

1. ОБРАЗОВАНИЕ КРИСТАЛЛОВ

1.1. Термодинамические характеристики

Свободная энергия. Кристаллизация минералов происходит в результате сближения атомов химических элементов. Атомы занимают строго определенные пространственные позиции друг относительно друга, на определенных для каждого минерала межатомных расстояниях. Устойчивость атомов в этих позициях зависит от характера их химического взаимодействия друг с другом. Мерой устойчивости служит доля энергии, которая необходима для разрыва химических связей между атомами. Внешнее воздействие на минерал приводит к различным результатам в зависимости от вида воздействия и его энергии. Механическим воздействием можно расколоть кристалл на мельчайшие частицы, каждая из которых сохранит кристаллическую структуру. При нагревании до температуры плавления или возгонки минерал разрушается полностью, его кристаллическая структура распадается. Мощное ионизирующее излучение способно разрывать химические связи в кристалле и смещать атомы относительно их регулярных положений, в результате чего образуются дефекты. При большой концентрации дефектов кристаллическая структура разрушается и возникает аморфное метамиктное состояние. Таким образом, образование минералов сопровождается высвобождением энергии, а их разрушение – поглощением, при сохранении ее в системе в целом.

В физике минералов энергетические представления играют ведущую роль при рассмотрении реального строения минералов и природы их свойств на атомарном уровне. При взаимодействии атомов в результате их сближения происходит изменение энергетического состояния каждого атома и системы в целом. Характер этого взаимодействия целиком определяется электронной структурой взаимодействующих атомов и условиями, в которых оно происходит. Каждый свободный атом и система свободных невзаимодействующих атомов характеризуются определенным исходным энергетическим состоянием, которое принимается за нулевое. Взаимодействие между атомами с образованием упорядоченной системы атомов (молекул, кристаллов) осуществимо лишь в случае, если энергия конечного состояния окажется ниже энергии исходного состояния в результате высвобождения свободной энергии, которая называется энергией Гиббса G и имеет отрицательное значение. Чем больше ее абсолютная величина, тем прочнее химическая связь и устойчивее конкретное состояние минерала.

Энергетическое состояние кристалла описывается термодинамическими функциями: энтальпией H , энергией Гиббса G , энтропией S . Важнейшей энергетической характеристикой является теплосодержание или энтальпия H , величина которой возрастает с ростом температуры T

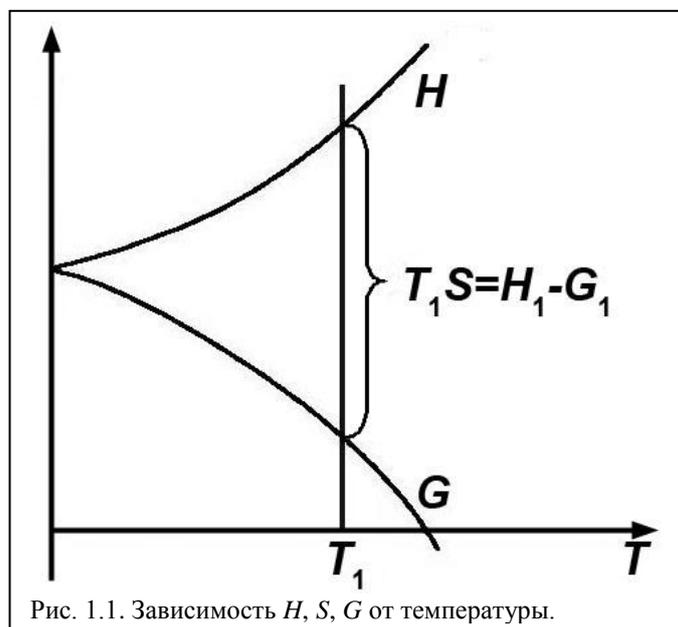
$$H = H_0 + \int c_p dT ,$$

где T – абсолютная температура, H_0 – энтальпия при некоторой исходной температуре T_0 , c_p – теплоемкость при постоянном давлении. Определение абсолютных величин энтальпии и свободной энергии невозможно (т.к. нет точки отсчета), поэтому пользуются их приращениями, между которыми существует следующее соотношение:

$$\Delta H = \Delta G + T\Delta S .$$

Энтропия S является энергетической мерой теплового разупорядочения и беспорядка. Качественное соотношение между энтропией, энтальпией и свободной энергией проиллюстрировано на рис 1.1.

При термодинамическом описании химического взаимодействия атомов, образующих кристаллическую структуру, используются понятия внутренней потенциальной и кинетической энергий. Одним из главных источников потенциальной



энергии является кулоновское взаимодействие – притяжение разноименно заряженных атомных частиц и отталкивание одноименных зарядов. Кинетическая энергия в физике минералов рассматривается как энергия теплового колебания и движения атомов в кристаллическом поле.

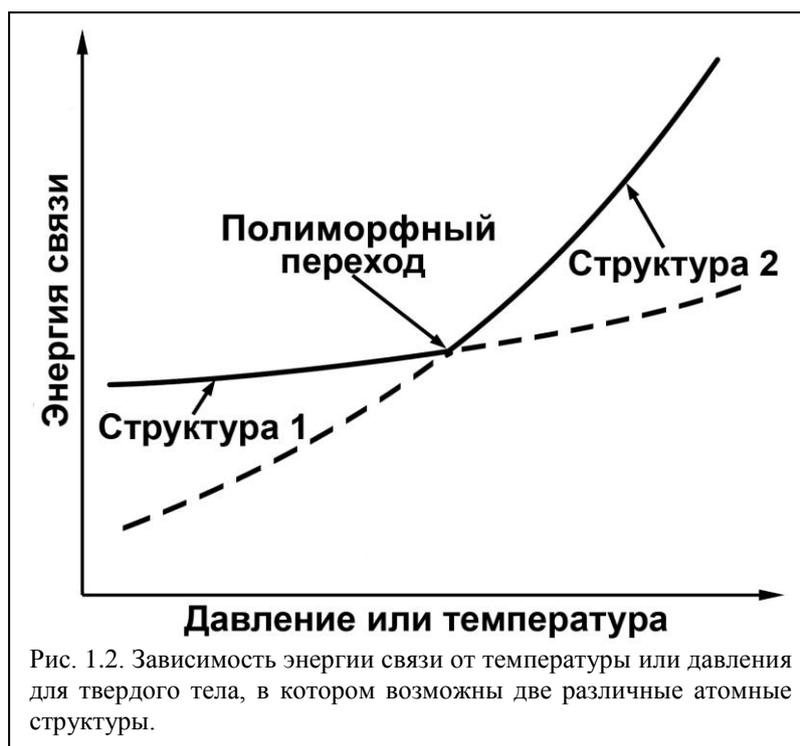
1.2. Межатомные связи

Все механизмы связи между атомами обусловлены силами электрического притяжения и отталкивания. Типы и силы связи зависят от конкретного строения электронных оболочек взаимодействующих атомов. Между близко расположенными нейтральными атомами всегда существует небольшое притяжение, обусловленное слабыми вандерваальсовыми (или остаточными) связями, но его влиянием можно пренебречь, если одновременно существуют ионная, ковалентная, металлическая или водородная связи.

Наличие стабильной связи между парой изолированных атомов или между атомами в большом трехмерном кристалле предполагает, что данная пространственная конфигурация из положительно заряженных ионных остовов и внешних электронов обладает меньшей полной энергией, чем любая другая конфигурация (в том числе и та, в которой все атомы разнесены на бесконечно большие расстояния). Разность потенциальных энергий системы изолированных атомов и связанной системы за вычетом кинетической энергии атомов называется энергией связи. Величина энергии связи варьирует от 0.1 эВ/атом в твердых телах со слабым вандерваальсовым взаимодействием до 7 эВ/атом и более в некоторых ковалентных и ионных соединениях, а также в некоторых металлах. Электронвольт (эВ) является внесистемной единицей измерения энергии, характеризующей отдельный атом или ион. Соотношение с другими единицами приведено в приложении.

Энергия связи зависит не только от конкретного электронного строения атомов, но и от внешних параметров, таких как температура и давление. У некоторых твердых тел одинакового состава, но обладающих разной структурой, эти зависимости пересекаются (рис. 1.2). В таких твердых телах можно добиться изменением

температуры или давления превращения одной структуры в другую, так как любая



система стремится занять энергетически наиболее выгодное положение. Такое превращение структуры твердого тела называется полиморфным переходом. В качестве примеров можно привести кальцит и арагонит, пирит и марказит, рутил и анатаз.

1.3. Вандерваальсово взаимодействие

Вандерваальсово взаимодействие всегда существует между близко расположенными атомами, но играет важную роль лишь в отсутствие более сильных механизмов связи. Это слабое взаимодействие (с характерной энергией 0.2 эВ/атом) возникает между нейтральными атомами и между молекулами. Название взаимодействия связано с именем нидерландского физика Я.Д.Ван-дер-Ваальса, который первым предположил, что уравнение состояния газа с учетом слабого притяжения между молекулами описывает свойства реальных газов точнее, чем уравнение состояния идеального газа. Однако природа этой универсальной силы притяжения была объяснена лишь в 1930 г., когда данной проблемой заинтересовался немецкий физик Ф.Лондон. Лондон заметил, что, хотя постоянный электрический дипольный момент нейтральных атомов, как и многих молекул, равен нулю, эти атомы и молекулы притягиваются друг к другу электрическими силами. Он указал на то, что нулевые колебания, существующие в силу принципа неопределенности, создают у каждого нейтрального атома флуктуирующий дипольный момент с быстро меняющейся ориентацией и амплитудой. Поле, индуцируемое диполем, убывает пропорционально кубу расстояния. Таким образом, если ядра двух атомов находятся на расстоянии r друг от друга, диполь одного из атомов в каждый момент времени создает в точке, где находится другой диполь, мгновенное поле, пропорциональное $\frac{1}{r^3}$. При этом потенциальная энергия взаимодействия между диполями, приводящая к притяжению, равна:

$$E_{\text{притяж}} = \frac{A}{r^6}, \quad (1.1)$$

где A – эмпирическая константа.

Квантовомеханический расчет энергии этого диполь-дипольного взаимодействия показывает, что если бы можно было уменьшить r до 1 \AA , то энергия притяжения достигла бы 10 эВ . Однако отталкивание, обусловленное перекрытием электронных оболочек, не позволяет сблизить атомы на столь малое расстояние. Также, наряду с межэлектронным отталкиванием, сближению атомов препятствуют силы межъядерного взаимодействия.

Зависимость энергии отталкивания от расстояния между атомами можно описать либо степенным законом (для этого необходима сильная зависимость порядка $r^{-11} \div r^{-12}$), либо с помощью характерной длины ρ , значение которой подбирается опытным путем. Используя последний, обычно наиболее удобный способ, полную энергию можно записать в виде:

$$E = -\frac{A}{r^6} + B \exp\left(-\frac{r}{\rho}\right), \quad (1.2)$$

где B – эмпирическая константа.



Зависимость энергии взаимодействия E от межатомного расстояния r изображена на рис. 1.3 сплошной кривой. Энергия образующейся связи и равновесное расстояние r_0 между связанными атомами определяются параметрами A , B и ρ . Поскольку характерная длина ρ мала по сравнению с межатомным расстоянием, в равновесной конфигурации, отвечающей минимуму энергии E , член, соответствующий отталкиванию, вносит весьма малый вклад в энергию связи.

Выше рассматривалось вандерваальсово взаимодействие между парой изолированных от окружения атомов. В трехмерных телах эффекты диполь-дипольного

притяжения и отталкивания, обусловленного перекрытием электронных оболочек различных соседних атомов, складываются, так что полная энергия связи по-прежнему определяется выражением (1.2). Поскольку ограничения на направления связей отсутствуют, то твердые тела, в которых связи обусловлены лишь силами Ван-дер-Ваальса, стремятся образовать плотноупакованные кристаллические структуры с максимально возможным числом ближайших соседей у каждого атома. Таковы, например, кристаллы инертных газов Ne, Ar, Kr и Xe. Все они имеют гранцентрированную кубическую решетку, в которой каждый атом окружен двенадцатью ближайшими соседями. Из-за того, что вандерваальсово притяжение быстро уменьшается с увеличением расстояния, все остальные атомы, кроме ближайших соседей, оказывают несущественное влияние на формирование кристаллической структуры.

Кристаллы инертных газов являются прекрасными примерами твердых тел, в которых связи обусловлены исключительно силами Ван-дер-Ваальса, поскольку для конфигураций с полностью заполненными электронными оболочками исключается возможность существования других, более сильных механизмов связи. Однако значительно чаще встречаются кристаллы, в которых силы Ван-дер-Ваальса связывают между собой молекулы с насыщенными связями, в то время как внутри молекул действуют более сильные механизмы связи. Таковы, например, кристаллы многих насыщенных органических соединений, а также твердые H_2 , N_2 , O_2 , P_2 , Cl_2 , Br_2 и I_2 . На примере Cl_2 , энергия возгонки которого составляет 0.2 эВ на молекулу, а энергия диссоциации – 2.5 эВ на молекулу, видно, что связи Ван-дер-Ваальса между двухатомными молекулами разрываются гораздо легче, чем ковалентная связь Cl – Cl. Среди минералов этот тип связи реализуется в кристаллах серы с молекулой S_8 , в реальгаре As_4S_4 .

1.4. Ковалентная связь

Ковалентная связь, которую иногда называют валентной или гомеоплярной, образуется за счет двух электронов с противоположно направленными спинами в условиях, когда эти электроны обобществлены парой соседних атомов. За счет такого обобществления в области между двумя атомами возникает высокая плотность электронного заряда. Понятие ковалентной связи было введено Ирвингом Ленгмюром в 1919 г., однако теоретическое обоснование она получила только в 1927 г. в работах Ф. Лондона и В.Гайтлера. Их работы заложили основы теории молекулярных орбиталей, которая является более общей и описывает, в том числе, и ковалентную связь. Простая ковалентная связь может быть неполярной и полярной. неполярная ковалентная связь возникает, если атомы, ее образующие, одинаковы. Самыми простыми веществами с неполярной ковалентной связью являются молекулы H_2 , O_2 , N_2 . В этом случае обобществленная электронная пара находится посередине между атомами.

Если ковалентная связь образуется между разными атомами, то положение электронной пары зависит от электроотрицательности атомов. Атом с большей электроотрицательностью сильнее притягивает к себе пару электронов связи, и его истинный заряд становится отрицательным. Атом с меньшей электроотрицательностью приобретает, соответственно, такой же по величине положительный заряд. Принято говорить о поляризации связи, а сама связь называется полярной ковалентной связью. Например, и в графите и в кварце связи ковалентные. Однако, в графите обобществленные электроны равное время находятся у атомов углерода, а в кварце большую часть времени они находятся около атомов кислорода и меньшую у кремния. Это характерно для большинства анионных радикалов типа SiO_4 , SO_4 , PO_4 и др.

Каждый атом может образовывать ограниченное число ковалентных связей, зависящее от того, насколько число внешних электронов отличается от необходимого для полного заполнения электронной оболочки. Кроме того, имеются явно выраженные преимущественные направления связей. Так, углерод может образовывать четыре связи, направленные из центра тетраэдра к его вершинам под углами 109.5° . Тетраэдрические полиэдры наблюдаются во многих минералах и органических соединениях. Другие примеры характерных углов между соседними ковалентными связями – это угол 105° в пластической сере и 102.6° в теллуре.

Квантовомеханическая задача об образовании ковалентных связей значительно усложняется при переходе к многоэлектронным атомам, однако качественно картина остается той же, что и для связи Н–Н. Во всех случаях сближение атомов ограничивается кулоновским отталкиванием ядер, а в более тяжелых атомах добавляется еще и отталкивание за счет перекрытия заполненных внутренних электронных оболочек.

К веществам с ковалентной связью относятся:

- большинство органических соединений;
- твердые и жидкие вещества, у которых связи образуются между парами атомов галогенов (а также между парами атомов водорода, азота и кислорода);
- элементы IV группы (такие, как алмаз, кремний, германий, α -олово);
- элементы V группы (например, деформированные шестиугольники мышьяка);
- элементы VI группы (например, спиральные цепочки теллура);
- соединения, подчиняющиеся правилу $8-N$ (где N – номер группы в таблице Менделеева), когда образующие их элементы расположены не слишком далеко друг от друга по горизонтали в периодической таблице Менделеева (например, InSb, GaP, ZnS, CdS, CdSe).

Нередко в процессе кристаллизации твердых тел с ковалентной связью могут образовываться различные кристаллические структуры одинакового состава, если в условиях кристаллизации энергии связи примерно равны. Изменением температуры или давления можно заменить одну структуру на другую, энергетически наиболее выгодную при данных T и P . Эта способность некоторых веществ легко менять структуру называется аллотропией или полиморфизмом. Например, полиморфизмом обладает структура ZnS, которая может быть и кубической (цинковая обманка или сфалерит), и гексагональной (вюрцит). Расположение ближайших соседей в сфалерите и вюрците одинаково, а небольшое различие в энергиях этих двух структур определяется расположением атомов, следующих за ближайшими. Карбид кремния имеет целый ряд «политипов» с различной структурой, как кубической, так и гексагональной со слабо различающимися электронными свойствами. Все многочисленные кристаллические модификации ZnS и SiC могут существовать при комнатной температуре без особого риска спонтанного перехода в энергетически наиболее выгодное состояние (условия, при которых образуются эти различные кристаллические формы, можно определить при низких температурах). Однако в других веществах спонтанные переходы происходят довольно легко. Например, при быстром охлаждении от точки плавления (218°C) до комнатной температуры селен оказывается аморфным, но нагревание до температуры $60-70^\circ\text{C}$ приводит к его кристаллизации, и при последующем охлаждении до комнатной температуры он остается кристаллическим.

1.5. Структуры со смешанными ковалентными и вандерваальсовыми связями

Как было отмечено выше, сочетание ковалентного и вандерваальсова механизмов связи обычно встречается в таких веществах, как твердый водород, кристаллы инертных газов, молекулы галогенов, у которых за счет ковалентного взаимодействия каждая пара атомов связывается в молекулу, а вандерваальсовы связи создают «молекулярный кристалл». Этот же принцип справедлив и для большинства органических кристаллов. В графите атомы углерода в каждом слое расположены в вершинах правильных шестиугольников так, что каждый атом связан с тремя ближайшими соседями. Связь осуществляется тремя гибридными sp^2 -орбиталями. Расстояние между слоями довольно велико, поскольку притяжение между ними осуществляется только за счет вандерваальсова взаимодействия. Таким образом, слои могут легко скользить друг относительно друга, что позволяет использовать графит как «твердую смазку». Подобный принцип построения структуры справедлив и для MoS_2 .

1.6. Ионная связь

Ионный кристалл состоит из положительных и отрицательных ионов, расположенных так, что кулоновское отталкивание одноименно заряженных ионов оказывается меньше кулоновского притяжения ионов с противоположными зарядами. Типичными представителями класса ионных кристаллов являются галогениды щелочных металлов, такие как $NaCl$, который кристаллизуется в виде Na^+Cl^- . Поскольку потенциал ионизации щелочного металла невелик, электрон от Na практически переходит к Cl . Когда ионы Na^+ и Cl^- приближены друг к другу в отсутствие каких-либо других атомов, энергия их кулоновского притяжения при межъядерном расстоянии r_0 равна

$$E_{кул} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_0}, \quad (1.3)$$

где ϵ_0 – диэлектрическая проницаемость вакуума. В формуле (1.3) предполагается, что распределение электронного заряда в заполненной электронной оболочке сферически симметрично. Благодаря отталкиванию, возникающему вследствие принципа Паули при перекрытии заполненных оболочек аниона и катиона, расстояние, на которое могут сблизиться ионы, ограничено. Выше, при рассмотрении вандерваальсовых взаимодействий, было отмечено, что энергия отталкивания быстро изменяется с изменением межъядерного расстояния, и ее можно записать в виде любого из двух следующих приближенных выражений:

$$E_{omm} = A/r^n (n \approx 12) \quad (1.4)$$

или

$$E_{omm} = B \exp(-r/\rho), \quad (1.5)$$

где A и B – эмпирические константы. Однако ни одно из этих выражений не соответствует сложному квантовомеханическому процессу, который приводит к отталкиванию.

Из выражения (1.5), дающего представление об изменении энергии отталкивания с изменением межъядерного расстояния, очевидно, что устойчивой будет связь с таким расстоянием между ионами Na^+ и Cl^- , при котором энергия

$$E = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + B \exp(-r/\rho) \quad (1.6)$$

минимальна. График этой зависимости аналогичен представленному на рис. 1.3. Отличие заключается в том, что сила кулоновского притяжения убывает с увеличением

расстояния между атомами медленнее, чем вандерваальсовы силы, но характер зависимости остается прежний. Поскольку в формуле (1.6) член, соответствующий отталкиванию, изменяется с изменением r значительно более существенно, чем кулоновский, энергия связи оказывается лишь немного меньше $\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_0}$. В то же время

возвращающие силы, действующие на атом при r , меньшем r_0 , определяются в основном величинами B и ρ .

Энергетически наиболее выгодная структура кристалла зависит от соотношения между радиусами аниона и катиона. В случае, когда это соотношение допускает контакт аниона с анионом, структура заменяется на другую ионную структуру. Простые геометрические вычисления позволяют рассчитать r_k/r_a для типичных структур. На рис. 1.4 а представлена треугольная координация катиона (КЧ = 3). Из рисунка легко получить минимальное значение r_k/r_a :

$$\begin{aligned} h^2 &= (2r_a)^2 - r_a^2 = 3r_a^2 \\ h &= r_a\sqrt{3} \\ (r_a + r_k)^2 &= \left(\frac{1}{3}h\right)^2 + r_a^2 = \frac{1}{3}r_a^2 + r_a^2 \\ r_a + r_k &= \frac{2r_a}{\sqrt{3}}, r_k = r_a\left(\frac{2}{\sqrt{3}} - 1\right) \\ r_k/r_a &= 0.15 \end{aligned}$$

Эта структура будет сохраняться при больших значениях отношения r_k/r_a , но до тех пор, пока не появится возможность расположить вокруг катиона четыре аниона, т.е. возникнет тетраэдрическая координация (КЧ = 4, структура сфалерита, рис. 1.4 б), для которой получается:

$$\begin{aligned} r_a &= a\sqrt{2}, r_a + r_k = \frac{a\sqrt{3}}{2} \\ (r_a + r_k)/r_a &= \sqrt{3}/\sqrt{2} \\ r_k/r_a &= 0.225 \end{aligned}$$

где a – ребро полиэдра.

Тетраэдрическая координация будет существовать пока отношение r_k/r_a не достигнет значения, соответствующего октаэдру (КЧ=6, структура NaCl, рис. 1.4 в):

$$\begin{aligned} r_a &= a/2, r_a + r_k = \frac{a\sqrt{2}}{2} \\ r_k/r_a &= 0.414 \end{aligned}$$

Для куба (КЧ=8, структура CsCl, рис. 1.4 г):

$$\begin{aligned} r_a &= a/2, r_a + r_k = \frac{a\sqrt{3}}{2} \\ r_k/r_a &= 0.732 \end{aligned}$$

Для плотноупакованной структуры (КЧ=12, кубооктаэдр):

$$r_k/r_a = 1$$

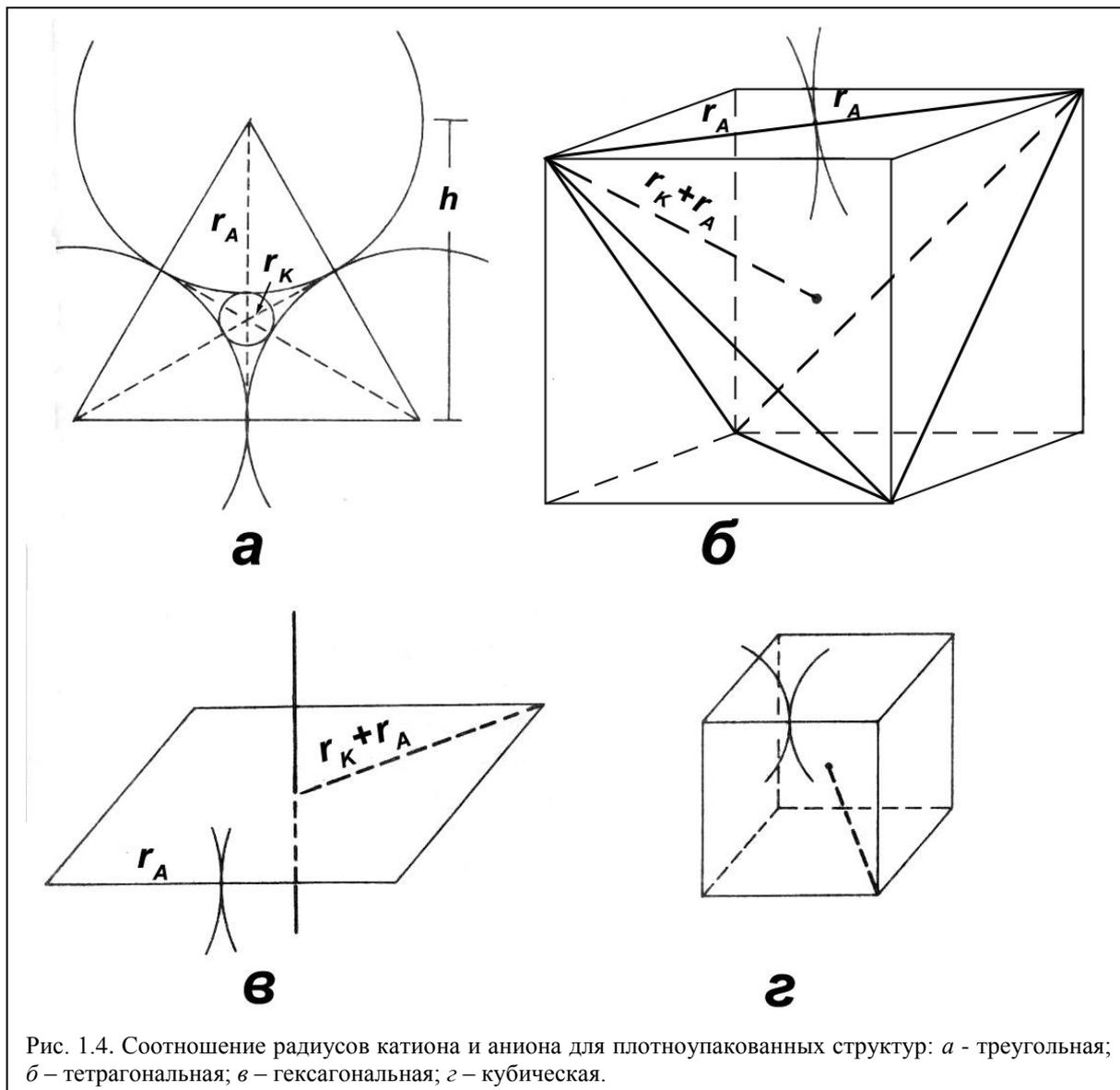
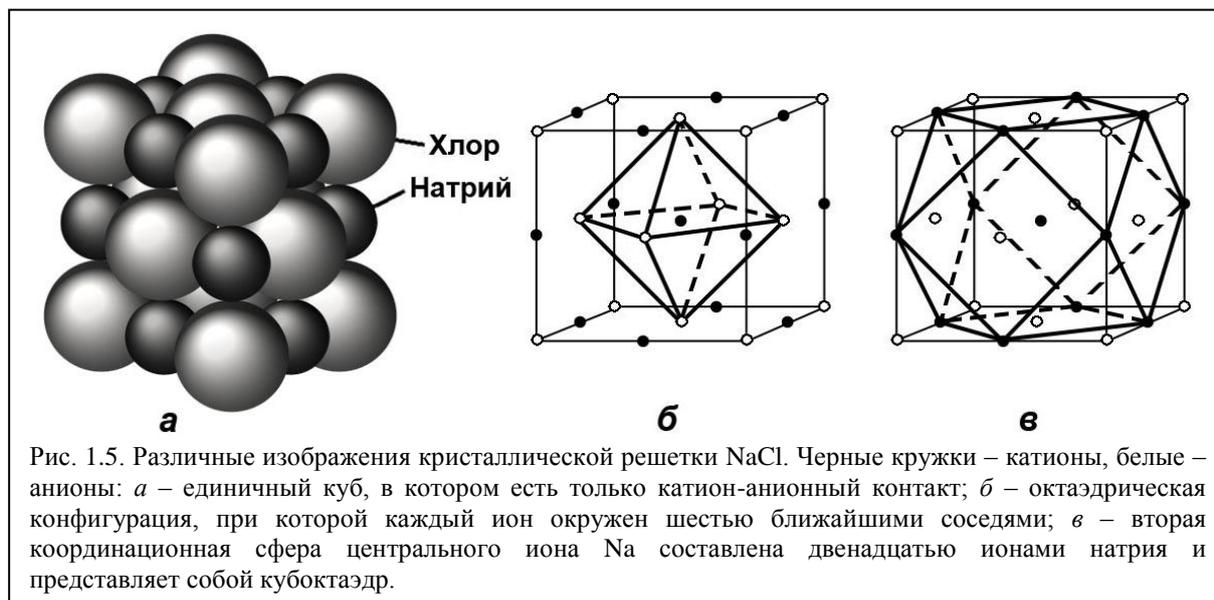


Рис. 1.4. Соотношение радиусов катиона и аниона для плотноупакованных структур: *a* - треугольная; *б* - тетрагональная; *в* - гексагональная; *г* - кубическая.

Данные правила образования структуры кристаллов позволяет оценить энергию решетки кристалла. Для примера можно рассмотреть структуру NaCl (рис. 1.5). Следует учесть, что в кристалле NaCl взаимодействие с ближайшими соседями состоит из кулоновского притяжения и отталкивания, обусловленного перекрытием электронных оболочек. Ни катионы, ни даже гораздо большего размера анионы между собой не соприкасаются. Таким образом, взаимодействие иона со своими соседями, кроме ближайших, является исключительно кулоновским. Поскольку у кристалла энергия связи должна быть положительной, сумма всех слагаемых (как положительных, так и отрицательных), обусловленных кулоновским взаимодействием, должна с избытком компенсировать энергию отталкивания, обусловленную перекрытием волновых функций данного атома и его шести ближайших соседей. Положительность энергии связи означает, что энергия E меньше, чем у бесконечно удаленных ионов.

В структуре NaCl катион натрия окружен шестью ближайшими соседями хлора на расстоянии r_0 (рис. 1.5 б), двенадцатью следующими за ближайшими соседями катионами Na^+ (рис. 1.5 в) на расстоянии $\sqrt{2}r_0$, восемь следующими за ними

анионами Cl^- на расстоянии $\sqrt{3}r_0$ и т.д. Таким образом, полная энергия кулоновского притяжения, приходящаяся на одну ионную пару, равна сумме бесконечного ряда



$$E_{\text{кул}} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_0} \left\{ 6 - \frac{12}{\sqrt{2}} + \frac{8}{\sqrt{3}} - \dots \right\} = -1.748 \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_0} = -\alpha \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_0}. \quad (1.7)$$

Множитель α называется постоянной Маделунга, и его величина для каждой решетки зависит от ее геометрии. Для решетки NaCl $\alpha = 1.748$, для решетки сфалерита $\alpha = 1.638$, а для структуры типа CsCl $\alpha = 1.763$.

Применив выражение (1.7) можно оценить энергию решетки кристалла следующим образом:

$$U = N_A (E_{\text{кул}} + E_{\text{омм}}) = N_A \left(-\alpha \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_0} + \frac{A}{r_0^n} \right),$$

где N_A – число Авогадро, U – энергия решетки одного грамм-моля вещества. Параметр n оценивают из сжимаемости и он имеет значение порядка 9-12. Константа A определяется из условия минимума энергии E , что соответствует устойчивому состоянию кристалла. В результате получается следующее выражение:

$$U = N_A (E_{\text{кул}} + E_{\text{омм}}) = -N_A \alpha \frac{z_1 z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 r_0} \left(1 + \frac{1}{n} \right),$$

где N_A – число Авогадро, z_1 и z_2 – заряды ионов. Для NaCl расчетные и измеренные величины совпали – 184 ккал/моль, для KCl расчетная величина – 168 ккал/моль, а измеренная – 167 ккал/моль. Для FeO эти величины несколько отличаются – расчетная равна 907 ккал/моль, а измеренная – 938 ккал/моль.

В заключение этого раздела следует сказать, что рассмотренные типы химической связи являются в значительной степени модельными. Единой теории химической связи пока не существует, в первую очередь, из-за необходимости учета различных взаимодействий между большим числом частиц в твердом теле. Наиболее успешно используется теория молекулярных орбиталей, но она применима, в основном, для описания ковалентных и ионных соединений.

Выделенные типы связи отличаются силой или энергией связи. Наиболее слабым является вандерваальсово взаимодействие, энергия связи составляет 10-20

кДж/моль (0.1-0.2 эВ/атом). Более прочной является водородная связь – до ста кДж/моль. Промежуточное положение по энергии связи занимают соединения с металлической и ионной связью. Максимальная энергия связи характерна для ковалентных соединений, в которых она может достигать тысячи кДж/моль. Эти оценки носят очень приближенный характер, так как энергия связи зависит от многих параметров конкретных соединений – степени ионности связи, размера ионов, расстояния между ионами, атомного номера и др. В реальных кристаллах всегда есть все типы взаимодействий – от вандерваальсова до ионного (электростатического). В зависимости от силы тех или иных взаимодействий другими, более слабыми, чаще всего пренебрегают.

Контрольные вопросы

1. Почему свободная энергия Гиббса отрицательна?
2. Какой тип структуры характерен для «вандерваальсовых» кристаллов?
3. Какой тип структуры характерен для простых «ионных» кристаллов?
4. Какое взаимодействие является более дальнедействующим – вандерваальсово или кулоновское?
5. Какими эмпирическими зависимостями описывается энергия отталкивания между атомами или ионами в кристалле?
6. Зависит ли постоянная Маделунга от силы связи между атомами?
7. Чем определяется тип структуры простых ионных соединений?