

ра плавления $T_{\text{пп}}$, характеризующая силу связи атомных частиц в Т. т., различна: у молекулярного водорода $T_{\text{пп}} = -259,1$ С, у вольфрама 3410 ± 20 С, а у графита более 4000 С (см. *Межатомное взаимодействие. Межмолекулярное взаимодействие*). Твёрдый ^3He составляет исключение: он плавится под давлением при понижении темп-ры (см. *Номеранчука эффект*).

Изменяя ср. расстояние между атомами с помощью внеш. давления, можно существенно изменить величину межатомных сил и благодаря этому — кристаллич. структуру Т. т. При больших давлениях обнаружено большое число разл. кристаллич. модификаций. Mn. полупроводники под давлением переходят в металлич. состояние (Ge при давлении 120 000 атм становится металлом), а Y под давлением превращается в полупроводник. Есть основания считать, что молекулярный водород под давлением в $2-3 \cdot 10^6$ атм превращается в металл (см. *Металлический водород*). При чрезвычайно большом давлении (или плотности), когда объём, приходящийся на один атом, меньше обычного атомного размера, атомы теряют свою индивидуальность и вещество превращается в сильно сжатую электронно-ядерную плазму. Исследование такого состояния вещества важно, в частности, для понимания структуры звёзд.

Изменения структуры и свойств Т. т. (*фазовые переходы*) происходят также при изменении темп-ры, под действием магн. полей и др. внеш. воздействий (см. также *Структурные фазовые переходы*).

По типам связи между частицами и энергией связи между ними Т. т. делятся на 5 типов, каждый из к-ых характеризуется определ. пространственным распределением электронов. 1) В ионных кристаллах (NaCl, KCl и др.) осн. силы притяжения, действующие между ионами, — электростатические. 2) В кристаллах с ковалентной связью (алмаз, Ge, Si) валентные электроны соседних атомов обобществлены, кристалл представляет собой как бы огромную молекулу. 3) У большинства металлов энергию связи обуславливает коллективное взаимодействие подвижных электронов с ионным остовом (*металлическая связь*). У некоторых металлов (напр., у переходных) важна также ковалентная связь, осуществляемая электронами незаполненных внутр. оболочек. 4) В молекулярных кристаллах молекулы связаны слабыми силами Ван-дер-Ваальса (см. *Межмолекулярное взаимодействие*), обусловленными динамич. поляризацией молекул. 5) В кристаллах с водородными связями каждый атом водорода связан силами притяжения одновременно с двумя др. атомами. Водородная связь вместе с электростатич. притяжением дипольных моментов молекул воды определяет свойства воды и льда. Классификация по типам связи условна, во мн. случаях наблюдается сочетание разл. типов связи (см. *Кристаллохимия. Химическая связь*).

Хотя силы, действующие между атомными частицами в Т. т., весьма разнообразны, их источником служат электростатич. притяжение и отталкивание. Образование из атомов и молекул устойчивых Т. т. показывает, что силы притяжения на расстояниях $\sim 10^{-8}$ см уравновешиваются силами отталкивания (они имеют квантовомеханич. природу и быстро спадают с расстоянием, т. к. определяются перекрытием волновых ф-ций электронов, принадлежащих отд. атомам). В ряде случаев можно рассматривать атомные частицы как твёрдые шары и характеризовать их кристаллохимическими радиусами (см. *Атомный радиус*).

Знание сил взаимодействия даёт возможность вывести ур-ние состояния Т. т. — зависимость уд. объёма от давления, позволяющую связать экспериментально измеряемые величины (напр., скимаемость) с величинами, определяющими силы, действующие между частицами.

Механические свойства Т. т. (реакции на внеш. механич. воздействия — сжатие, растяжение, изгиб, удар и т. д.) определяются силами связи между его структурными частицами. Многообразие этих сил приводит к разнообразию механич. свойств: одни Т. т. пластичны, другие хрупки. Обычно металлы более пластичны, чем диэлектрики. Напр., деформация Cu при комнатной темп-ре в момент

разрыва достигает неск. десятков %, а NaCl разрушается почти без деформации (см. *Пластичность*).

Механич. характеристики изменяются с темп-рой T : с повышением T пластичность обычно увеличивается. Реакция большинства Т. т. зависит от темпа внеш. механич. воздействия: напр., Т. т., хрупкое при ударе, может выдержать значит. статич. нагрузку (см. *Механические свойства материалов*).

При небольших статич. нагрузках у всех Т. т. наблюдалась линейное соотношение между напряжением и деформацией (закон Гука). Упругая деформация обратима — при снятии напряжения она исчезает. Для идеального моно-кристалла (без дефектов) область обратимой деформации должна была бы наблюдаваться вплоть до разрушения, причём предел прочности должен был бы соответствовать силам связи между атомами. Прочность реального кристалла не соответствует силам связи между атомами. В 1922 А. Ф. Иоффе объяснил низкую прочность реальных кристаллов влиянием макроскопич. дефектов (трещин, надрезов) на их поверхности. В дальнейшем оказалось, что при больших механич. нагрузках реакция кристалла зависит от наличия и кол-ва в кристалле дефектов, в частности дислокаций. В большинстве случаев именно дислокации определяют пластичность Т. т.

Механич. свойства Т. т. могут быть изменены его обработкой, вносящей или устраняющей дефекты (отжиг, закалка, легирование, гидроэкструзия и т. п.). Напр., предел прочности при растяжении специально обработанной стали $300-500$ кгс/мм², а обычной стали того же хим. состава не более $40-50$ кгс/мм².

Уругие свойства изотропных Т. т. (в частности, *поликристаллов*) описываются модулем Юнга E (отношение напряжения к относит. удлинению) и коэф. Пуассона σ (отношение изменений поперечного и продольного размеров), характеризующими реакцию на растяжение (сжатие) об разца в виде однородного стержня (см. *Уругость*). Для стали и ковкого железа $E=2,1 \cdot 10^6$ кгс/см². Из условия устойчивости недеформиров. состояния следует, что $E > 0$, а $-1 < \sigma < 1/2$. Однако в природе тела с отрицат. коэф. Пуассона не обнаружены. Модуль Юнга и коэф. Пуассона определяют скорости распространения поперечных и продольных упругих волн в изотропном Т. т.

Движения атомных частиц в Т. т. разнообразны, и это проявляется в разнообразии его свойств. Важную роль играет различие масс атомных частиц. Т. к. ионы в тысячи раз тяжелее электронов, скорость движения ионов в Т. т. мала по сравнению со скоростью электронов. В *адиабатическом приближении*, исследуя движение электронов, ионы можно считать неподвижными, а движение ионов определять усреднёнными (по быстрому движению) характеристиками электронов.

Колебат. характер движения атомов, молекул и ионов Т. т. сохраняется вплоть до темп-ры плавления $T_{\text{пп}}$. Даже при $T=T_{\text{пп}}$ ср. амплитуда колебаний атомов значительно меньше межатомных расстояний, а плавление обусловлено тем, что термодинамич. потенциал жидкости при $T>T_{\text{пп}}$ меньше термодинамич. потенциала Т. т.

Динамич. теория кристаллич. решёток разработана в нач. 20 в. В 1907 А. Эйнштейн (A. Einstein) с помощью модели кристалла как совокупности квантовых гармонич. осцилляторов одинаковой частоты объяснил наблюдаемое падение теплоёмкости Т. т. при понижении темп-ры. Этот факт находился в противоречии с *Дюлонга и Пти законом*. Более совершенная динамич. теория кристаллич. решётки как совокупности квантовых осцилляторов разл. частот была построена П. Дебаем (P. Debye, 1912; см. *Дебая теория*), затем М. Борном (M. Born) и Т. Карманом (T. Karmann) (1913), а также Э. Шредингером (E. Schrödinger, 1914).

Квантование колебат. движения атомов, составляющих кристаллич. решётку, позволило ввести квазичастицы — фононы (см. также *Колебания кристаллической решётки*). В аморфных телах тепловое движение частиц также носит колебат. характер. Однако фононы удаётся ввести только для низкочастотных акустич. колебаний, когда на длине