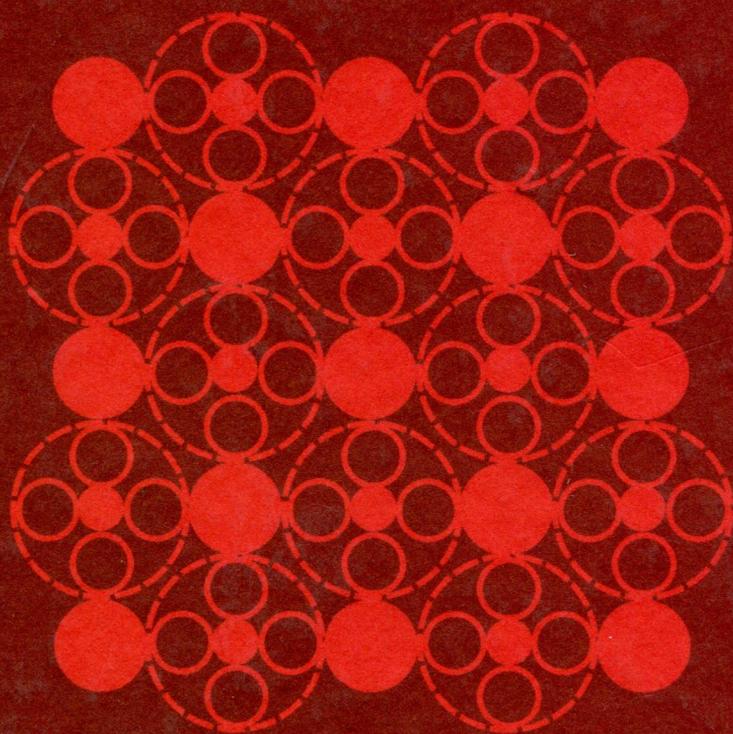


В. В. ЗУЕВ

**ОСТОВНО-ЭЛЕКТРОННАЯ
КРИСТАЛЛОХИМИЯ
И СВОЙСТВА
МИНЕРАЛОВ**



РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

ЗАО «Механобр инжиниринг»

В. В. ЗУЕВ

**ОСТОВНО-ЭЛЕКТРОННАЯ
КРИСТАЛЛОХИМИЯ
И СВОЙСТВА
МИНЕРАЛОВ**



Санкт-Петербург
«НАУКА»
2009

УДК 548; 549

ББК 26.31

339

Зуев В. В. Остовно-электронная кристаллохимия и свойства минералов. — СПб.: Наука, 2009 — 270 с.

ISBN 978-5-02-025345-2

В монографии впервые обоснован принципиально новый энергетический параметр кристаллического вещества — энергия сцепления атомных остовов и связующих электронов. Приведены формулы остовно-электронного строения и результаты расчетов соответствующих энергетических параметров для многих сотен минералов. На основе использования удельных форм энергии сцепления атомных остовов и связующих электронов предложены новые энергетические подходы к оценке физических свойств минералов (неорганических кристаллов) с выводом соответствующих формул. В Приложении помещены графики с данными энергетических коэффициентов разнообразных катионных и анионных атомных остовов, встречающихся в кристаллах, а также графики выявленных взаимосвязей между различными физическими свойствами кристаллов (минералов).

Книга рассчитана на весьма широкий круг специалистов в самых разнообразных научных областях, включая минералогию, кристаллохимию, геохимию, геофизику, физику и химию твердого тела, материаловедение и т. п.

Рецензенты:

вице-президент Российского минералогического общества,

академик РАН Н. П. ЮШКИН,

д-р геол.-минер. наук, академик РАЕН Н. З. ЕВЗИКОВА

ISBN 978-5-02-025345-2

© В. В. Зуев, 2009

© ЗАО «Механобр инжиниринг», 2009

© Издательство «Наука», 2009

ОГЛАВЛЕНИЕ

<i>Предисловие</i>	3
Введение	5
Глава 1. Взаимосвязь конституции и плотности минералов	8
1.1. Структурная плотность кристаллических решеток твердых тел	8
1.2. Вывод нового кристаллохимического уравнения плотности минералов	16
Глава 2. Остовно-электронное моделирование конституции и химической связи в кристаллических соединениях	26
2.1. Новый энергетический параметр стабильности кристаллического вещества W — энергия сцепления атомных остовов и связующих электронов, методы ее оценки	28
2.1.1. Оценка энергии сцепления атомных остовов и электридов в минералах по модифицированной формуле энергии ионной кристаллической решетки	33
2.1.2. Суммирование энергии образования атомных остовов из нейтральных атомов соединения и его энергия атомизации как основной метод оценки параметров W минералов	40
2.1.3. Использование модернизированной системы энергетических коэффициентов Ферсмана для оценки энергии остовно-электронного взаимодействия в минералах	66
2.2. Определение валентных состояний атомов в рамках остовно-электронной концепции строения минералов и других твердых тел	82
2.3. Кристаллоструктурный метод расчета ионности связей и эффективных зарядов атомов в минералах	109
2.3.1. Зависимость эффективных зарядов атомов от координационных чисел в кристаллических структурах минералов.	128
2.4. Остовно-электронное моделирование и проблема корректной идентификации структурного типа (мотива) минерала (на примере сенармонтита)	129
Глава 3. Реальные размеры атомов в минералах и способы их оценки	134
3.1. Оценка размеров атомов в минералах с использованием метода Р. Т. Сандерсона	138
3.2. Оценка размеров атомов в минералах в рамках остовно-электронного подхода	140
3.3. Оценка реальных радиусов атомов в кристаллах с использованием поляризационных представлений О. Джонсона	142
3.4. Оценка межатомной электронной плотности в минералах	145

3.5. Новый подход к оценке кристаллической (координационной) электроотрицательности атомов	149
3.6. Зависимость координационной электроотрицательности атомов от координации и спинового состояния	150
3.7. Взаимосвязь ионных и ковалентных радиусов атомов	158
Глава 4. Закономерная связь физических свойств минералов и других твердых кристаллических тел с их энергией сцепления атомных остовов и связующих электронов	164
Глава 5. Зависимость физических свойств минералов и других кристаллических веществ от электроотрицательности составляющих атомов	179
5.1 Электрические свойства и понятия металлических связей в гетероатомных минералах	194
Глава 6. Взаимосвязь энергии остовно-электронного взаимодействия в минералах и их генезиса	205
6.1. Некоторые генетические аспекты прикладного использования энергии остовно-электронного взаимодействия минералов	211
6.2. Место и роль гипергенного минералообразования в общей схеме дифференциации и эволюции вещества Земли.	211
Заключение	217
<i>Abstract</i>	221
Литература	223
<i>Приложение I. Универсальность энергетических коэффициентов атомных остовов в соединениях твердых тел и в растворах</i>	<i>230</i>
<i>Приложение II. Дополнительный материал по выводу широкого спектра энергетических коэффициентов разнозаряженных анионных и катионных атомных остовов</i>	<i>241</i>
<i>Приложение III. Некоторые полезные соотношения и зависимости между различными энергетическими параметрами и физическими свойствами кристаллов для возможности перевода одних в другие</i>	<i>251</i>