

В. В. ЗУЕВ

---

КОНСТИТУЦИЯ,  
СВОЙСТВА  
МИНЕРАЛОВ  
И  
СТРОЕНИЕ  
ЗЕМЛИ

(ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ)

---



**В. В. ЗУЕВ**

---

**КОНСТИТУЦИЯ,  
СВОЙСТВА МИНЕРАЛОВ  
И СТРОЕНИЕ ЗЕМЛИ**

**(ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ)**



**Санкт-Петербург  
«НАУКА»  
2005**

УДК 548.3+622.7+550.3

ББК 26

3 93

Рецензенты: академик РАН **Н. П. Юшкин**,  
вице-президент Российского минералогического общества,  
д-р геол.-минер. наук, проф. **Ю. Б. Марин**

**Зуев В. В. Конституция, свойства минералов и строение  
Земли (энергетические аспекты).** – СПб.: Наука, 2005.– 402 с.: ил.

ISBN 5-02-025080-5

В монографии дано дальнейшее развитие и энергетическое обоснование остовно-электронной концепции строения минералов (см. В. В. Зуев «Конституция и свойства минералов». Л.: Наука, 1990), в рамках которой рассмотрены основные проблемы кристаллохимии кристаллического вещества, включая валентные состояния, взаимодействие и взаимное влияние атомов, их эффективные заряды и размеры, распределение электронной плотности, энергетику межатомного взаимодействия и др.

Впервые предложен принципиально новый энергетический параметр кристаллического вещества – энергия сцепления атомных остовов и связующих электронов. Рассмотрены основные энергетические подходы к оценке физических свойств минералов (неорганических кристаллов), основанные на использовании: энергии кристаллической решетки, энергии сцепления атомов, энергии сцепления атомных остовов и связующих электронов, электроотрицательности, а также параметра структурной рыхлости. Выполнен анализ строения Земли с точки зрения энергетических характеристик вещества геосфер. Произведены расчеты энергии, выделившейся при гравитационной дифференциации первоначально однородного газо-пылевого протовещества Земли на три основных компонента: существенно железистую (внутреннее ядро), оксидно-железную (внешнее ядро) и силикатную (мантию и земную кору). Отдельно рассмотрены триботехнические свойства минералов, т. е. их использование в качестве эффективных твердосмазочных материалов. Специальный раздел посвящен рассмотрению возможности создания новых термостойких и сверхтвердых веществ, способных преодолеть по твердости алмаз.

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

*Книга издана при финансовой поддержке ООО «НЭСК»*

ISBN 5-02-025080-5

© Зуев В. В., 2005  
© ООО «НЭСК», 2005  
© Издательство «Наука», 2005

# Оглавление

Предисловие . . . . .	5
Введение . . . . .	8
Глава 1. <b>Некоторые современные представления о конституции и химической связи в кристаллах</b> . . . . .	12
1.1. Структурная плотность кристаллических решеток твердых тел . . . . .	12
1.2. Остовно-электронное моделирование конституции и химической связи в кристаллических соединениях . . . . .	20
1.2.1. Новый энергетический параметр стабильности кристаллического вещества – энергия сцепления атомных остовов и связующих электронов . . . . .	23
1.2.2. Определение валентных состояний атомов в рамках остовно-электронной концепции строения минералов и других твердых тел . . . . .	35
1.2.3. Кристаллоструктурный метод расчета ионности связей и эффективных зарядов атомов в минералах . . . . .	61
1.2.4. Зависимость эффективных зарядов атомов от координационных чисел в кристаллических структурах минералов . . . . .	76
1.3. О реальных размерах атомов в минералах и способах их оценки . . . . .	78
1.3.1. Оценка размеров атомов в минералах с использованием метода Р. Г. Сандерсона . . . . .	82
1.3.2. Оценка размеров атомов в рамках остовно-электронного подхода . . . . .	84
1.3.3. Оценка реальных радиусов атомов в кристаллах с использованием поляризационных представлений О. Джонсона . . . . .	86
1.3.4. Оценка межатомной электронной плотности в минералах . . . . .	89
1.3.5. Новый подход к оценке кристаллических (координационных) электроотрицательностей атомов . . . . .	94
1.3.6. Зависимость электроотрицательностей атомов от КЧ и спинового состояния . . . . .	96
1.3.7. Взаимосвязь ионных и ковалентных радиусов атомов . . . . .	102
1.4. Специфические особенности кристаллохимии (конституции) глубинных и поверхностных минералов . . . . .	108
Глава 2. <b>Современные энергетические подходы к оценке физико-химических свойств твердых тел</b> . . . . .	115
2.1. Зависимость физических свойств минералов и неорганических кристаллов от структурной рыхлости . . . . .	116
2.2. Зависимость физико-химических свойств кристаллических веществ от удельной энергии ионной кристаллической решетки . . . . .	129
2.2.1. Сложные и комплексные кристаллические соединения . . . . .	145
2.3. Закономерная связь физических свойств минералов и других твердых кристаллических тел с их энергией сцепления атомных остовов и связующих электронов . . . . .	152
2.4. Физико-химические свойства минералов и других твердых тел как функции их энергоплотности и удельной массовой энергии атомизации . . . . .	168
	397

2.4.1. Энергоплотность и генезис минералов . . . . .	188
2.4.2. Некоторые генетические аспекты прикладного использования энергоплотности . . . . .	195
2.4.3. Место и роль гипергенного минералообразования в общей схеме дифференциации и эволюции вещества Земли . . . . .	197
2.5. Сравнительная характеристика и рекомендации по использованию 4-х энергетических подходов к оценке свойств кристаллов . . . . .	202
2.6. Зависимость физических свойств минералов и других кристаллических веществ от электроотрицательности составляющих атомов . . . . .	205
<b>Глава 3. Строение Земли с точки зрения энергетических характеристик вещества составляющих геосфер . . . . .</b>	<b>227</b>
3.1. Удельные энергии атомизации вещества атмосферы, гидросферы, земной коры и мантии . . . . .	227
3.2. Удельные энергии атомизации вещества мантии . . . . .	232
3.3. Природа и свойства вещества внешнего ядра Земли . . . . .	233
3.4. Природа и свойства вещества внутреннего ядра Земли . . . . .	238
3.4.1. Кристаллохимическое обоснование модификации $\alpha$ -Fe(VIII) как основной компоненты внутреннего ядра Земли . . . . .	245
3.4.2. Схема химической связи для $\alpha$ -Fe. Сравнительная характеристика обычного и «ядерного» железа . . . . .	247
3.5. Общая схема строения Земли с точки зрения энергетических характеристик вещества составляющих геосфер. Критика гипотезы строения Земли по А. Ф. Капустинскому . . . . .	251
3.6. Расчет энергии образования ядра и оболочечной структуры Земли (к основам энергетической геохимии) . . . . .	258
3.7. Энергия атомизации вещества планет и спутников Солнечной системы . . . . .	264
3.8. О некоторых энергетических аспектах проблемы возникновения и развития биосферы на Земле . . . . .	267
<b>Глава 4. Геоэнергетические основы использования минералов в качестве модификаторов трения . . . . .</b>	<b>273</b>
4.1. Некоторые экспериментальные данные по применению минеральных модификаторов трения и их интерпретация . . . . .	273
4.2. Кристаллохимические предпосылки использования минеральных модификаторов трения . . . . .	277
4.3. Энергоплотность, триботехнические свойства ММТ и основные критерии их оценки . . . . .	280
<b>Глава 5. Проблема создания новых перспективных сверхтвердых и термостойких веществ (СТТСВ) (теоретические аспекты) . . . . .</b>	<b>287</b>
5.1. Зависимость энергии гомоатомных ковалентных связей от электроотрицательности атомов . . . . .	289
5.2. Энергетические и кристаллохимические предпосылки (критерии) создания новых СТТСВ . . . . .	300
5.3. Примеры кристаллических соединений, рекомендуемых к синтезу в качестве новых СТТСВ . . . . .	316
5.3.1. Гипотетические модификации кристалла $\text{CO}_2$ ( $KЧ=4/2$ ) и их предполагаемые свойства . . . . .	317

5.3.2. Кристаллическое соединение $C_3N_4$ (КЧ=4/3) и его предполагаемые свойства . . . . .	321
5.3.3. Соединения структурного типа алмаза (КЧ=4) . . . . .	324
5.3.4. Гомеоатомные и гетероатомные соединения структурного типа хлористого натрия (КЧ=6) и их предполагаемые свойства . . . . .	325
5.3.5. Гомеоатомные ковалентные соединения структурного типа $\alpha$ -Fe(VIII) (КЧ=8) и их предполагаемые свойства . . . . .	326
5.3.6. Соединения структурного типа флюорита (КЧ=8/4) и их предполагаемые свойства . . . . .	327
5.3.7. Соединения структурных типов рутила $TiO_2$ и молибденита $MoS_2$ (КЧ=6/3) и их предполагаемые свойства . . . . .	332
5.3.8. Соединения структурных типов корунда и пирита (КЧ=6/4) и их предполагаемые свойства . . . . .	334
5.3.9. Соединения структурных типов баделита $ZrO_2$ (КЧ=7/4/3), кристалла $La_2O_3$ (КЧ=7/6/4) и их предполагаемые свойства . . . . .	337
5.3.10. Соединения структурного типа котуннита $PbCl_2$ (КЧ=9/5/4), кристалла $M_2X_3$ (КЧ=9/6) и их предполагаемые свойства . . . . .	339
5.3.11 Соединения структурного типа шселита (циркона) $ABX_4$ (КЧ=8/4/3) и шпинели $A_2BX_4$ (6/4/4) и их предполагаемые свойства . . . . .	341
5.3.12. Соединения структурного типа граната (КЧ = 8/6/4/4) и их предполагаемые свойства . . . . .	342
5.4. Обсуждение вероятных условий (параметров) температуры и давления, требуемых для искусственного получения новых СТТСВ . . . . .	343
<b>Заключение . . . . .</b>	<b>350</b>
<b>Приложение I . . . . .</b>	<b>353</b>
<b>Приложение II . . . . .</b>	<b>369</b>
<b>Abstract . . . . .</b>	<b>385</b>
<b>Список использованной литературы . . . . .</b>	<b>387</b>