883	010183	010482	010782	011081	011381	011680	3
4	0,011980	012279	012579	012878	013178	013477	013777	014076	014376	014675	4
5	0,014975	015274	015574	015873	016173	016472	016772	017071	017371	017670	5
6	0,017970	018269	018569	018868	019168	019467	019767	020066	020366	020665	6
7	0,020965	021264	021564	021863	022163	022462	022762	023061	023361	023660	7
8	0,023960	024259	024559	024858	025158	025457	025757	026056	026356	026655	8
9	0,026955	027254	027554	027853	028153	028452	028752	029051	029351	029650	9
10	0,029950										10
$\eta/0$	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	$\eta/0$

19, К, АТОМНЫЙ ВЕС 39,10

%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%
0	0,000000	002557	005115	007672	010230	012787	015345	017902	020460	023017	0
1	0,025575	028132	030690	033248	035805	038363	040920	043478	046035	048593	1
2	0,051150	053708	056265	058823	061381	063938	066496	069053	071611	074168	2
3	0,076726	079283	081841	084398	086956	089514	092071	094629	097186	099744	3
4	0,102301	104859	107416	109974	112531	115089	117647	120204	122762	125319	4
5	0,127877	130434	132992	135549	138107	140664	143222	145780	148337	150895	5
6	0,153452	156010	158567	161125	163682	166240	168797	171355	173913	176470	6
7	0,179028	181585	184143	186700	189258	191815	194373	196930	199488	202046	7
8	0,204603	207161	209718	212276	214833	217391	219948	222506	225063	227621	8
9	0,230179	232736	235294	237851	240409	242966	245524	248081	250639	253196	9
10	0,255754										10
%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%

19, К₂O, МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ВЕС 94,20

%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%
0	0,000000	001061	002123	003184	004246	005307	006369	007430	008492	009554	0
1	0,010615	011677	012738	013800	014861	015923	016985	018046	019108	020169	1
2	0,021231	022292	023354	024416	025477	026539	027600	028662	029723	030785	2
3	0,031847	032908	033970	035031	036093	037154	038216	039278	040339	041401	3
4	0,042462	043524	044585	045647	046709	047770	048832	049893	050955	052016	4
5	0,053078	054140	055201	056263	057324	058386	059447	060509	061571	062632	5
6	0,063694	064755	065817	066878	067940	069002	070063	071125	072186	073248	6
7	0,074309	075371	076433	077494	078556	079617	080679	081740	082802	083864	7
8	0,084925	085987	087048	088110	089171	090233	091295	092356	093418	094479	8
9	0,095541	096602	097664	098726	099787	100849	101910	102972	104033	105095	9
10	0,106157										10
%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%

57, La, АТОМНЫЙ ВЕС 138,92

‰	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	‰
0	0,000000	000719	001439	002159	002879	003599	004319	005038	005758	006478	0
1	0,007198	007918	008638	009357	010077	010797	011517	012237	012957	013676	1
2	0,014396	015116	015836	016556	017276	017995	018715	019435	020155	020875	2
3	0,021595	022315	023034	023754	024474	025194	025914	026634	027353	028073	3
4	0,028793	029513	030233	030953	031672	032392	033112	033832	034552	035272	4
5	0,035991	036711	037431	038151	038871	039591	040310	041030	041750	042470	5
6	0,043190	043910	044630	045349	046069	046789	047509	048229	048949	049668	6
7	0,050388	051108	051828	052548	053268	053987	054707	055427	056147	056867	7
8	0,057587	058306	059026	059746	060466	061186	061906	062625	063345	064065	8
9	0,064785	065505	066225	066945	067664	068384	069104	069824	070544	071264	9
10	0,071983										10
‰	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	‰

57, La₂O₃, МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ВЕС 325,84

‰	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	‰
0	0,000000	000306	000613	000920	001227	001534	001841	002148	002455	002762	0
1	0,003068	003375	003682	003989	004296	004603	004910	005217	005524	005831	1
2	0,006137	006444	006751	007058	007365	007672	007979	008286	008593	008900	2
3	0,009206	009513	009820	010127	010434	010741	011048	011355	011662	011969	3
4	0,012275	012582	012889	013196	013503	013810	014117	014424	014731	015038	4
5	0,015344	015651	015958	016265	016572	016879	017186	017493	017800	018107	5
6	0,018413	018720	019027	019334	019641	019948	020255	020562	020869	021176	6
7	0,021482	021789	022096	022403	022710	023017	023324	023631	023938	024245	7
8	0,024551	024858	025165	025472	025779	026086	026393	026700	027007	027314	8
9	0,027620	027927	028234	028541	028848	029155	029462	029769	030076	030383	9
10	0,030689										10
‰	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	‰

3, Li, АТОМНЫЙ ВЕС 6,940

‰	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	‰
0	0,000000	014409	028818	043227	057636	072046	086455	100864	115273	129683	0
1	0,144092	158501	172910	187319	201729	216138	230547	244956	259366	273775	1
2	0,288184	302593	317002	331412	345821	360230	374639	389049	403458	417867	2
3	0,432276	446685	461095	475504	489913	504322	518732	533141	547550	561959	3
4	0,576368	590778	605187	619596	634005	648415	662824	677233	691642	706051	4
5	0,720461	734870	749279	763688	778098	792507	806916	821325	835734	850144	5
6	0,864553	878962	893371	907781	922190	936599	951008	965417	979827	994236	6
7	1,008645	1023054	1037464	1051873	1066282	1080691	1095100	1109510	1123919	1138328	7
8	1,152737	1167147	1181556	1195965	1210374	1224783	1239193	1253602	1268011	1282420	8
9	1,296830	1311239	1325648	1340057	1354466	1368876	1383285	1397694	1412103	1426513	9
10	1,440922										10
‰	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	‰

3, Li₂O, МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ВЕС 29,88

‰	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	‰
0	0,000000	003346	006693	010040	013386	016733	020080	023427	026773	030120	0
1	0,033467	036813	040160	043507	046854	050200	053547	056894	060240	063587	1
2	0,066934	070281	073627	076974	080321	083668	087014	090361	093708	097054	2
3	0,100401	103748	107095	110441	113788	117135	120481	123828	127175	130522	3
4	0,133868	137215	140562	143908	147255	150602	153949	157295	160642	163989	4
5	0,167336	170682	174029	177376	180722	184069	187416	190763	194109	197456	5
6	0,200803	204149	207496	210843	214190	217536	220883	224230	227576	230923	6
7	0,234270	237617	240963	244310	247657	251004	254350	257697	261044	264390	7
8	0,267737	271084	274431	277777	281124	284471	287817	291164	294511	297858	8
9	0,301204	304551	307898	311244	314591	317938	321285	324631	327978	331325	9
10	0,334672										10
‰	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	‰

12, Mg, АТОМНЫЙ ВЕС 24,32

‰	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	‰
0	0,000000	004111	008223	012335	016447	020559	024671	028782	032894	037006	0
1	0,041118	045230	049342	053453	057565	061677	065789	069901	074013	078125	1
2	0,082236	086348	090460	094572	098684	102796	106907	111019	115131	119243	2
3	0,123355	127467	131578	135690	139802	143914	148026	152138	156250	160361	3
4	0,164473	168585	172697	176809	180921	185032	189144	193256	197368	201480	4
5	0,205592	209703	213815	217927	222039	226151	230263	234375	238486	242598	5
6	0,246710	250822	254934	259046	263157	267269	271381	275493	279605	283717	6
7	0,287828	291940	296052	300164	304276	308388	312500	316611	320723	324835	7
8	0,328947	333059	337171	341282	345394	349506	353618	357730	361842	365953	8
9	0,370065	374177	378289	382401	386513	390625	394736	398848	402960	407072	9
10	0,411184										10
‰	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	‰

12, MgO, МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ВЕС 40,32

‰	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	‰
0	0,000000	002480	004960	007440	009920	012400	014880	017361	019841	022321	0
1	0,024801	027281	029761	032242	034722	037202	039682	042162	044642	047123	1
2	0,049603	052083	054563	057043	059523	062003	064484	066964	069444	071924	2
3	0,074404	076884	079365	081845	084325	086805	089285	091765	094246	096726	3
4	0,099206	101686	104166	106646	109126	111607	114087	116567	119047	121527	4
5	0,124007	126488	128968	131448	133928	136408	138888	141369	143849	146329	5
6	0,148809	151289	153769	156249	158730	161210	163690	166170	168650	171130	6
7	0,173611	176091	178571	181051	183531	186011	188492	190972	193452	195932	7
8	0,198412	200892	203373	205853	208333	210813	213293	215773	218253	220734	8
9	0,223214	225694	228174	230654	233134	235615	238095	240575	243055	245535	9
10	0,248015										10
‰	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	‰

25, Mn, АТОМНЫЙ ВЕС 54,94

‰	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	‰
0	0,000000	001820	003640	005460	007280	009100	010921	012741	014561	016381	0
1	0,018201	020021	021842	023662	025482	027302	029122	030942	032763	034583	1
2	0,036403	038223	040043	041863	043684	045504	047324	049144	050964	052784	2
3	0,054605	056425	058245	060065	061885	063705	065526	067346	069166	070986	3
4	0,072806	074626	076447	078267	080087	081907	083727	085547	087368	089188	4
5	0,091008	092828	094648	096468	098289	100109	101929	103749	105569	107389	5
6	0,109210	111030	112850	114670	116490	118310	120131	121951	123771	125591	6
7	0,127411	129231	131052	132872	134692	136512	138332	140152	141973	143793	7
8	0,145613	147433	149253	151073	152894	154714	156534	158354	160174	161994	8
9	0,163815	165635	167455	169275	171095	172915	174736	176556	178376	180196	9
10	0,182016										10
‰	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	‰

25, MnO, МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ВЕС 70,94

‰	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	‰
0	0,000000	001409	002819	004228	005638	007048	008457	009867	011277	012686	0
1	0,014096	015506	016915	018325	019734	021144	022554	023963	025373	026783	1
2	0,028192	029602	031012	032421	033831	035241	036650	038060	039469	040879	2
3	0,042289	043698	045108	046518	047927	049337	050747	052156	053566	054976	3
4	0,056385	057795	059204	060614	062024	063433	064843	066253	067662	069072	4
5	0,070482	071891	073301	074711	076120	077530	078939	080349	081759	083168	5
6	0,084578	085988	087397	088807	090217	091626	093036	094445	095855	097265	6
7	0,098674	100084	101494	102903	104313	105723	107132	108542	109952	111361	7
8	0,112771	114180	115590	117000	118409	119819	121229	122638	124048	125458	8
9	0,126867	128277	129687	131096	132506	133915	135325	136735	138144	139554	9
10	0,140964										10
‰	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	‰

25, MnO₂, МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ВЕС 86,94

q/o	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	q/o
0	0,000000	001150	002300	003450	004600	005751	006901	008051	009201	010351	0
1	0,011502	012652	013802	014952	016103	017253	018403	019553	020703	021854	1
2	0,023004	024154	025304	026455	027605	028755	029905	031055	032206	033356	2
3	0,034506	035656	036806	037957	039107	040257	041407	042558	043708	044858	3
4	0,046008	047158	048309	049459	050609	051759	052910	054060	055210	056360	4
5	0,057510	058661	059811	060961	062111	063262	064412	065562	066712	067862	5
6	0,069013	070163	071313	072463	073613	074764	075914	077064	078214	079365	6
7	0,080515	081665	082815	083965	085116	086266	087416	088566	089717	090867	7
8	0,092017	093167	094317	095468	096618	097768	098918	100068	101219	102369	8
9	0,103519	104669	105820	106970	108120	109270	110420	111571	112721	113871	9
10	0,115021										10
q/o	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	q/o

42, Mo, АТОМНЫЙ ВЕС 95,95

q/o	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	q/o
0	0,000000	001042	002084	003126	004168	005211	006253	007295	008337	009379	0
1	0,010422	011464	012506	013548	014590	015633	016675	017717	018759	019801	1
2	0,020844	021886	022928	023970	025013	026055	027097	028139	029181	030224	2
3	0,031266	032308	033350	034392	035435	036477	037519	038561	039603	040646	3
4	0,041688	042730	043772	044815	045857	046899	047941	048983	050026	051068	4
5	0,052110	053152	054194	055237	056279	057321	058363	059405	060448	061490	5
6	0,062532	063574	064616	065659	066701	067743	068785	069828	070870	071912	6
7	0,072954	073996	075039	076081	077123	078165	079207	080250	081292	082334	7
8	0,083376	084418	085461	086503	087545	088587	089630	090672	091714	092756	8
9	0,093798	094841	095883	096925	097967	099009	100052	101094	102136	103178	9
10	0,104220										10
q/o	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	q/o

42, MoO₃, МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ВЕС 143,95

‰	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	‰
0	0,000000	000694	001389	002084	002778	003473	004168	004862	005557	006252	0
1	0,006946	007641	008336	009030	009725	010420	011114	011809	012504	013199	1
2	0,013893	014588	015283	015977	016672	017367	018061	018756	019451	020145	2
3	0,020840	021535	022229	022924	023619	024313	025008	025703	026398	027092	3
4	0,027787	028482	029176	029871	030566	031260	031955	032650	033344	034039	4
5	0,034734	035428	036123	036818	037513	038207	038902	039597	040291	040986	5
6	0,041681	042375	043070	043765	044459	045154	045849	046543	047238	047933	6
7	0,048627	049322	050017	050712	051406	052101	052796	053490	054185	054880	7
8	0,055574	056269	056964	057658	058353	059048	059742	060437	061132	061827	8
9	0,062521	063216	063911	064605	065300	065995	066689	067384	068079	068773	9
10	0,069468										10
‰	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	‰

NH₃, МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ВЕС 18,04

‰	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	‰
0	0,000000	005543	011086	016629	022172	027716	033259	038802	044345	049889	0
1	0,055432	060975	066518	072062	077605	083148	088691	094235	099778	105321	1
2	0,110864	116407	121951	127494	133037	138580	144124	149667	155210	160753	2
3	0,166297	171840	177383	182926	188470	194013	199556	205099	210643	216186	3
4	0,221729	227272	232815	238359	243902	249445	254988	260532	266075	271618	4
5	0,277161	282705	288248	293791	299334	304878	310421	315964	321507	327051	5
6	0,332594	338137	343680	349223	354767	360310	365853	371396	376940	382483	6
7	0,388026	393569	399113	404656	410199	415742	421286	426829	432372	437915	7
8	0,443459	449002	454545	460088	465631	471175	476718	482261	487804	493348	8
9	0,498891	504434	509977	515521	521064	526607	532150	537694	543237	548780	9
10	0,554323										10
‰	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	‰

11, Na, АТОМНЫЙ ВЕС 22,991

‰	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	‰
0	0,000000	004349	008699	013048	017398	021747	026097	030446	034796	039145	0
1	0,043495	047844	052194	056543	060893	065242	069592	073941	078291	082641	1
2	0,086990	091340	095689	100039	104388	108738	113087	117437	121786	126136	2
3	0,130485	134835	139184	143534	147883	152233	156583	160932	165282	169631	3
4	0,173981	178330	182680	187029	191379	195728	200078	204427	208777	213126	4
5	0,217476	221825	226175	230524	234874	239224	243573	247923	252272	256622	5
6	0,260971	265321	269670	274020	278369	282719	287068	291418	295767	300117	6
7	0,304466	308816	313166	317515	321865	326214	330564	334913	339263	343612	7
8	0,347962	352311	356661	361010	365360	369709	374059	378408	382758	387108	8
9	0,391457	395807	400156	404506	408855	413205	417554	421904	426253	430603	9
10	0,434952										10
‰	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	‰

11, Na₂O, МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ВЕС 61,982

‰	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	‰
0	0,000000	001613	003226	004840	006453	008066	009680	011293	012906	014520	0
1	0,016133	017747	019360	020973	022587	024200	025813	027427	029040	030654	1
2	0,032267	033880	035494	037107	038720	040334	041947	043561	045174	046787	2
3	0,048401	050014	051627	053241	054854	056467	058081	059694	061308	062921	3
4	0,064534	066148	067761	069374	070988	072601	074215	075828	077441	079055	4
5	0,080668	082281	083895	085508	087122	088735	090348	091962	093575	095188	5
6	0,096802	098415	100029	101642	103255	104869	106482	108095	109709	111322	6
7	0,112935	114549	116162	117776	119389	121002	122616	124229	125842	127456	7
8	0,129069	130683	132296	133909	135523	137136	138749	140363	141976	143590	8
9	0,145203	146816	148430	150043	151656	153270	154883	156497	158110	159723	9
10	0,161337										10
‰	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	‰

41, Nb₂O₅, МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ВЕС 265,82

%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%
0	0,000000	000376	000752	001128	001504	001880	002257	002633	003009	003385	0
1	0,003761	004138	004514	004890	005266	005642	006019	006395	006771	007147	1
2	0,007523	007900	008276	008652	009028	009404	009781	010157	010533	010909	2
3	0,011285	011662	012038	012414	012790	013166	013542	013919	014295	014671	3
4	0,015047	015423	015800	016176	016552	016928	017304	017681	018057	018433	4
5	0,018809	019185	019562	019938	020314	020690	021066	021443	021819	022195	5
6	0,022571	022947	023324	023700	024076	024452	024828	025205	025581	025957	6
7	0,026333	026709	027085	027462	027838	028214	028590	028966	029343	029719	7
8	0,030095	030471	030847	031224	031600	031976	032352	032728	033105	033481	8
9	0,033857	034233	034609	034986	035362	035738	036114	036490	036867	037243	9
10	0,037619										10
%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%

28, Ni, АТОМНЫЙ ВЕС 58,71

%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%
0	0,000000	001703	003406	005109	006813	008516	010219	011923	013626	015329	0
1	0,017032	018736	020439	022142	023846	025549	027252	028955	030659	032362	1
2	0,034065	035769	037472	039175	040878	042582	044285	045988	047692	049395	2
3	0,051098	052801	054505	056208	057911	059615	061318	063021	064724	066428	3
4	0,068131	069834	071538	073241	074944	076647	078351	080054	081757	083461	4
5	0,085164	086867	088570	090274	091977	093680	095384	097087	098790	100493	5
6	0,102197	103900	105603	107307	109010	110713	112416	114120	115823	117526	6
7	0,119230	120933	122636	124339	126043	127746	129449	131153	132856	134559	7
8	0,136262	137966	139669	141372	143076	144779	146482	148185	149889	151592	8
9	0,153295	154999	156702	158405	160108	161812	163515	165218	166922	168625	9
10	0,170328										10
%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%

28, NiO, МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ВЕС 74,71

‰	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	‰
0	0,000000	001338	002677	004015	005354	006692	008031	009369	010708	012046	0
1	0,013385	014723	016062	017400	018739	020077	021416	022754	024093	025431	1
2	0,026770	028108	029447	030785	032124	033462	034801	036139	037478	038816	2
3	0,040155	041493	042832	044170	045509	046847	048186	049524	050863	052201	3
4	0,053540	054878	056217	057555	058894	060232	061571	062909	064248	065586	4
5	0,066925	068263	069602	070940	072279	073617	074956	076294	077633	078972	5
6	0,080310	081649	082987	084326	085664	087003	088341	089680	091018	092357	6
7	0,093695	095034	096372	097711	099049	100388	101726	103065	104403	105742	7
8	0,107080	108419	109757	111096	112434	113773	115111	116450	117788	119127	8
9	0,120465	121804	123142	124481	125819	127158	128496	129835	131173	132512	9
10	0,133850										10
‰	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	‰

28, Ni₂O₃, МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ВЕС 165,42

‰	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	‰
0	0,000000	000604	001209	001813	002418	003022	003627	004231	004836	005440	0
1	0,006045	006649	007254	007858	008463	009067	009672	010276	010881	011485	1
2	0,012090	012694	013299	013903	014508	015113	015717	016322	016926	017531	2
3	0,018135	018740	019344	019949	020553	021158	021762	022367	022971	023576	3
4	0,024180	024785	025389	025994	026598	027203	027807	028412	029017	029621	4
5	0,030226	030830	031435	032039	032644	033248	033853	034457	035062	035666	5
6	0,036271	036875	037480	038084	038689	039293	039898	040502	041107	041711	6
7	0,042316	042921	043525	044130	044734	045339	045943	046548	047152	047757	7
8	0,048361	048966	049570	050175	050779	051384	051988	052593	053197	053802	8
9	0,054406	055011	055615	056220	056825	057429	058034	058638	059243	059847	9
10	0,060452										10
‰	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	‰

8,0 АТОМНЫЙ ВЕС 16,000

%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%
0	0,000000	006250	012500	018750	025000	031250	037500	043750	050000	056250	0
1	0,062500	068750	075000	081250	087500	093750	100000	106250	112500	118750	1
2	0,125000	131250	137500	143750	150000	156250	162500	168750	175000	181250	2
3	0,187500	193750	200000	206250	212500	218750	225000	231250	237500	243750	3
4	0,250000	256250	262500	268750	275000	281250	287500	293750	300000	306250	4
5	0,312500	318750	325000	331250	337500	343750	350000	356250	362500	368750	5
6	0,375000	381250	387500	393750	400000	406250	412500	418750	425000	431250	6
7	0,437500	443750	450000	456250	462500	468750	475000	481250	487500	493750	7
8	0,500000	506250	512500	518750	525000	531250	537500	543750	550000	556250	8
9	0,562500	568750	575000	581250	587500	593750	600000	606250	612500	618750	9
10	0,625000										10
%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%

15, P₂O₅, МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ВЕС 141,95

%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%
0	0,000000	000704	001408	002113	002817	003522	004226	004931	005635	006340	0
1	0,007044	007749	008453	009158	009862	010567	011271	011976	012680	013384	1
2	0,014089	014793	015498	016202	016907	017611	018316	019020	019725	020429	2
3	0,021134	021838	022543	023247	023952	024656	025361	026065	026769	027474	3
4	0,028178	028883	029587	030292	030996	031701	032405	033110	033814	034519	4
5	0,035223	035928	036632	037337	038041	038746	039450	040154	040859	041563	5
6	0,042268	042972	043677	044381	045086	045790	046495	047199	047904	048608	6
7	0,049313	050017	050722	051426	052131	052835	053539	054244	054948	055653	7
8	0,056357	057062	057766	058471	059175	059880	060584	061289	061993	062698	8
9	0,063402	064107	064811	065516	066220	066924	067629	068333	069038	069742	9
10	0,070447										10
%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%

82, РЬ, АТОМНЫЙ ВЕС 207,21

%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%
0	0,000000	000482	000965	001447	001930	002413	002895	003378	003860	004343	0
1	0,004826	005308	005791	006273	006756	007239	007721	008204	008686	009169	1
2	0,009652	010134	010617	011099	011582	012065	012547	013030	013512	013995	2
3	0,014478	014960	015443	015925	016408	016891	017373	017856	018338	018821	3
4	0,019304	019786	020269	020751	021234	021717	022199	022682	023164	023647	4
5	0,024130	024612	025095	025577	026060	026543	027025	027508	027990	028473	5
6	0,028956	029438	029921	030403	030886	031369	031851	032334	032816	033299	6
7	0,033782	034264	034747	035229	035712	036195	036677	037160	037642	038125	7
8	0,038608	039090	039573	040055	040538	041021	041503	041986	042468	042951	8
9	0,043434	043916	044399	044882	045364	045847	046329	046812	047295	047777	9
10	0,048260										10
%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%

82, РЬО, МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ВЕС 223,21

%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%
0	0,000000	000448	000896	001344	001792	002240	002688	003136	003584	004032	0
1	0,004480	004928	005376	005824	006272	006720	007168	007616	008064	008512	1
2	0,008960	009408	009856	010304	010752	011200	011648	012096	012544	012992	2
3	0,013440	013888	014336	014784	015232	015680	016128	016576	017024	017472	3
4	0,017920	018368	018816	019264	019712	020160	020608	021056	021504	021952	4
5	0,022400	022848	023296	023744	024192	024640	025088	025536	025984	026432	5
6	0,026880	027328	027776	028224	028672	029120	029568	030016	030464	030912	6
7	0,031360	031808	032256	032704	033152	033600	034048	034496	034944	035392	7
8	0,035840	036288	036736	037184	037632	038080	038528	038976	039424	039872	8
9	0,040320	040768	041216	041664	042112	042560	043008	043456	043904	044352	9
10	0,044800										10
%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%

46, Pd, АТОМНЫЙ ВЕС 106,4

%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%
0	0,000000	000939	001879	002819	003759	004699	005639	006578	007518	008458	0
1	0,009598	010338	011278	012218	013157	014097	015037	015977	016917	017857	1
2	0,018796	019736	020676	021616	022556	023496	024436	025375	026315	027255	2
3	0,028195	029135	030075	031015	031954	032894	033834	034774	035714	036654	3
4	0,037593	038533	039473	040413	041353	042293	043233	044172	045112	046052	4
5	0,046992	047932	048872	049812	050751	051691	052631	053571	054511	055451	5
6	0,056390	057330	058270	059210	060150	061090	062030	062969	063909	064849	6
7	0,065789	066729	067669	068609	069548	070488	071428	072368	073308	074248	7
8	0,075187	076127	077067	078007	078947	079887	080827	081766	082706	083646	8
9	0,084586	085526	086466	087405	088345	089285	090225	091165	092105	093045	9
10	0,093984										10
%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%

78, Pt, АТОМНЫЙ ВЕС 195,08

%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%
0	0,000000	000512	001025	001537	002050	002563	003075	003588	004100	004613	0
1	0,005126	005638	006151	006663	007176	007689	008201	008714	009226	009739	1
2	0,010252	010764	011277	011790	012302	012815	013327	013840	01 353	014865	2
3	0,015378	015890	016403	016916	017428	017941	018453	018966	019479	019991	3
4	0,020504	021017	021529	022042	022554	023067	023580	024092	024605	025117	4
5	0,025630	026143	026655	027168	027680	028193	028706	029218	029731	030244	5
6	0,030756	031269	031781	032294	032807	033319	033832	034344	034857	035370	6
7	0,035882	036395	036907	037420	037933	038445	038958	039470	039983	040496	7
8	0,041008	041521	042034	042546	043059	043571	044084	044597	045109	045622	8
9	0,046134	046647	047160	047672	048185	048697	049210	049723	050235	050748	9
10	0,051261										10
%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%

37, Rb₂O, МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ВЕС 186,96

%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%
0	0,000000	000534	001069	001604	002139	002674	003209	003744	004278	004813	0
1	0,005348	005883	006418	006953	007488	008023	008557	009092	009627	010162	1
2	0,010697	011232	011767	012302	012836	013371	013906	014441	014976	015511	2
3	0,016046	016581	017115	017650	018185	018720	019255	019790	020325	020860	3
4	0,021394	021929	022464	022999	023534	024069	024604	025139	025673	026208	4
5	0,026743	027278	027813	028348	028883	029418	029952	030487	031022	031557	5
6	0,032092	032627	033162	033697	034231	034766	035301	035836	036371	036906	6
7	0,037441	037976	038510	039045	039580	040115	040650	041185	041720	042255	7
8	0,042789	043324	043859	044394	044929	045464	045999	046534	047068	047603	8
9	0,048138	048673	049208	049743	050278	050813	051347	051882	052417	052952	9
10	0,053487										10
%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%

75, Re, АТОМНЫЙ ВЕС 186,22

%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%
0	0,000000	000536	001073	001610	002147	002684	003221	003758	004295	004832	0
1	0,005369	005906	006443	006980	007517	008054	008591	009128	009665	010202	1
2	0,010739	011276	011813	012350	012887	013424	013961	014498	015035	015572	2
3	0,016109	016646	017183	017720	018257	018794	019331	019868	020405	020942	3
4	0,021479	022016	022553	023090	023627	024164	024701	025238	025775	026312	4
5	0,026849	027386	027923	028460	028997	029534	030071	030608	031145	031682	5
6	0,032219	032756	033293	033830	034367	034904	035441	035978	036515	037052	6
7	0,037589	038126	038663	039200	039737	040274	040811	041348	041885	042422	7
8	0,042959	043496	044033	044570	045107	045644	046181	046718	047255	047792	8
9	0,048329	048866	049403	049940	050477	051014	051551	052088	052625	053162	9
10	0,053699										10
%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%

45, Rh, АТОМНЫЙ ВЕС 102,91

%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%
0	0,000000	000971	001943	002915	003886	004858	005830	006802	007773	008745	0
1	0,009717	010688	011660	012632	013604	014575	015547	016519	017491	018462	1
2	0,019434	020406	021377	022349	023321	024293	025264	026236	027208	028179	2
3	0,029151	030123	031095	032066	033038	034010	034982	035953	036925	037897	3
4	0,038868	039840	040812	041784	042755	043727	044699	045670	046642	047614	4
5	0,048586	049557	050529	051501	052473	053444	054416	055388	056359	057331	5
6	0,058303	059275	060246	061218	062190	063161	064133	065105	066077	067048	6
7	0,068020	068992	069964	070935	071907	072879	073850	074822	075794	076766	7
8	0,077737	078709	079681	080652	081624	082596	083568	084539	085511	086483	8
9	0,087455	088426	089398	090370	091341	092313	093285	094257	095228	096200	9
10	0,097172										10
%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%

44, Ru, АТОМНЫЙ ВЕС 101,1

%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%
0	0,000000	000989	001978	002967	003956	004945	005934	006923	007912	008902	0
1	0,009891	010880	011869	012858	013847	014836	015825	016815	017804	018793	1
2	0,019782	020771	021760	022749	023738	024727	025717	026706	027695	028684	2
3	0,029673	030662	031651	032640	033630	034619	035608	036597	037586	038575	3
4	0,039564	040553	041543	042532	043521	044510	045499	046488	047477	048466	4
5	0,049455	050445	051434	052423	053412	054401	055390	056379	057368	058358	5
6	0,059347	060336	061325	062314	063303	064292	065281	066271	067260	068249	6
7	0,069238	070227	071216	072205	073194	074183	075173	076162	077151	078140	7
8	0,079129	080118	081107	082096	083086	084075	085064	086053	087042	088031	8
9	0,089020	090009	090999	091988	092977	093966	094955	095944	096933	097922	9
10	0,098911										10
%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%

16, S, АТОМНЫЙ ВЕС 32,066

%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%
0	0,000000	003118	006237	009355	012474	015592	018711	021829	024948	028067	0
1	0,031185	034304	037422	040541	043659	046778	049897	053015	056134	059252	1
2	0,062371	065489	068608	071727	074845	077964	081082	084201	087319	090438	2
3	0,093557	096675	099794	102912	106031	109149	112268	115387	118505	121624	3
4	0,124742	127861	130979	134098	137216	140335	143454	146572	149691	152809	4
5	0,155928	159046	162165	165284	168402	171521	174639	177758	180876	183995	5
6	0,187114	190232	193351	196469	199588	202706	205825	208944	212062	215181	6
7	0,218299	221418	224536	227655	230774	233892	237011	240129	243248	246366	7
8	0,249485	252604	255722	258841	261959	265078	268196	271315	274433	277552	8
9	0,280671	283789	286908	290026	293145	296263	299382	302501	305619	308738	9
10	0,311856										10
%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%

16, SO₃, МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ВЕС 80,066

%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%
0	0,000000	001248	002497	003746	004995	006244	007493	008742	009991	011240	0
1	0,012489	013738	014987	016236	017485	018734	019983	021232	022481	023730	1
2	0,024979	026228	027477	028726	029975	031224	032473	033722	034971	036220	2
3	0,037469	038718	039967	041215	042464	043713	044962	046211	047460	048709	3
4	0,049958	051207	052456	053705	054954	056203	057452	058701	059950	061199	4
5	0,062448	063697	064946	066195	067444	068693	069942	071191	072440	073689	5
6	0,074938	076187	077436	078685	079934	081183	082431	083680	084929	086178	6
7	0,087427	088676	089925	091174	092423	093672	094921	096170	097419	098668	7
8	0,099917	101166	102415	103664	104913	106162	107411	108660	109909	111158	8
9	0,112407	113656	114905	116154	117403	118652	119901	121150	122399	123647	9
10	0,124896										10
%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%

51, Sb, АТОМНЫЙ ВЕС 121,76

%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%
0	0,000000	000821	001642	002463	003285	004106	004927	005749	006570	007391	0
1	0,008212	009034	009855	010676	011498	012319	013140	013961	014783	015604	1
2	0,016425	017247	018068	018889	019710	020532	021353	022174	022996	023817	2
3	0,024638	025459	026281	027102	027923	028745	029566	030387	031208	032030	3
4	0,032851	033672	034494	035315	036136	036957	037779	038600	039421	040243	4
5	0,041064	041885	042706	043528	044349	045170	045992	046813	047634	048455	5
6	0,049277	050098	050919	051741	052562	053383	054204	055026	055847	056668	6
7	0,057490	058311	059132	059954	060775	061596	062417	063239	064060	064881	7
8	0,065703	066524	067345	068166	068988	069809	070630	071452	072273	073094	8
9	0,073915	074737	075558	076379	077201	078022	078843	079664	080486	081307	9
10	0,082128										10
%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%

51, Sb₂O₃, МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ВЕС 291,52

%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%
0	0,000000	000343	000686	001029	001372	001715	002058	002401	002744	003087	0
1	0,003430	003773	004116	004459	004802	005145	005488	005831	006174	006517	1
2	0,006860	007203	007546	007889	008232	008575	008918	009261	009604	009947	2
3	0,010290	010633	010976	011319	011663	012006	012349	012692	013035	013378	3
4	0,013721	014064	014407	014750	015093	015436	015779	016122	016465	016808	4
5	0,017151	017494	017837	018180	018523	018866	019209	019552	019895	020238	5
6	0,020581	020924	021267	021610	021953	022296	022639	022982	023326	023669	6
7	0,024012	024355	024698	025041	025384	025727	026070	026413	026756	027099	7
8	0,027442	027785	028128	028471	028814	029157	029500	029843	030186	030529	8
9	0,030872	031215	031558	031901	032244	032587	032930	033273	033616	033959	9
10	0,034302										10
%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%

21, Sc_2O_3 , МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ВЕС 137,92

%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%
0	0,000000	000725	001450	002175	002900	003625	004350	005075	005800	006525	0
1	0,007250	007975	008700	009425	010150	010875	011600	012325	013051	013776	1
2	0,014501	015226	015951	016676	017401	018126	018851	019576	020301	021026	2
3	0,021751	022476	023201	023926	024651	025377	026102	026827	027552	028277	3
4	0,029002	029727	030452	031177	031902	032627	033352	034077	034802	035527	4
5	0,036252	036977	037703	038428	039153	039878	040603	041328	042053	042778	5
6	0,043503	044228	044953	045678	046403	047128	047853	048578	049303	050028	6
7	0,050754	051479	052204	052929	053654	054379	055104	055829	056554	057279	7
8	0,058004	058729	059454	060179	060904	061629	062354	063080	063805	064530	8
9	0,065255	065980	066705	067430	068155	068880	069605	070330	071055	071780	9
10	0,072505										10
%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%

34, Se, АТОМНЫЙ ВЕС 78,96

%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%
0	0,000000	001266	002532	003799	005065	006332	007598	008865	010131	011398	0
1	0,012664	013931	015197	016464	017730	018996	020263	021529	022796	024062	1
2	0,025329	026595	027862	029128	030395	031661	032928	034194	035460	036727	2
3	0,037993	039260	040526	041793	043059	044326	045592	046859	048125	049392	3
4	0,050658	051925	053191	054457	055724	056990	058257	059523	060790	062056	4
5	0,063323	064589	065856	067122	068389	069655	070921	072188	073454	074721	5
6	0,075987	077254	078520	079787	081053	082320	083586	084853	086119	087386	6
7	0,088652	089918	091185	092451	093718	094984	096251	097517	098784	100050	7
8	0,101317	102583	103850	105116	106382	107649	108915	110182	111448	112715	8
9	0,113981	115248	116514	117781	119047	120314	121580	122847	124113	125379	9
10	0,126646										10
%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%

34, SeO₃, МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ВЕС 126,96

%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%
0	0,000000	000787	001575	002362	003150	003938	004725	005513	006301	007088	0
1	0,007876	008664	009451	010239	011027	011814	012602	013390	014177	014965	1
2	0,015752	016540	017328	018115	018903	019691	020478	021266	022054	022841	2
3	0,023629	024417	025204	025992	026780	027567	028355	029143	029930	030718	3
4	0,031505	032293	033081	033868	034656	035444	036231	037019	037807	038594	4
5	0,039382	040170	040957	041745	042533	043320	044108	044896	045683	046471	5
6	0,047258	048046	048834	049621	050409	051197	051984	052772	053560	054347	6
7	0,055135	055923	056710	057498	058286	059073	059861	060649	061436	062224	7
8	0,063011	063799	064587	065374	066162	066950	067737	068525	069313	070100	8
9	0,070888	071676	072463	073251	074039	074826	075614	076402	077189	077977	9
10	0,078764										10
%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%

14, Si, АТОМНЫЙ ВЕС 28,09

%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%
0	0,000000	000355	000711	001067	001423	001779	002135	002491	002847	003203	0
1	0,003559	003915	004271	004627	004983	005339	005695	006051	006407	006763	1
2	0,007119	007475	007831	008187	008543	008899	009255	009611	009967	010323	2
3	0,010679	011035	011391	011747	012103	012459	012815	013171	013527	013883	3
4	0,014239	014595	014951	015307	015663	016019	016375	016731	017087	017443	4
5	0,017799	018155	018511	018867	019223	019579	019935	020291	020647	021003	5
6	0,021359	021715	022071	022427	022783	023139	023495	023851	024207	024563	6
7	0,024919	025275	025631	025987	026343	026699	027055	027411	027767	028123	7
8	0,028479	028835	029191	029547	029903	030259	030615	030971	031327	031683	8
9	0,032039	032395	032751	033107	033463	033819	034175	034531	034887	035243	9
10	0,035599										10
%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%

14, SiO₂, МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ВЕС 60,09

%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%
0	0,000000	001664	003328	004992	006656	008320	009985	011649	013313	014977	0
1	0,016641	018305	019970	021634	023298	024962	026626	028290	029955	031619	1
2	0,033283	034947	036611	038275	039940	041604	043268	044932	046596	048260	2
3	0,049925	051589	053253	054917	056581	058245	059910	061574	063238	064902	3
4	0,066566	068230	069895	071559	073223	074887	076551	078215	079880	081544	4
5	0,083208	084872	086536	088201	089865	091529	093193	094857	096521	098186	5
6	0,099850	101514	103178	104842	106506	108171	109835	111499	113163	114827	6
7	0,116491	118156	119820	121484	123148	124812	126476	128141	129805	131469	7
8	0,133133	134797	136461	138126	139790	141454	143118	144782	146446	148111	8
9	0,149775	151439	153103	154767	156431	158096	159760	161424	163088	164752	9
10	0,166417										10
%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%

50, Sn, АТОМНЫЙ ВЕС 118,70

%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%
0	0,000000	000842	001684	002527	003369	004212	005054	005897	006739	007582	0
1	0,008424	009267	010109	010951	011794	012636	013479	014321	015164	016006	1
2	0,016849	017691	018534	019376	020219	021061	021903	022746	023588	024431	2
3	0,025273	026116	026958	027801	028643	029486	030328	031171	032013	032855	3
4	0,033698	034540	035383	036225	037068	037910	038753	039595	040438	041280	4
5	0,042122	042965	043807	044650	045492	046335	047177	048020	048862	049705	5
6	0,050547	051390	052232	053074	053917	054759	055602	056444	057287	058129	6
7	0,058972	059814	060657	061499	062342	063184	064026	064869	065711	066554	7
8	0,067396	068239	069081	069924	070766	071609	072451	073294	074136	074978	8
9	0,075821	076663	077506	078348	079191	080033	080876	081718	082561	083403	9
10	0,084245										10
%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%

50, SnO_2 , МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ВЕС 150,70

%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%
0	0,000000	000663	001327	001990	002654	003317	003981	004644	005308	005972	0
1	0,006635	007299	007962	008626	009289	009953	010617	011280	011944	012607	1
2	0,013271	013934	014598	015262	015925	016589	017252	017916	018579	019243	2
3	0,019907	020570	021234	021897	022561	023224	023888	024552	025215	025879	3
4	0,026542	027206	027869	028533	029197	029860	030524	031187	031851	032514	4
5	0,033178	033842	034505	035169	035832	036496	037159	037823	038487	039150	5
6	0,039814	040477	041141	041804	042468	043132	043795	044459	045122	045786	6
7	0,046449	047113	047777	048440	049104	049767	050431	051094	051758	052422	7
8	0,053085	053749	054412	055076	055739	056403	057067	057730	058394	059057	8
9	0,059721	060384	061048	061712	062375	063039	063702	064366	065029	065693	9
10	0,066357										10
%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%

38, SrO , МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ВЕС 103,63

%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%
0	0,000000	000964	001929	002894	003859	004824	005789	006754	007719	008684	0
1	0,009649	010614	011579	012544	013509	014474	015439	016404	017369	018334	1
2	0,019299	020264	021229	022194	023159	024124	025089	026054	027019	027984	2
3	0,028949	029914	030879	031844	032809	033774	034738	035703	036668	037633	3
4	0,038598	039563	040528	041493	042458	043423	044388	045353	046318	047283	4
5	0,048248	049213	050178	051143	052108	053073	054038	055003	055968	056933	5
6	0,057898	058863	059828	060793	061758	062723	063688	064653	065618	066583	6
7	0,067548	068512	069477	070442	071407	072372	073337	074302	075267	076232	7
8	0,077197	078162	079127	080092	081057	082022	082987	083952	084917	085882	8
9	0,086847	087812	088777	089742	090707	091672	092637	093602	094567	095532	9
10	0,096497										10
%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%

73, Ta₂O₅, МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ВЕС 441,90

%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%
0	0,000000	000226	000452	000678	000905	001131	001357	001584	001810	002036	0
1	0,002262	002489	002715	002941	003168	003394	003620	003847	004073	004299	1
2	0,004525	004752	004978	005204	005431	005657	005883	006109	006336	006562	2
3	0,006788	007015	007241	007467	007694	007920	008146	008372	008599	008825	3
4	0,009051	009278	009504	009730	009957	010183	010409	010635	010862	011088	4
5	0,011314	011541	011767	011993	012219	012446	012672	012898	013125	013351	5
6	0,013577	013804	014030	014256	014482	014709	014935	015161	015388	015614	6
7	0,015840	016066	016293	016519	016745	016972	017198	017424	017651	017877	7
8	0,018103	018329	018556	018782	019008	019235	019461	019687	019914	020140	8
9	0,020366	020592	020819	021045	021271	021498	021724	021950	022176	022403	9
10	0,022629										10
%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%

52, Te, АТОМНЫЙ ВЕС 127,61

%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%
0	0,000000	000783	001567	002350	003134	003918	004701	005485	006269	007052	0
1	0,007836	008620	009403	010187	010970	011754	012538	013321	014105	014889	1
2	0,015672	016456	017240	018023	018807	019590	020374	021158	021941	022725	2
3	0,023509	024292	025076	025860	026643	027427	028210	028994	029778	030561	3
4	0,031345	032129	032912	033696	034480	035263	036047	036830	037614	038398	4
5	0,039181	039965	040749	041532	042316	043100	043883	044667	045450	046234	5
6	0,047018	047801	048585	049369	050152	050936	051720	052503	053287	054070	6
7	0,054854	055638	056421	057205	057989	058772	059556	060340	061123	061907	7
8	0,062691	063474	064258	065041	065825	066609	067392	068176	068960	069743	8
9	0,070527	071311	072094	072878	073661	074445	075229	076012	076796	077580	9
10	0,078363										10
%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%

52, TeO₂, МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ВЕС 175,61

%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%
0	0,000000	000569	001138	001708	002277	002847	003416	003986	004555	005124	0
1	0,005694	006263	006833	007402	007972	008541	009111	009680	010249	010819	1
2	0,011388	011958	012527	013097	013666	014236	014805	015374	015944	016513	2
3	0,017083	017652	018222	018791	019361	019930	020499	021069	021638	022208	3
4	0,022777	023347	023916	024486	025055	025624	026194	026763	027333	027902	4
5	0,028472	029041	029611	030180	030749	031319	031888	032458	033027	033597	5
6	0,034166	034736	035305	035874	036444	037013	037583	038152	038722	039291	6
7	0,039861	040430	040999	041569	042138	042708	043277	043847	044416	044986	7
8	0,045555	046124	046694	047263	047833	048402	048972	049541	050111	050680	8
9	0,051249	051819	052388	052958	053527	054097	054666	055236	055805	056374	9
10	0,056944										10
%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%

90, ThO₂, МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ВЕС 264,05

%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%
0	0,000000	000378	000757	001136	001514	001893	002272	002651	003029	003408	0
1	0,003787	004165	004544	004923	005302	005680	006059	006438	006816	007195	1
2	0,007574	007953	008331	008710	009089	009467	009846	010225	010604	010982	2
3	0,011361	011740	012118	012497	012876	013255	013633	014012	014391	014769	3
4	0,015148	015527	015906	016284	016663	017042	017420	017799	018178	018557	4
5	0,018935	019314	019693	020071	020450	020829	021208	021586	021965	022344	5
6	0,022722	023101	023480	023859	024237	024616	024995	025373	025752	026131	6
7	0,026510	026888	027267	027646	028024	028403	028782	029161	029539	029918	7
8	0,030297	030676	031054	031433	031812	032190	032569	032948	033327	033705	8
9	0,034084	034463	034841	035220	035599	035978	036356	036735	037114	037492	9
10	0,037871										10
%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%

22, TiO₂, МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ВЕС 79,90

%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%
0	0,000000	001251	002503	003754	005006	006257	007509	008760	010012	011264	0
1	0,012515	013767	015018	016270	017521	018773	020025	021276	022528	023779	1
2	0,025031	026282	027534	028785	030037	031289	032540	033792	035043	036295	2
3	0,037546	038798	040050	041301	042553	043804	045056	046307	047559	048811	3
4	0,050062	051314	052565	053817	055068	056320	057571	058823	060075	061326	4
5	0,062578	063829	065081	066332	067584	068836	070087	071339	072590	073842	5
6	0,075093	076345	077596	078848	080100	081351	082603	083854	085106	086357	6
7	0,087609	088861	090112	091364	092615	093867	095118	096370	097622	098873	7
8	0,100125	101376	102628	103879	105131	106382	107634	108886	110137	111389	8
9	0,112640	113892	115143	116395	117647	118898	120150	121401	122653	123904	9
10	0,125156										10
%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%

81, Ti, АТОМНЫЙ ВЕС 204,39

%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%
0	0,000000	000489	000978	001467	001957	002446	002935	003424	003914	004403	0
1	0,004892	005381	005871	006360	006849	007338	007828	008317	008806	009295	1
2	0,009785	010274	010763	011252	011742	012231	012720	013210	013699	014188	2
3	0,014677	015167	015656	016145	016634	017124	017613	018102	018591	019081	3
4	0,019570	020059	020548	021038	021527	022016	022505	022995	023484	023973	4
5	0,024463	024952	025441	025930	026420	026909	027398	027887	028377	028866	5
6	0,029355	029844	030334	030823	031312	031801	032291	032780	033269	033758	6
7	0,034248	034737	035226	035716	036205	036694	037183	037673	038162	038651	7
8	0,039140	039630	040119	040608	041097	041587	042076	042565	043054	043544	8
9	0,044033	044522	045011	045501	045990	046479	046969	047458	047947	048436	9
10	0,048926										10
%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%

92, UO_2 , МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ВЕС 270,07

%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%
0	0,000000	000370	000740	001110	001481	001851	002221	002591	002962	003332	0
1	0,003702	004073	004443	004813	005183	005554	005924	006294	006664	007035	1
2	0,007405	007775	008146	008516	008886	009256	009627	009997	010367	010737	2
3	0,011108	011478	011848	012219	012589	012959	013329	013700	014070	014440	3
4	0,014810	015181	015551	015921	016292	016662	017032	017402	017773	018143	4
5	0,018513	018883	019254	019624	019994	020365	020735	021105	021475	021846	5
6	0,022216	022586	022957	023327	023697	024067	024438	024808	025178	025548	6
7	0,025919	026289	026659	027030	027400	027770	028140	028511	028881	029251	7
8	0,029621	029992	030362	030732	031103	031473	031843	032213	032584	032954	8
9	0,033324	033694	034065	034435	034805	035176	035546	035916	036286	036657	9
10	0,037027										10
%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%

92, UO_3 , МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ВЕС 286,07

%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%
0	0,000000	000349	000699	001048	001398	001748	002097	002447	002796	003146	0
1	0,003496	003845	004195	004544	004894	005244	005593	005943	006292	006642	1
2	0,006992	007341	007691	008040	008390	008740	009089	009439	009788	010138	2
3	0,010488	010837	011187	011536	011886	012236	012585	012935	013284	013634	3
4	0,013984	014333	014683	015032	015382	015732	016081	016431	016780	017130	4
5	0,017480	017829	018179	018528	018878	019228	019577	019927	020276	020626	5
6	0,020976	021325	021675	022024	022374	022724	023073	023423	023772	024122	6
7	0,024472	024821	025171	025520	025870	026220	026569	026919	027268	027618	7
8	0,027968	028317	028667	029016	029366	029716	030065	030415	030764	031114	8
9	0,031464	031813	032163	032512	032862	033212	033561	033911	034260	034610	9
10	0,034960										10
%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%

92, U₃O₈ МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ВЕС 842,21

%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%
0	0,000000	000118	000237	000356	000474	000593	000712	000830	000949	001068	0
1	0,001187	001305	001424	001543	001661	001780	001899	002017	002136	002255	1
2	0,002374	002492	002611	002730	002848	002967	003086	003204	003323	003442	2
3	0,003561	003679	003798	003917	004035	004154	004273	004391	004510	004629	3
4	0,004748	004866	004985	005104	005222	005341	005460	005578	005697	005816	4
5	0,005935	006053	006172	006291	006409	006528	006647	006765	006884	007003	5
6	0,007122	007240	007359	007478	007596	007715	007834	007952	008071	008190	6
7	0,008308	008427	008546	008665	008783	008902	009021	009139	009258	009377	7
8	0,009495	009614	009733	009852	009970	010089	010208	010326	010445	010564	8
9	0,010682	010801	010920	011039	011157	011276	011395	011513	011632	011751	9
10	0,011869										10
%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%

23, V, АТОМНЫЙ ВЕС 50,95

%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%
0	0,000000	001962	003925	005888	007850	009813	011776	013738	015701	017664	0
1	0,019627	021589	023552	025515	027477	029440	031403	033366	035328	037291	1
2	0,039254	041216	043179	045142	047105	049067	051030	052993	054955	056918	2
3	0,058881	060843	062806	064769	066732	068694	070657	072620	074582	076545	3
4	0,078508	080471	082433	084396	086359	088321	090284	092247	094210	096172	4
5	0,098135	100098	102060	104023	105986	107948	109911	111874	113837	115799	5
6	0,117762	119725	121687	123650	125613	127576	129538	131501	133464	135426	6
7	0,137389	139352	141315	143277	145240	147203	149165	151128	153091	155053	7
8	0,157016	158979	160942	162904	164867	166830	168792	170755	172718	174681	8
9	0,176643	178606	180569	182531	184494	186457	188420	190382	192345	194308	9
10	2,196270										10
%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%

23, V₂O₃, МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ВЕС 149,90

%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%
0	0,000000	000667	001334	002001	002668	003335	004002	004669	005336	006004	0
1	0,006671	007338	008005	008672	009339	010006	010673	011340	012008	012675	1
2	0,013342	014009	014676	015343	016010	016677	017344	018012	018679	019346	2
3	0,020013	020680	021347	022014	022681	023348	024016	024683	025350	026017	3
4	0,026684	027351	028018	028685	029352	030020	030687	031354	032021	032688	4
5	0,033355	034022	034689	035356	036024	036691	037358	038025	038692	039359	5
6	0,040026	040693	041360	042028	042695	043362	044029	044696	045363	046030	6
7	0,046697	047364	048032	048699	049366	050033	050700	051367	052034	052701	7
8	0,053368	054036	054703	055370	056037	056704	057371	058038	058705	059372	8
9	0,060040	060707	061374	062041	062708	063375	064042	064709	065376	066044	9
10	0,066711										10
%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%

23, V₂O₅, МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ВЕС 181,90

%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%
0	0,000000	000549	001099	001649	002199	002748	003298	003848	004398	004947	0
1	0,005497	006047	006597	007146	007696	008246	008796	009345	009895	010445	1
2	0,010995	011544	012094	012644	013194	013743	014293	014843	015393	015942	2
3	0,016492	017042	017592	018141	018691	019241	019791	020340	020890	021440	3
4	0,021990	022539	023089	023639	024189	024738	025288	025838	026388	026937	4
5	0,027487	028037	028587	029136	029686	030236	030786	031335	031885	032435	5
6	0,032985	033534	034084	034634	035184	035733	036283	036833	037383	037933	6
7	0,038482	039032	039582	040131	040681	041231	041781	042330	042880	043430	7
8	0,043980	044529	045079	045629	046179	046728	047278	047828	048378	048927	8
9	0,049477	050027	050577	051126	051676	052226	052776	053325	053875	054425	9
10	0,054975										10
%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%

74, W, АТОМНЫЙ ВЕС 183,86

%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%
0	0,000000	000543	001087	001631	002175	002719	003263	003807	004351	004895	0
1	0,005438	005982	006526	007070	007614	008158	008702	009246	009790	010333	1
2	0,010877	011421	011965	012509	013053	013597	014141	014685	015228	015772	2
3	0,016316	016860	017404	017948	018492	019036	019580	020124	020667	021211	3
4	0,021755	022299	022843	023387	023931	024475	025019	025562	026106	026650	4
5	0,027194	027738	028282	028826	029370	029914	030457	031001	031545	032089	5
6	0,032633	033177	033721	034265	034809	035352	035896	036440	036984	037528	6
7	0,038072	038616	039160	039704	040248	040791	041335	041879	042423	042967	7
8	0,043511	044055	044599	045143	045686	046230	046774	047318	047862	048406	8
9	0,048950	049494	050038	050581	051125	051669	052213	052757	053301	053845	9
10	0,054389										10
%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%

74, WO₃, МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ВЕС 231,86

%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%
0	0,000000	000431	000862	001293	001725	002156	002587	003019	003450	003881	0
1	0,004312	004744	005175	005606	006038	006469	006900	007332	007763	008194	1
2	0,008625	009057	009488	009919	010351	010782	011213	011644	012076	012507	2
3	0,012938	013370	013801	014232	014664	015095	015526	015957	016389	016820	3
4	0,017251	017683	018114	018545	018976	019408	019839	020270	020702	021133	4
5	0,021564	021996	022427	022858	023289	023721	024152	024583	025015	025446	5
6	0,025877	026308	026740	027171	027602	028034	028465	028896	029328	029759	6
7	0,030190	030621	031053	031484	031915	032347	032778	033209	033640	034072	7
8	0,034503	034934	035366	035797	036228	036660	037091	037522	037953	038385	8
9	0,038816	039247	039679	040110	040541	040972	041404	041835	042266	042698	9
10	0,043129										10
%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%

39, Y₂O₃, МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ВЕС 225,84

%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%
0	0,000000	000442	000885	001328	001771	002213	002656	003099	003542	003985	0
1	0,004427	004870	005313	005756	006199	006641	007084	007527	007970	008413	1
2	0,008855	009298	009741	010184	010626	011069	011512	011955	012398	012840	2
3	0,013283	013726	014169	014612	015054	015497	015940	016383	016826	017268	3
4	0,017711	018154	018597	019040	019482	019925	020368	020811	021253	021696	4
5	0,022139	022582	023025	023467	023910	024353	024796	025239	025681	026124	5
6	0,026567	027010	027453	027895	028338	028781	029224	029667	030109	030552	6
7	0,030995	031438	031880	032323	032766	033209	033652	034094	034537	034980	7
8	0,035423	035866	036308	036751	037194	037637	038080	038522	038965	039408	8
9	0,039851	040294	040736	041179	041622	042065	042507	042950	043393	043836	9
10	0,044279										10
%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%

30, Zn, АТОМНЫЙ ВЕС 65,38

%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%
0	0,000000	001529	003059	004588	006118	007647	009177	010706	012236	013765	0
1	0,015295	016824	018354	019883	021413	022942	024472	026001	027531	029060	1
2	0,030590	032119	033649	035178	036708	038237	039767	041297	042826	044356	2
3	0,045885	047415	048944	050474	052003	053533	055062	056592	058121	059651	3
4	0,061180	062710	064239	065769	067298	068828	070357	071887	073416	074946	4
5	0,076475	078005	079535	081064	082594	084123	085653	087182	088712	090241	5
6	0,091771	093300	094830	096359	097889	099418	100948	102477	104007	105536	6
7	0,107066	108595	110125	111654	113184	114713	116243	117773	119302	120832	7
8	0,122361	123891	125420	126950	128479	130009	131538	133068	134597	136127	8
9	0,137656	139186	140715	142245	143774	145304	146833	148363	149892	151422	9
10	0,152951										10
%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%

30, ZnO, МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ВЕС 81,38

%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%
0	0,000000	001228	002457	003686	004915	006144	007372	008601	009830	011059	0
1	0,012288	013516	014745	015974	017203	018432	019660	020889	022118	023347	1
2	0,024576	025804	027033	028262	029491	030720	031948	033177	034406	035635	2
3	0,036864	038092	039321	040550	041779	043008	044236	045465	046694	047923	3
4	0,049152	050380	051609	052838	054067	055296	056524	057753	058982	060211	4
5	0,061440	062668	063897	065126	066355	067584	068812	070041	071270	072499	5
6	0,073728	074956	076185	077414	078643	079872	081101	082329	083558	084787	6
7	0,086016	087245	088473	089702	090931	092160	093389	094617	095846	097075	7
8	0,098304	099533	100761	101990	103219	104448	105677	106905	108134	109363	8
9	0,110592	111821	113049	114278	115507	116736	117965	119193	120422	121651	9
10	0,122880										10
%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%

40, ZrO₂, МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ВЕС 123,22

%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%
0	0,000000	000811	001623	002434	003246	004057	004869	005680	006492	007304	0
1	0,008115	008927	009738	010550	011361	012173	012984	013796	014608	015419	1
2	0,016231	017042	017854	018665	019477	020288	021100	021912	022723	023535	2
3	0,024346	025158	025969	026781	027592	028404	029216	030027	030839	031650	3
4	0,032462	033273	034085	034896	035708	036520	037331	038143	038954	039766	4
5	0,040577	041389	042200	043012	043824	044635	045447	046258	047070	047881	5
6	0,048693	049504	050316	051128	051939	052751	053562	054374	055185	055997	6
7	0,056808	057620	058432	059243	060055	060866	061678	062489	063301	064112	7
8	0,064924	065736	066547	067359	068170	068982	069793	070605	071416	072228	8
9	0,073040	073851	074663	075474	076286	077097	077909	078720	079532	080344	9
10	0,081115										10
%	0,0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	%

**АТОМНЫЕ И ИОННЫЕ РАДИУСЫ
ХИМИЧЕСКИХ ЭЛЕМЕНТОВ**

Элементы	Атомный номер	Радиусы атомов	Радиусы ионов для координационного числа 6			
			заряд	по Гольдшмидту	по Паулингу	по Аренсу
Ac	89	1,88	3+	—	—	1,18
Ag	47	1,44	1+	1,13	1,26	1,26
			2+	—	—	0,89
Al	13	1,43	3+	0,57	0,50	0,51
Am	95	—	3+	—	—	1,07
			4+	—	—	0,92
As	33	1,25	3+	0,69	—	0,58
			5+	—	0,49	0,46
At	85	—	7+	—	—	0,62
Au	79	1,44	1+	—	1,37	1,37
			3+	—	—	0,85
B	5	0,97	3+	—	0,20	0,23
Ba	56	2,17	2+	1,43	1,35	1,34
Be	4	1,12	2+	0,34	0,31	0,35
Bi	83	1,55	3+	—	—	0,96
			5+	—	0,74	0,74
Br	35	1,19	1—	1,96	1,95	—
			5+	—	—	0,47
			7+	—	0,39	0,39
C	6	0,77	4+	0,2	0,15	0,16
Ca	20	1,96	2+	1,06	0,99	0,99
Cd	48	1,49	2+	1,03	0,97	0,97
Ce	58	1,82	3+	1,18	—	1,07
			4+	1,02	1,01	0,94
Cl	17	1,07	1—	1,81	1,81	—
			5+	—	—	0,34
			7+	—	0,26	0,27
Co	27	—	2+	0,82	0,72	0,72
			3+	0,64	—	0,63
Cr	24	1,25	2+	≈0,83	—	—
			3+	0,64	—	0,63
			6+	≈0,35	0,52	0,52
Cs	55	2,62	1+	1,65	1,69	1,67
Cu	29	1,28	1+	—	0,96	0,96
			2+	—	—	0,72
Dy	66	—	3+	1,07	—	0,92
Er	68	1,86	3+	1,04	—	0,89
Eu	63	—	2+	1,24	—	—
			3+	1,13	—	0,98
F	9	0,71	1—	1,33	1,36	—
			7+	—	0,07	0,08
Fe	26	1,24	2+	0,82	0,80	0,74
			3+	0,67	—	0,64
Fr	87	—	1+	—	—	1,80
Ga	31	1,22	3+	0,62	0,62	0,62
Gd	64	—	3+	1,11	—	0,97
Ge	32	1,22	2+	0,9	—	0,73
			4+	0,44	0,53	0,53

Элементы	Атомный номер	Радиусы атомов	Радиусы ионов для координационного числа 6			
			заряд	по Гольдшмидту	по Паулингу	по Аренсу
H	1	0,46	1—	1,54	2,08	—
Hf	72	1,56	4+	0,84	—	0,78
Hg	80	1,50	2+	1,12	1,10	1,10
Ho	67	—	3+	1,05	—	0,91
п	49	1,62	3+	0,92	0,81	0,81
Ir	77	1,35	4+	0,66	0,64	0,68
J	53	1,36	1—	2,20	2,16	—
			5+	0,94	—	0,62
			7+	—	0,50	0,50
K	19	2,31	1+	1,33	1,33	1,33
La	57	1,86	3+	1,22	1,15	1,14
Li	3	1,52	1+	0,78	0,60	0,68
Lu	71	—	3+	0,99	—	0,85
Mg	12	1,60	2+	0,78	0,65	0,66
Mn	25	1,37	2+	0,91	0,80	0,80
			3+	0,70	—	0,66
			4+	0,52	0,50	0,60
			7+	—	0,46	0,46
Mo	42	1,36	4+	0,68	0,66	0,70
			6+	—	0,62	0,62
N	7	0,71	3+	—	—	0,16
			5+	≈0,15	0,11	0,13
NH ₄	—	—	1+	1,43	—	—
Na	11	1,86	1+	0,98	0,95	0,97
Nb	41	1,43	4+	0,69	0,67	0,74
			5+	0,69	0,70	0,69
Nd	60	1,80	3+	1,15	—	1,04
Ni	28	1,24	2+	0,78	0,69	0,69
Np	93	—	3+	—	—	1,10
			4+	—	—	0,95
			7+	—	—	0,71
O	8	0,60	2—	1,32	1,40	—
			6+	—	0,09	0,10
Os	76	1,35	4+	0,67	0,65	—
			6+	—	—	0,69
P	15	(1,10)	3+	—	—	0,44
			5+	≈0,35	0,34	0,35
Pa	91	—	3+	—	—	1,13
			4+	—	—	0,98
			5+	—	—	0,89
Pb	82	1,75	2+	1,32	1,21	1,20
			4+	0,84	0,84	0,84
Pd	46	1,37	2+	—	—	0,80
			4+	—	—	0,65
Pm	61	—	3+	—	—	1,06
Po	84	1,67	6+	—	—	0,67
Pr	59	1,82	3+	1,16	—	1,06
			4+	1,00	0,92	0,92
Pt	78	1,38	2+	—	—	0,80
			4+	—	—	0,65

Элементы	Атомный номер	Радиусы атомов	Радиусы ионов для координационного числа 6			
			заряд	по Гольдшмидту	по Паулингу	по Аренсу
Pu	94	—	3+	—	—	1,08
			4+	—	—	0,93
Ra	88	—	2+	1,52	—	1,43
Rb	37	2,43	1+	1,49	1,48	1,47
Rc	75	1,37	4+	—	—	0,72
			7+	—	—	0,56
Rh	45	1,34	3+	—	—	0,68
Ru	44	1,33	4+	0,65	0,63	0,67
S	16	1,04	2—	1,74	1,84	—
			4+	—	—	0,37
			6+	0,34	0,29	0,30
Sb	51	1,45	3+	0,90	—	0,76
			5+	—	0,62	0,62
Sc	21	1,60	3+	0,83	—	0,81
Se	34	1,16	2—	1,91	1,98	—
			3+	0,83	0,81	—
			4+	—	—	0,50
			6+	0,35	0,42	0,42
Si	14	1,17	4+	0,39	0,41	0,42
Sm	62	—	3+	1,13	—	1,00
Sn	50	1,40	2+	—	—	0,93
			4+	0,74	0,71	0,71
Sr	38	2,15	2+	1,27	1,13	1,12
Ta	73	1,43	5+	0,68	—	0,68
Tb	65	—	3+	1,09	—	0,93
			4+	0,89	—	0,81
Tc	43	1,35	7+	—	—	0,56
Te	52	1,43	2—	2,11	2,21	—
			4+	0,89	0,81	0,70
			5+	—	0,56	0,56
Th	90	—	4+	1,10	1,02	1,02
Ti	22	1,45	2+	0,80	—	—
			3+	0,69	—	0,76
			4+	0,64	0,68	0,68
Tl	81	1,70	1+	1,49	1,44	1,47
			3+	1,05	0,95	0,95
Tm	69	—	3+	1,04	—	0,87
U	92	1,88	4+	1,05	0,97	0,97
			6+	—	—	0,80
V	23	1,30	2+	0,72	—	0,88
			3+	0,65	—	0,74
			4+	0,61	0,59	0,63
			5+	0,4	0,59	0,59
W	74	1,36	4+	0,68	0,66	0,70
			6+	—	—	0,62
Y	39	1,81	3+	1,06	0,93	0,92
Yb	70	—	3+	1,00	—	0,86
Zn	30	1,33	2+	0,83	0,74	0,74
Zr	40	1,56	4+	0,87	0,80	0,79

РАДИУСЫ ИОНОВ И АТОМОВ
В РАЗЛИЧНЫХ СОЕДИНЕНИЯХ

(Поваренных, 1956)

Элемент	Истинный ионный радиус	Ковалентный или металличе- ский радиус	Радиус атома во фторидах	Радиус атома в окислах	Радиус атома в сульфидах
Ag	1,15	1,44	1,19	1,23	—
Al	0,37	1,43	0,59	0,79	—
As	(0,40)+ ⁵	1,21	—	(0,88)	—
	0,68+ ³	1,21	—	0,89	(1,07)
Au	(1,27)	1,44	—	—	—
B	(0,10)	0,97	(0,42)	(0,60)	—
Ba	1,28	2,23	1,31	1,43	—
Be	0,30	1,13	(0,47)	0,61	0,90
Bi	(0,65)+ ⁵	1,55	—	—	—
	1,15+ ³	1,55	1,22	[1,27]	[1,43]
Br	1,98— ¹	1,14	—	—	—
C	—	0,77	(0,44)	(0,59)	—
Ca	0,92	1,97	0,99	1,12	1,43
Cd	0,95	1,56	1,05	1,15	1,37
Ce	0,81+ ⁴	1,82	—	1,15	—
	0,92+ ³	1,82	—	1,08	—
C	1,85— ¹	1,00	—	—	—
Co	0,81+ ²	1,25	[0,89]	0,96	1,12
Cr	(0,26)+ ⁶	1,28	—	(1,04)	—
	0,73+ ³	1,28	—	0,99	—
Cs	1,62	2,62	1,64	1,73	—
Cu	0,76+ ²	1,28	[0,90]	0,99	—
	0,82+ ¹	1,28	[0,88]	[0,95]	—
F	1,36— ¹	0,72	—	—	—
Fe	0,76+ ³	1,27	0,90	0,99	—
	0,80+ ²	1,27	0,86	0,94	1,11
Ga	0,54	1,28	—	0,86	—
Ge	0,46	1,22	—	0,86	—
H	0,00	0,37	—	—	—
Hg	1,04	1,60	1,15	(1,26)	1,46
In	0,67	1,62	—	1,03	—
J	2,23— ¹	1,33	—	—	—
K	1,29	2,25	1,32	1,39	1,71
La	0,96	1,87	1,05	1,11	—
Li	0,60	1,52	0,66	0,75	1,06
Mg	0,60	1,60	0,72	0,89	1,26
Mn	(0,20)+ ⁷	1,31	—	(1,16)	—
	0,26+ ⁴	1,31	—	0,90	—
	0,65+ ³	1,31	—	0,98	—
	0,85+ ²	1,31	[0,90]	0,99	[1,15]
Mo	(0,40)+ ⁶	1,40	—	0,93	—
	0,54+ ⁴	1,40	—	0,91	1,21
N	—	0,55	—	(0,60)	—
Na	0,93	1,86	0,98	1,09	1,39
Nb	0,49+ ⁵	1,46	—	0,93	—
	0,53+ ⁴	1,46	—	0,89	—
Ni	0,78+ ²	1,24	[0,87]	0,96	1,13

Элемент	Истинный ионный радиус	Ковалентный или металличе- ский радиус	Радиус атома во фторидах	Радиус атома в оксидах	Радиус атома в сульфидах
O	1,46 ⁻²	0,60	—	—	—
P	0,10	1,10	(0,55)	(0,74)	—
Pb	0,72 ⁺⁴	1,75	—	1,09	—
	1,20 ⁺²	1,75	1,26	[1,35]	1,55
Pd	0,78 ⁺²	1,37	0,93	1,03	1,19
Pt	0,74 ⁺²	1,38	—	0,97	1,17
Ra	(1,36)	?	(1,39)	(1,54)	—
Rb	1,44	2,42	1,46	1,55	1,87
Re	(0,34) ⁺⁷	1,38	—	(0,85)	—
Rh	0,73 ⁺³	1,34	—	1,02	—
Ru	0,56 ⁺⁴	1,35	—	0,97	—
S	(0,02) ⁺⁶	1,05	(0,62)	(0,84)	—
	1,84 ⁻²	1,05	—	—	—
Sb	(0,56) ⁺⁵	1,43	—	—	—
	0,84 ⁺⁵	1,43	—	1,03	1,25
Sc	0,58	1,63	0,77	0,93	—
Se	(0,36) ⁺⁶	1,16	—	(0,94)	—
	1,95 ⁻²	1,16	—	—	—
Si	0,21	1,17	(0,52)	0,71	—
Sn	0,63	1,40	—	0,96	—
Sr	1,08	2,15	1,12	1,27	—
Ta	0,50	1,46	—	0,88	—
Te	(0,52) ⁺⁶	1,36	—	(1,05)	—
	2,14 ⁻²	1,36	—	—	—
Th	0,92 ⁺⁴	1,80	—	1,15	—
Ti	0,49 ⁺⁴	1,47	—	0,98	—
	0,69 ⁺³	1,47	—	1,00	—
Tl	0,76 ⁺³	1,71	—	1,15	—
	1,47 ⁺¹	1,71	1,49	—	—
U	0,98 ⁺⁴	1,53	—	1,16	—
V	(0,35) ⁺⁵	1,34	—	0,97	—
	0,45 ⁺⁴	1,34	—	0,93	—
	0,72 ⁺³	1,34	—	1,01	—
W	(0,40) ⁺⁶	1,41	—	0,85	—
	0,54 ⁺⁴	1,41	—	0,87	1,18
Y	0,79	1,81	0,91	1,03	—
Zn	0,67	1,38	0,80	1,93	1,18
Zr	0,71	1,60	—	1,03	—

Примечание. В круглых скобках — величины, полученные путем интерполяции. В квадратных скобках — значения, полученные на основе теоретических расчетов состояния связи, не совпадающие с фактическими межатомными расстояниями. Радиусы ионов даны для координационного числа 6.

**ПРИМЕРЫ ИЗОВАЛЕНТНОГО ИЗОМОРФИЗМА
В СИЛИКАТАХ**

Катион	Радиусы катионов по Аренсу	Координационное число	Минерал	Характер изоморфизма
Zr ⁴⁺ Hf ⁴⁺	0,79 0,78	8	Циркон	Совершенный. Изоморфная примесь до 22% HfSiO ₄
			Катаплект и другие силикаты	Совершенный. Изоморфная примесь до 5% силиката гафния
Mg ²⁺ Ni ²⁺	0,66 0,69	6	Оливин и другие	Совершенный. Изоморфная примесь до 0,7% силиката никеля
			Непунт—антигорит	Совершенный (?) Непрерывный ряд
Mg ²⁺ Fe ²⁺	0,66 0,74	6	Оливин, диопсид, роговая обманка, биотит и другие	Совершенный. Полные ряды
			Гиперстен	Неполный ряд (до 80% железистого компонента)
			Антофиллит	Неполный ряд (до 50% железистого компонента)
			Грюнерит	Неполный ряд (от 50% железистого компонента)
		8	Гранат	Полный ряд
Fe ²⁺ Mn ²⁺	0,74 0,80	6	Тефроит	Совершенный, Полный ряд
			Родонит	Неполный ряд (до 60% железистого компонента)
		8	Гранат	Полный ряд

Катион	Радиусы катионов по Аренсу	Координационное число	Минерал	Характер изоморфизма
1	2	3	4	5
Zn ²⁺	0,74	4	Виллемит—	Несовершенный
Mn ²⁺	0,80	6	фаялит	
Fe ²⁺	0,74	6	Даналит	Совершенный (?)
K ¹⁺	1,33	10	Микроклин	Совершенный. Изоморфная примесь до 11% рубидиевого компонента
Rb ¹⁺	1,47			
		12	Слюды	Совершенный. В природных слюдах значительная изоморфная примесь рубидиевого компонента
Ca ²⁺	0,99	6	Волластонит—	Несовершенный. Ряд с разрывом
Mn ²⁺	0,80		родонит	
		8	Гранат	Разрыв от 66 до 29% кальциевого компонента
Mg ²⁺	0,66	6	Пикротефроит	Совершенный (?)
Mn ²⁺	0,80			
			Родонит—энстатит	Несовершенный. Малая растворимость
		8	Пироп—спессартин	Ряд с разрывом (малая растворимость)
Al ³⁺	0,51	6	Al ₂ O ₃ —Fe ₂ O ₃	Несовершенный (разрыв)
Fe ³⁺	0,64		Кальциевый грапат	Совершенный (полный)
			Эпидот	Неполный ряд (до 40% железистого компонента)
K ¹⁺	1,33	12	Слюды	До 10% цезиевого компонента
Cs ¹⁺	1,67			

Катион	Радиусы катионов по Аренсу	Координационное число	Минерал	Характер изоморфизма
Ca^{2+} Fe^{2+}	0,99 0,74	8	Гранаты	Несовершенный. Разрыв от 41 до 75% кальциевого компонента
Ca^{2+} Mg^{2+}	0,99 0,66	8 6	$\text{CaMg}(\text{Si}_2\text{O}_6) -$ $- \text{Mg}_2(\text{Si}_2\text{O}_6)$	Ограниченная смесимость и распад
		8	Гранат	Несовершенный. Ряд с разрывом от 35 до 78% кальциевого компонента
Na^{1+} K^{1+}	0,97 1,33	8 10	Альбит-калиевый полевой шпат	Ограниченная смесимость
			Цеолиты	Значительная смесимость
Ti^{4+} Zr^{4+}	0,68 0,79	6 6	Эльпидит, гр. ловенита	Значительная растворимость
Si^{4+} Ti^{4+}	0,42 0,68	4	Шерломит	До 25% титанистого компонента

**ПРИМЕРЫ ГЕТЕРОВАЛЕНТНОГО ИЗОМОРФИЗМА
В СИЛИКАТАХ**

Координационное число	Схема замещения	Минерал	Характер изоморфизма
8	$\text{NaSi} \leftarrow \text{CaAl}$	Плагиоклазы, скаполит	Непрерывный ряд
	$2\text{Na} \leftarrow \text{Ca}$	Цеолиты Цеолиты, нефелин	Неполные ряды Ограниченная смесимость
	$\text{NaAl} \leftarrow \text{CaMg}$	Глаукофан — актинолит	Ряд с разрывом
	$\text{NaFe}^{+3} \leftarrow \text{CaMg}$	Пироксены, амфиболы	Ряды с разрывом
6	$\text{LiAl} \leftarrow 2\text{Fe}$	Слюды турмалин	Полный ряд
10	$\text{KSi} \leftarrow \text{BaAl}$	Полевые шпаты Цеолиты	Полный ряд(?) Неполные ряды
	$2\text{K} \leftarrow \text{Ba}$	Цеолиты	Неполные ряды
8	$\text{CaAl} \leftarrow \text{TRMg}$	Эпидот	Ряд с разрывом (?)
8	$2\text{Ca} \leftarrow \text{NaTR}$	Сфен, карбонаты, пиобаты и др.	Неполные ряды
6	$2\text{Fe} \leftarrow \text{LiAl}$	См. $\text{Li} \leftarrow \text{Fe}$	
6	$\text{CaMg} \leftarrow \text{NaAl}$	См. $\text{Na} \leftarrow \text{Ca}$	
6	$\text{MgSi} \leftarrow 2\text{Al}$	Авгит Роговая обманка	Неполный ряд Неполный ряд
	$3\text{Mg} \leftarrow 2\text{Al}$	Биотит, мусковит Хлориты	Ряд с разрывом (полярность) Ограниченная примесь

Координа- ционное число	Схема замещения	Минерал	Характер изоморфизма
4	$\text{MgSi} \leftarrow 2\text{Al}$	Мелилит	Полный ряд
4	$\text{Si}(\text{NaK}) \leftarrow \text{Al}(\text{CaBa})$	См. $\text{Na} \leftarrow \text{Ca}$ $\text{K} \leftarrow \text{Ba}$	
4	$\text{MgSi} \leftarrow 2\text{Al}$	См. $\text{Mg} \leftarrow \text{Al}$	
4	$\text{Si} \leftarrow \text{NaAl}$	Роговая обманка Нефелин	Ограниченная растворимость
4	$\text{CsAl} \leftarrow \text{Si}$	Поллуцит	Ограниченная растворимость
6	$2\text{Ti} \leftarrow 2\text{Fe} + {}^3\text{Mg}$	Биотит	Ограниченная растворимость
6	$\text{TiAl} \leftarrow \text{FeSi}$	Авгит	Ограниченная растворимость

ЛИТЕРАТУРА

- Бокий Г. Б. Введение в кристаллохимию. Изд-во МГУ, 1954.
- Бокий Г. Б. Кристаллохимия. Изд-во МГУ, 1960.
- Борнеман-Старынкевич И. Д. Химическая формула минералов. Зап. Всес. мин. об-ва, ч. 87, вып. 4, 1958; ч. 88, вып. 2, 3, 1959; ч. 89, вып. 2, 1960.
- Борнеман-Старынкевич И. Д., Острогорская О. П., Степанов В. И. Химическая формула минералов. Монтмориллонит. Тр. VI совещания по экспериментальной и технической минералогии и петрографии. Изд-во АН СССР, 1962.
- Бородин Л. С., Назаренко И. И. Об отступлениях минералов группы пирохлора от типовой формулы $A_2B_2X_7$ и о роли конституционной воды в кристаллической решетке пирохлора. Докл. АН СССР, т. 115, № 4, 1957.
- Бородин Л. С., Назаренко И. И. Химический состав пирохлора и изоморфные замещения в молекуле $A_2B_2X_7$. «Геохимия», 1957 а, № 4.
- Гинзбург А. И., Горжевская С. А., Ерофеева Е. А., Сидоренко Г. А. О химическом составе титано-тантало-ниобатов. «Геохимия», 1958, № 5.
- Гинзбург И. В., Сидоренко Г. А., Рогачев Д. Л. О зависимости между главными изоморфными замещениями и некоторыми параметрами кристаллической структуры амфиболов. Тр. Минералогического музея АН СССР, вып. 11, 1961.
- Гинзбург И. В. О трех необычных роговых обманках из гранитных пород. Тр. Минералогич. музея АН СССР, вып. 13, 1962.
- Горжевская С. А., Сидоренко Г. В. Фазовый состав продуктов прокаливания минералов структурного типа пирохлора и связь их с химическим составом. «Геохимия», 1962, № 9.
- Гровс А. Анализ силикатов. Изд-во иностр. лит., 1953.
- Комков А. И. О минералах серий эвксенит-поликраз и приорит-блом-страндина. Докл. АН СССР, т. 126, № 3, 1959.
- Казицын Ю. В. Медистый линнеит из Восточной Сибири. Мат-лы Всесоюз. науч. исслед. геол. ин-та, нов. сер., вып. 26, 1959.
- Лебедев В. И. Основы энергетического анализа геохимических процессов. Изд-во Гос. ун-та, 1957.
- Макаров Е. С. Строение твердых фаз с переменным числом атомов в элементарной ячейке. Изд-во АН СССР, 1947.
- Марфуни А. С. Полевые шпаты — фазовые взаимоотношения, оптические свойства, геологическое распределение. Тр. ин-та геол. рудных м-ний, петрографии, минерал. и геохимии. АН СССР, вып. 78, 1962.
- Поваренных А. С. К вопросу о размерах эффективных радиусов ионов. Докл. АН СССР, т. 109, № 6, 1956.
- Сергеев А. С. Оксидный пирохлор из фенитов Кольского полуострова. Зап. Всесоюз. минералогич. об-ва, ч. 90, вып. 4, 1961.
- Соболев В. С. Введение в минералогию силикатов. Изд-во Львовского Гос. ун-та, 1949.
- Франк-Каменецкий В. А., Соседко Т. А. О характере изоморфных замещений в щелочных бериллах. Докл. АН СССР, т. 118, № 4, 1958.

Франк-Каменецкий В. А., Весельский И. О химических формулах перовскитов. «Геохимия», 1961, № 11.

Чирвинский П. Н. Средний химический состав главных минералов изверженных, метаморфических и осадочных пород. Изд-во Харьковск. гос. ун-та, 1953.

Штрунц Х. Минералогические таблицы. Госгортехиздат, 1962.

Эванс Р. Введение в кристаллохимию. Госхимиздат, 1948.

Berry L. G., Mason Br. Mineralogy. S-Francisco and London, 1959.

Deer W. A., Howie R. A., Zussman J. Rock-forming minerals. Longman, London, 1962—1963.

Fairbairn H. W. and others. A cooperative investigation of precision and accuracy in chemical, spectrochemical and modal analysis of silicate rocks. USA Geological survey bulletin, 980, 1951.

Hey M. H. On the presentation of chemical analyses of minerals. Mineral. Mag. Vol. XXV, No 166, 1939.

Hey M. H. An index of mineral species and varieties arranged chemically. London, 1950.

Hey M. H. A further note on the presentation of chemical analyses of minerals. Mineral. mag. Vol. XX, No 227, 1954.

Kelley W. P. Calculating formulas for fine grained minerals on the basis of chemical analysis. American mineralogist, vol. 30, No 1—2, 1945.

Larsen E. S. The accuracy of chemical analyses of amphiboles and other silicates. Journ. Sci. Vol. XXXV, 5 ser., No 206, 1938.

Machatschki F. Spezielle Mineralogie auf geochemischer Grundlage. Wien, 1953.

Ross C. S., Hendricks S. B. Minerals of the montmorillonite group, their origin and relation to soil and clays. Geol. Surv. prof. paper, 205—B, 1945.

Schaller W. T., Stevens R. E., Jahns R. H. An unusual beryl from Arizona. American mineral. vol. 47, No 5—6, 1962.

Schüller A. Die eigenschaften der mineralie, teil II. Berlin, 1954.

О Г Л А В Л Е Н И Е

Предисловие	3
Основные понятия и определения	5
Расчет формул непосредственно по результатам химического анализа	20
Расчет формул по содержанию элементарной ячейки минерала	33
Особенности расчета формул метамиктных минералов .	38
О выводе формулы нового минерала	47
Изображение состава минерала в виде мишалов	50
Погрешности рассчитанных формул минералов и их источники	54
Заключение	62

П р и л о ж е н и я:

Таблицы для вычисления молекулярных и атомных количеств по весовым процентам	67
1. Атомные и молекулярные количества	68
2. Атомные и ионные радиусы химических элементов	120
3. Радиусы ионов и атомов в различных соединениях .	123
4. Примеры изовалентного изоморфизма в силикатах .	125
5. Примеры гетеровалентного изоморфизма в силикатах .	128
Литература	130

А. Г. БУЛАХ

РУКОВОДСТВО И ТАБЛИЦЫ ДЛЯ РАСЧЕТА ФОРМУЛ МИНЕРАЛОВ

Редактор издательства *Л. Г. Китаенко*

Технический редактор *В. В. Быкова*

Корректор *А. В. Сергеева*

Сдано в набор 24/VIII-1963 г.

Подписано к печати 2/I-64 г.

Формат бумаги 60 × 90^{1/16}

Бум. л. 4,13 Печ. л. 8,25 Уч.-изд. л. 8,91 Т-00703 Тираж 3000 экз. Зак. 478 Цена 45 коп.

Типография фабрики № 5 ГУГК