

<http://www.geojournals.cn/dzxb/ch/index.aspx>

鋰鋇石的結構分析

张 汉 卿

一、鋰鋇石的矿物学

鋰鋇石是我国发现的一种富含鋰、鋇的新矿物^[2]。产于我国某地泥盆纪白云质灰岩与黑云母花岗岩的接触带内,在该接触带中,含鋰、鋇的绿色与白色条纹岩甚发育,鋰鋇石晶体即产于绿色和白色条纹岩中的鋰云母脉内,与 α -鋰霞石、香花石、萤石等矿物共生。

鋰鋇石颗粒粗大的达 8×5 毫米左右,完好的晶形少见,根据偏光显微镜研究的结果,晶体属于单斜晶系,呈自形或半自形柱状。较好的单形有 $\{100\}$ 、 $\{101\}$ 、 $\{010\}$ 、 $\{001\}$,双晶少见;有时沿 (100) 成聚片双晶;解理沿 $\{010\}$ 完全,沿 $\{100\}$ 和 $\{101\}$ 中等;硬度为7.088;比重为2.688。二轴晶,负光性,光轴面为 (010) , $N_p \wedge c$ 为 11° 左右。 $2V = 66^\circ 18'$, $N_p = 1.6220$, $N_m = 1.6332$, $N_g = 1.6380$, $N_g - N_p = 0.0160$, 无色透明。

鋰鋇石的化学成分为: BeO 25.47, Li_2O 23.43, SiO_2 48.39, 不含(OH)及F等阴离子,含少量Al。

根据化学分析求得实验式为: $\text{Li}_2\text{OBeO} \cdot \text{SiO}_2$ 。

鋰鋇石的粉末衍射图谱见图1,照相条件: 相机直径为57.3毫米,特征射线 $\text{FeK}\alpha$, 工

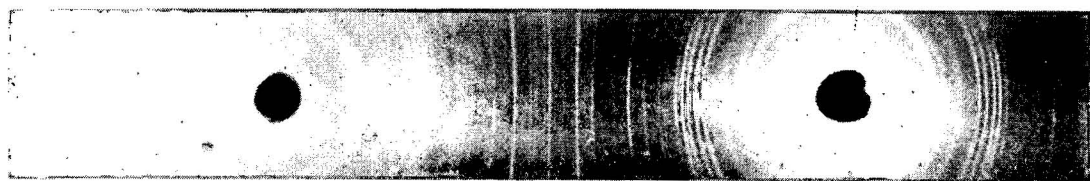


图 1

作电压为25千伏,管流为8毫安的条件下摄取。衍射线的强度用目测相对强度,由比长仪测得衍射线距离,经过吸收校正后求出晶面间距的计算值,根据单晶旋转图求得的晶胞参数,采用试探的方法将衍射线指标化,将实验值和计算值列于表1。由粉末图求出的晶胞参数为:

$$\begin{aligned} a &= 4.706 \pm 0.0005 \text{ \AA}, & b &= 4.945 \pm 0.0005 \text{ \AA}, \\ c &= 6.111 \pm 0.0005 \text{ \AA}, & \beta &= 90^\circ 14' \pm 4'. \end{aligned}$$

二、X-射线单晶实验

我们利用双目镜与偏光显微镜,选取了若干个大小为0.1—0.15毫米的单晶碎块,沿 $[100]$ 、 $[010]$ 、 $[001]$ 分别用 $\text{CuK}\alpha$ 特征射线摄取。

从周转、迴摆及魏森堡图上引出的晶胞参数为:

表 1 锂铍石粉末衍射数据

No.	I/I_0	$d\text{\AA}$ 实验值	hkl	$d\text{\AA}$ 计算值	No.	I/I_0	$d\text{\AA}$ 实验值	hkl	$d\text{\AA}$ 计算值
1	4	4.93	010	4.940				212	1.742
2	10	3.82	011	3.854	20	6	1.700	220	1.704
3	10	3.71	10 $\bar{1}$	3.741	21	5	1.640	030	1.647
			101	3.713				22 $\bar{1}$	1.643
4	7	3.40	110	3.417				221	1.639
5	4	3.05	002	3.067	22	5	1.593	031	1.593
6	6	2.97	11 $\bar{1}$	2.992	23	4	1.571	023	1.573
			111	2.966	24	1	1.558	130	1.555
7	10	2.59	012	2.601	25	8	1.525	004	1.528
8	9	2.47	020	2.473	26	1	1.516	30 $\bar{1}$	1.520
9	9	2.35	200	2.355				301	1.516
10	9	2.27	021	2.286	27	4	1.505	13 $\bar{1}$	1.508
			112	2.270				131	1.506
11	7	2.185	120	2.190				310	1.495
12	2	2.125	210	2.125	28	4	1.489	12 $\bar{3}$	1.492
13	5	2.060	121	2.056				123; 22 $\bar{2}$	1.490
14	4	2.005	211	2.004				222	1.487
15	4	1.920	022	1.925	29	3	1.471	21 $\bar{3}$	1.473
16	1	1.890	013	1.885				213	1.468
17	7	1.865	10 $\bar{3}$	1.872	30	10	1.451	31 $\bar{1}$	1.453
			103; 20 $\bar{2}$	1.866				311	1.451
			202	1.861				032	1.450
18	4	1.777	12 $\bar{2}$	1.808	31	4	1.394	11 $\bar{4}$	1.395
			122	1.779				114	1.393
19	8	1.745	11 $\bar{3}$	1.753	32	1	1.386	13 $\bar{2}$	1.387
			113; 21 $\bar{2}$	1.747				132	1.386
33	1	1.352	230	1.351	50	4	1.186	015	1.1865
34	9	1.341	31 $\bar{2}$	1.345	51	6	1.182	10 $\bar{5}$	1.1835
			312	1.342				105	1.1824
35	7	1.322	320	1.324	52	4	1.175	400	1.1765
36	2	1.317	23 $\bar{1}$	1.319	53	4	1.173	14 $\bar{1}$	1.1738
			231	1.317				141	1.1730
37	3	1.305	22 $\bar{3}$	1.308	54	1	1.146	042	1.1464
			223	1.306				410	1.1448
38	3	1.299	024	1.300	55	5	1.136	22 $\bar{4}$	1.1393
39	5	1.295	32 $\bar{1}$	1.296				224; 330	1.1363
			321	1.294	56	4	1.117	33 $\bar{1}$	1.1177
40	3	1.282	20 $\bar{4}$	1.283				331	1.1169
			033	1.281	57	2	1.113	14 $\bar{2}$	1.1140
41	6	1.279	204	1.278				142	1.1133
42	4	1.252	12 $\bar{4}$	1.253	58	5	1.110	32 $\bar{3}$	1.1119
			124	1.252				323	1.1092
43	3	1.243	30 $\bar{3}$	1.245	59	2	1.088	13 $\bar{4}$	1.0907
			21 $\bar{4}$	1.243				134	1.0885
			303	1.241	60	3	1.076	24 $\bar{1}$	1.0778
44	9	1.237	214; 13 $\bar{3}$	1.238				241	1.0769
			133; 040; 23 $\bar{2}$	1.236	61	4	1.067	12 $\bar{5}$	1.0680

续表 1

No.	I/I ₀	dÅ实验值	hkl	dÅ计算值	No.	I/I ₀	dÅ实验值	hkl	dÅ计算值
45	5	1.234	232	1.234				314	1.0667
46	4	1.214	32 $\bar{2}$	1.217				125	1.0659
			322	1.214	62	2	1.061	420	1.0618
47	2	1.212	041	1.212				21 $\bar{5}$	1.0611
48	2	1.205	31 $\bar{3}$	1.208				215	1.0579
			313	1.203	63	5	1.046	42 $\bar{1}$	1.0474
49	4	1.195	140	1.196				421	1.0460
64	3	1.030	14 $\bar{3}$; 24 $\bar{2}$	1.0311	70	5	0.9962	22 $\bar{5}$	0.9969
			143	1.0305				413	0.9962
			242	1.0301	71	1	0.9936	33 $\bar{3}$	0.9934
65	2	1.018	006	1.0184	72	7	0.9920	225	0.9920
66	2	1.010	23 $\bar{4}$	1.0127				333	0.9915
			234	1.0107	73	4	0.9895	050	0.9896
67	2	1.0025	32 $\bar{4}$	1.0026	74	1	0.9814	035	0.9817
68	8	1.0000	41 $\bar{3}$	1.0000	75	8	0.9745	051; 11 $\bar{6}$	0.9760
69	3	0.9980	324	0.9980				116	0.9748

$a = 4.68 \pm 0.02 \text{ \AA}, \quad b = 4.95 \pm 0.03 \text{ \AA},$

$c = 6.13 \pm 0.02 \text{ \AA}, \quad \beta = 90^{\circ}20' \pm 5'.$

晶胞的体积: $V = 142 \text{ \AA}^3$, 单位晶胞中含有分子数: $N = 2$ 。晶体化学式为: $\text{Li}_2\text{Be}[\text{SiO}_4]$ 。晶体的理论密度为: $\rho = 2.688 \text{ 克/厘米}^3$ 。

在等倾斜魏森堡图上共收集了 $0kl, 1kl, 2kl, h0l, h1l, h2l, hk0$ 等 427 个衍射点, 经过指标化后, 肯定晶体具有下列衍射条件:

$h00: \quad h = 2n$

$00l: \quad l = 2n$

$h0l: \quad h + l = 2n$

根据系统消光, 获得锂铍石的劳埃点群为: $C_{2h} = 2/m$, 衍射符号为: $2/mP- / n_0$ 。因此, 晶体的空间群为: $P2/n$ 或 Pn , 由于晶体有明显的压电效应(由中国科学院地质研究所林卓然测定)。所以, 锂铍石的空间群确定为: $C_{2v}^2 - Pn_0$ 。

衍射点的强度系用多重胶片法和强度标法目估的, 强度数据经过汤姆逊 (Thomson) 因子与洛伦兹 (Lorentz) 因子修正后, 用威尔逊 (Wilson) 方法还原为结构振幅, 未作吸收校正和温度校正。

三、结构探索

(一) 氧原子的分布

结构探索时, 我们根据锂铍石的形态和物理性质, 应用几何分析的方法, 主要是最紧密堆积的原理, 首先考虑到锂铍石的晶胞参数与氧原子作最紧密堆积时的三个重复周期比较, 结果是很相近的, 并计算了每个氧原子在单位晶胞中占有的平均体积为 $17.7 \text{ \AA}^3$, 离子堆积密度为 $6.8^{[4]}$ 以及矿物硬度大等特点, 于是确定氧原子在晶胞中作最紧密堆积方式排

列。

已知晶体之 $C_0 = 6.15 \text{ \AA}$, 根据氧的离子半径为 $1.40 \text{ \AA}^{[3]}$, $2R_0^{2-} = 2.80 \text{ \AA}$, $2 \times 2.80 = 5.60 \text{ \AA}$, 故沿 c 轴可以安置两个氧原子, 而晶体的 $a_0 = 4.68 \text{ \AA}$ 与氧原子最紧密堆积层间距离的两倍 $2 \times 2.28 = 4.56 \text{ \AA}$ 接近。 $b_0 = 4.95 \text{ \AA}$ 又与氧作六方最紧密堆积层内的行间距离 $2 \times 2.42 = 4.84 \text{ \AA}$ 相比拟^[6]。因此, 我们推测氧原子在构造中作六方最紧密堆积, 最紧密堆积层平行于(100), 而沿 c 轴方向氧原子作直线排列, 在 b 轴方向氧原子为折线分布。

(二) 硅、铍和锂等原子的分布

根据已有的结晶化学知识, 硅酸盐类构造中的阳离子均被氧离子所包围, 锂铍石的化学成分中的硅与铍离子的配位形式是确定的, 配位数均为 4, 具四面体配位, 无疑地是填充四面体孔隙。又因硅与氧之比为 $\text{Si}:\text{O} = 1:4$, 按硅酸盐的晶体结构特性, 应具有孤立硅-氧四面体根的岛状硅酸盐性质, 而铍的配位形式与硅相同。因此, 同样填充其四面体孔隙, 唯有锂原子的配位形式不确定, 配位数可为 4, 亦可为 6, 既可填充四面体孔隙, 也可填充八面体孔隙, 因此, 就有下列三种填充形式的可能性:

1. 两个锂原子全部填充于四面体孔隙中;
2. 两个锂原子其中之一位于四面体孔隙, 而另一个位于八面体孔隙;
3. 两个锂原子全部填充在八面体孔隙内。

我们考虑到阳离子的配位数以及在氧作最紧密堆积构造中, 阳离子填充的孔隙种类与填充率对矿物的折射率所起的作用, 就此三种情况计算了理论平均折射率^[1]。计算的结果分别为 1) 1.6353; 2) 1.6538; 3) 1.6721。锂铍石的实验平均折射率为 1.6311。显然, 锂原子全部填充在四面体孔隙中的可能性最大。

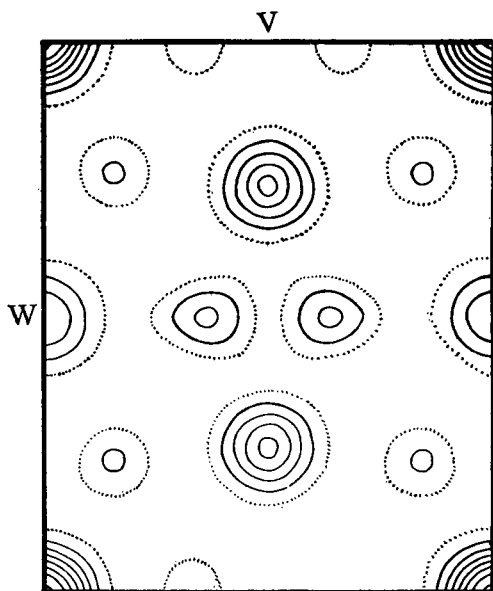


图 2 锂铍石的原子向量分布函数 $P(VW)$

(三) 原子间向量分布函数的应用

我们根据结构振幅 $|F_{0kl}|^2$ 和 $|F_{h0l}|^2$ 值计算了锂铍石的原子间向量函数 $P(VW)$ 和 $P(uW)$, 如图 2 和图 3 所示。在 $P(VW)$ 图上, 原子间向量峰的分布情况进一步证实了氧在结构中作六方最紧密堆积, 在 $V=\frac{1}{3}, W=\frac{1}{2}$ 处的峰是有许多 Harker 峰重迭的结果。在 $P(uW)$ 图上, 可看出原子间向量峰呈层排列, 而且垂直于 X 轴, 由此说明最紧密堆积层垂直 X 轴。在 $u = \frac{1}{2}, W = \frac{1}{2}$ 处出现与原点等大的峰值是由 n 滑移面造成。

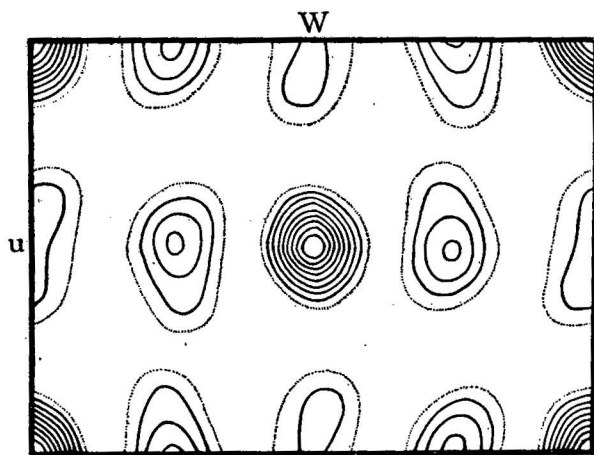


图 3 锂铍石的原子向量分布函数 $P(uW)$

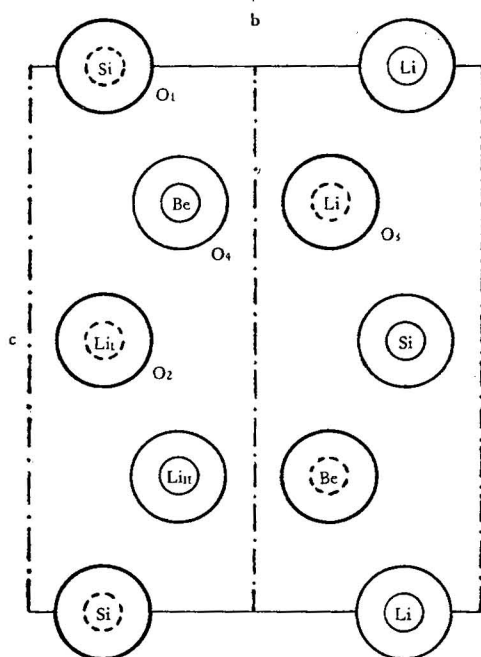


图 4

由 Si—Si; Be—Be; Li—Li 等原子间向量峰重迭的结果,从图上还可看到配位四面体均以角顶相联结,四面体的尖端指向晶胞的一方以及四面体的倾斜方向等现象。

这两幅投影图的共同特点,在于每个峰的显现都有许多原子间向量峰重迭的结果。因此,要对每个峰值加以精确的解释是比较困难的,所以此种图只能作为参考。

根据以上的分析,我们获得一个试用结构,结构中各种原子的分布与对称要素的关系如图 4 所示。

(四) 试用结构的肯定和修正

根据上述结构模型,我们利用硅-氧,铍-氧,锂-氧三种四面体的一般键长关系,求得晶胞中各原子的坐标参数,计算了电子密度分布函数 $\rho(YZ)$ 和 $\rho(XZ)$, 计算结果证明试用结构基本上是正确的,但是由此算出 $0kl$ 和 $h0l$ 衍射的偏离因子 R 值都大于 0.40, 这说明原子坐标参数尚有相当大的误差。

我们利用 $\rho(YZ)$ 和 $\rho(XZ)$ 电子密度投影图逐次地对 Si, Be 和 O 原子作了八次修正和多次结构因子计算,使 R 值由大于 0.40 降为 $R_{0kl} = 0.24$, $R_{h0l} = 0.19$, 在此基础上又对 Li 原子的坐标参数作了四次修正和多次结构因子计算,最后将 R 值降为 $R_{0kl} = 7\%$ 和 $R_{h0l} = 8.5\%$, 这时所获得的电子密度分布图和相应的结构投影如图 5 和图 6 所示。

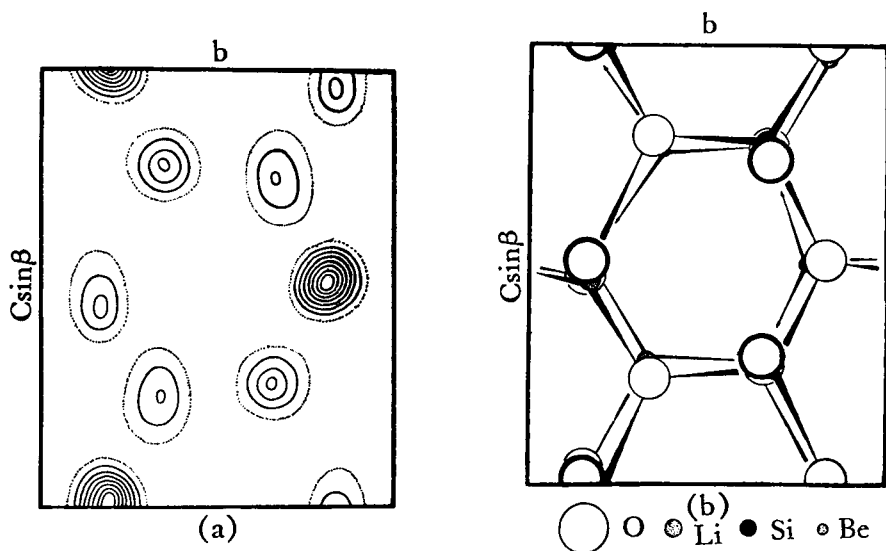


图 5. 锂铍石的电子密度分布函数 $\rho(YZ)$ (a) 和相应的结构投影(b)

表 2 锂铍石的原子坐标参数

原子 坐标	Si ₍₂₎	Be ₍₂₎	Li _{I(2)}	Li _{II(2)}	O ₁₍₂₎	O ₂₍₂₎	O ₃₍₂₎	O ₄₍₂₎
X	0	0.520	0	0.500	0.355	0.420	0.420	0.845
Y	0.170	0.330	0.162	0.325	0.160	0.150	0.650	0.345
Z	0	0.245	0.560	0.735	0.050	0.455	0.235	0.205

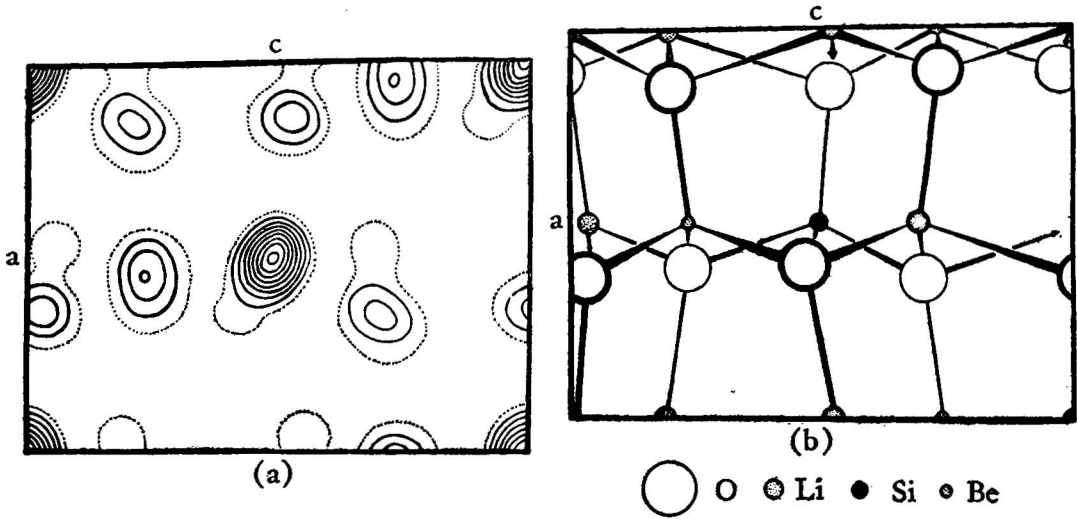


图 6. 锂铍石的电子密度分布函数 $\rho(XZ)$ (a) 和相应的结构投影(b)

根据电子密度分布函数 $\rho(YZ)$ 和 $|F_{0kl}|$ 实验值以及 $\rho(XZ)$ 和 $|F_{h0l}|$ 实验值计算出的各原子坐标参数列于表 2, 相应的原子间键长数据见表 3。

表 3 各种四面体的原子间距

Si-O 四面体		Be-O 四面体		Li _I -O 四面体		Li _{II} -O 四面体	
Si-O ₁	1.679	Be-O ₁	1.640	Li _I -O ₁	2.022	Li _{II} -O ₁	2.030
Si-O ₂	1.673	Be-O ₂	1.625	Li _I -O ₂	2.066	Li _{II} -O ₂	2.054
Si-O ₃	1.658	Be-O ₃	1.625	Li _I -O ₃	2.025	Li _{II} -O ₃	2.035
Si-O ₄	1.650	Be-O ₄	1.615	Li _I -O ₄	2.045	Li _{II} -O ₄	2.050
O ₁ -O ₂	2.810	O ₁ -O ₂	2.526	O ₁ -O ₂	3.126	O ₁ -O ₂	3.125
O ₁ -O ₃	2.965	O ₁ -O ₃	2.739	O ₁ -O ₃	2.995	O ₁ -O ₃	3.010
O ₁ -O ₄	2.730	O ₁ -O ₄	2.661	O ₁ -O ₄	3.199	O ₁ -O ₄	3.156
O ₂ -O ₃	2.698	O ₂ -O ₃	2.723	O ₂ -O ₃	3.053	O ₂ -O ₃	3.062
O ₂ -O ₄	2.694	O ₂ -O ₄	2.690	O ₂ -O ₄	2.985	O ₂ -O ₄	3.004
O ₃ -O ₄	2.930	O ₃ -O ₄	2.525	O ₃ -O ₄	3.095	O ₃ -O ₄	3.075

锂铍石单位晶胞中含有 16 个原子, 决定原子坐标的参数为 24。

结构因子 $|F_{0kl}|$ 和 $|F_{h0l}|$ 及 $|F_{\bar{h}0l}|$ 的实验值与计算值, 相角对比表列于表 4 和表 5 中。

四、结构的描述

锂铍石的结构如图 7 所示, 氧在构造中作六方最紧密堆积, 重复方式为 $n = 2, \dots |TT|TT| \dots$, 即 $\dots |AB|AB| \dots$ ^[5]。最紧密堆积层平行于(100), Si、Be 和 Li 原子配位数为 4, 填充于最紧密堆积的四面体孔隙中。

根据锂铍石构造沿 a 轴的投影图如图 8 所示, 整个结构系由孤立的硅-氧四面体, 铍-氧四面体以及锂-氧四面体组成, 互依公用角顶氧离子相联结, 每一个氧原子与一个硅、

表 4 锂铍石的结构因子 $|F_{0kl}|$ 的实验值与计算值及相角对比表

hkl	实验值	计算值	相角	hkl	实验值	计算值	相角
002	5.20	3.95	11°	032	12.70	12.45	172°
004	11.50	11.40	345°	033	2.43	2.51	244°
006	2.53	2.53	13°	034	2.00	2.20	187°
010	2.24	1.40	0°	035	1.40	1.46	277°
011	6.50	5.25	109°	036	4.70	4.65	160°
012	9.50	9.36	350°	040	3.95	3.94	180°
013	3.74	4.32	135°	041	2.89	2.85	277°
014	0.85	0.96	18°	042	0.50	0.62	348°
015	5.70	5.67	112°	043	4.50	4.65	290°
016	2.41	2.43	335°	044	1.75	1.96	139°
017	2.50	2.96	139°	045	2.65	2.98	303°
020	10.65	10.00	180°	046	0.84	0.83	325°
021	2.60	2.43	136°	050	2.49	2.60	0°
022	2.81	2.82	181°	051	0.50	0.30	288°
023	4.55	4.60	120°	052	4.61	4.85	358°
024	5.55	5.70	171°	053	2.10	2.19	10°
025	3.00	3.67	152°	054	1.95	2.15	5°
026	1.81	1.77	184°	060	5.53	5.78	0°
027	3.95	4.48	99°	061	2.56	2.71	72°
030	3.05	3.07	180°	062	1.00	0.98	0°
031	2.05	2.33	281°				

表 5 锂铍石的结构因子 $|F_{h0l}|$ 和 $|F_{\bar{h}0l}|$ 的实验值与计算值及相角对比表

hkl	实验值	计算值	相角	hkl	实验值	计算值	相角
002	7.35	7.37	37°	501	3.00	2.51	332°
004	18.00	17.50	344°	503	6.12	5.85	321°
006	4.30	5.50	54°	600	5.83	5.85	12°
101	10.60	10.15	336°	$\bar{1}01$	9.55	9.60	327°
103	2.05	1.87	30°	$\bar{1}03$	9.25	9.30	323°
105	8.63	8.02	298°	$\bar{1}05$	9.00	11.20	325°
107	4.00	3.94	39°	$\bar{1}07$	5.00	5.05	348°
200	18.60	21.50	312°	$\bar{2}02$	5.45	3.58	48°
202	6.60	7.00	0°	$\bar{2}04$	11.94	11.95	359°
204	9.50	8.75	310°	$\bar{2}06$	4.00	2.95	19°
206	5.00	4.87	7°	$\bar{3}01$	10.50	10.43	354°
301	7.10	6.67	315°	$\bar{3}03$	8.49	7.90	352°
303	8.60	7.70	8°	$\bar{3}05$	7.80	9.04	348°
305	2.39	2.94	353°	$\bar{4}02$	5.36	5.36	1°
400	3.00	4.20	341°	$\bar{4}04$	5.05	5.09	20°
402	2.30	2.33	356°	$\bar{5}01$	5.24	5.17	36°
404	2.50	2.50	7°	$\bar{5}03$	3.09	2.97	75°
406	1.60	1.59	55°				

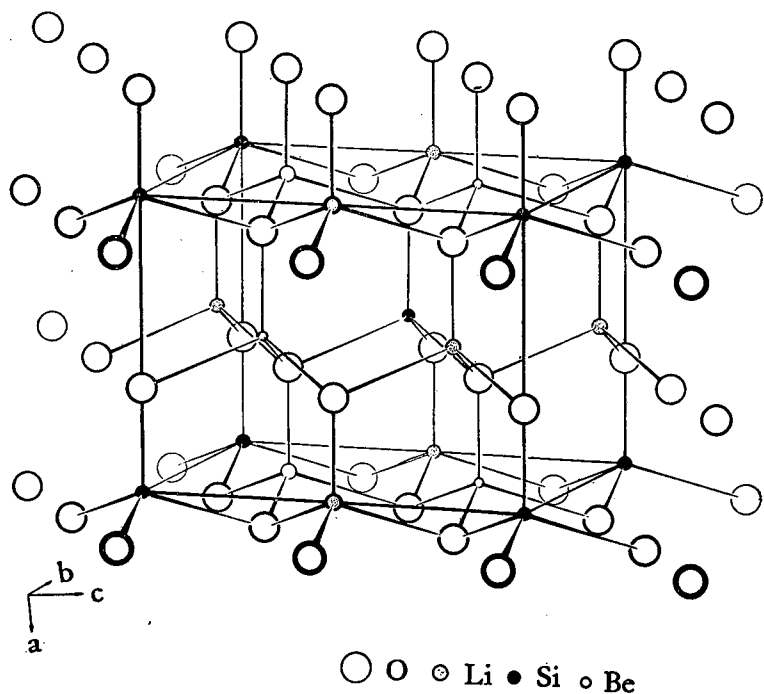
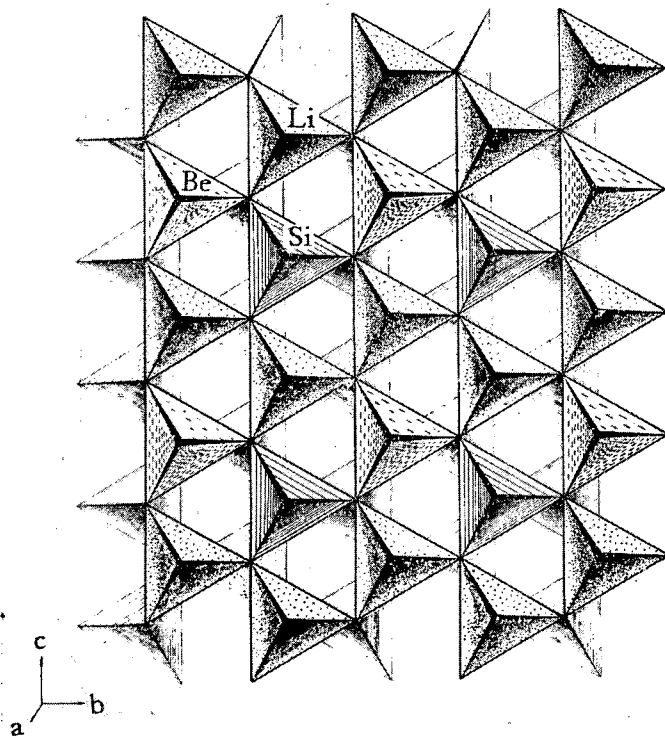


图 7. 锂铍石的晶体结构

图 8. 锂铍石晶体结构沿 a 轴的投影
(以配位多面体表示)

一个铍和两个锂原子相联结,由锂-氧双四面体连接而成的“之”字链与硅-氧四面体及铍-氧四面体组成的“之”字链互相平行排列,并沿[010]方向延伸,每一个“之”字链的链节长度为二个四面体。沿[001]方由硅-氧和锂-氧四面体组成的直线链与铍-氧和锂-氧四面体组成的直线链相间平行排列。四面体之尖端均朝向晶胞的上方如图 9 所示。

由于锂-氧键要比硅-氧键及铍-氧键皆为长,因此,硅-氧四面体或铍-氧四面体与锂-氧四面体相联结的角顶,往往会微微升高或偏斜。所以,引起整个晶体结构中的四面体均倾斜一个角度,倾斜角的大小,根据理论计算的结果为: $\Delta = 20'$ 左右。可解释为晶体之 β 角的形成原因。

根据提出的结构模型,锂铍石的晶体化学式应写成 $\text{Li}_2\text{Be}[\text{SiO}_4]$ 。

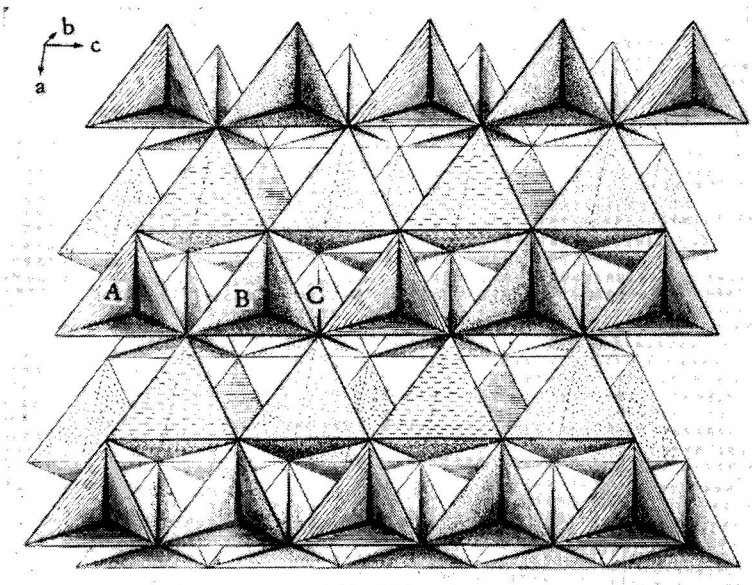


图 9. 锂铍石的晶体结构
(以配位多面体表示)

A. 硅氧四面体; B. 锂氧四面体; C. 铍氧四面体。

结构中的电价平衡情况与鲍林的静电价法则是完全符合的,电价平衡列于表 6。

表 6 锂铍石中的电价平衡表

原 子	Si	Be	Li _I	Li _{II}	
O ₁	4/4	2/4	1/4	1/4	2
O ₂	4/4	2/4	1/4	1/4	2
O ₃	4/4	2/4	1/4	1/4	2
O ₄	4/4	2/4	1/4	1/4	2

本项工作是在北京地质学院彭志忠副教授的指导下进行的,并得到郭宗山工程师的热情关怀和指导,参加这项工作的有:刘金定,李德文等,北京大学的张冠英,中国科学院物理研究所的范海福,中国医学科学院的王文英以及北京地质学院 X-射线实验室的其他同志都曾给予热情的帮助,特此表示谢意。

参 考 文 献

- [1] 叶大年 1965 氧离子的最紧密堆积构造与矿物的平均折光率之关系。地质科学, 3 期。
[2] 赵春林 1964 锂铍石——一个新的符 Li, Be 矿物。地质学报, 44 卷 3 期。
[3] 唐有琪 1958 结晶化学。高等教育出版社。
[4] Н. Г. Ф. 温克勒 1960 晶体构造和晶体性质。科学出版社。
[5] Белов Н. В. 1947 Структура ионных кристаллов и металлических фаз. Издательство Академии Наук СССР.
[6] Порлий-Кошиц М. А. 1960 Практический курс рентгеноструктурного анализа, Том 11. Издательство Московского Университета.

STRUCTURAL ANALYSIS OF LIBERITE

CHANG HAN-CHING

(Abstract)

Liberite is a new lithium-rich beryllium-silicate, with cell constants $a_0 = 4.68\text{\AA}$, $b_0 = 4.95\text{\AA}$, $c_0 = 6.13\text{\AA}$, $B = 90^\circ 30'$ and space-group C_2^2 -pu. The crystal structure is determined in accordance with the principle of the closest packing and chemical characters of other silicate crystals. The chemical formula of the crystal derived from the structure would be: $\text{Li}_2\text{B}_2(\text{SiO}_4)$. The oxide ions in the structure have a pattern of hexagonal close-packing, while the lithium, beryllium and silicium cations are 4-coordinated, filling the polosity of tetrahedrons which are connected with each other by angle points. There exist both the broken-line and straight-line forms of bound.