

Лекция 7

Химические элементы. Типы связей.

Алексей Янилкин

План лекции

- Химические элементы
- Типы связей
- Вопросы
- Список литературы

Таблица Менделеева


**Периодическая система химических элементов
Д.И. Менделеева**


ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЙ РЯД АКТИВНОСТИ МЕТАЛЛОВ Eu, Sm, Li, Cs, Rb, K, Ra, Ba, Sr, Ca, Na, Ac, La, Ce, Pr, Nd, Pm, Gd, Tb, Mg, Y, Dy, Am, Ho, Er, Tm, Lu, Sc, Pu, Th, Np, U, Hf, Be, Al, Ti, Zr, Yb, Mn, V, Nb, Pa, Cr, Zn, Ga, Fe, Cd, In, Tl, Co, Ni, Te, Mo, Sn, Pb, H, W, Sb, Bi, Ge, Re, Cu, Tc, Te, Rh, Po, Hg, Ag, Pd, Os, Ir, Pt, Au																																																																																																																																									
РЯД ЭЛЕКТРООТРИЦАТЕЛЬНОСТИ НЕМЕТАЛЛОВ Si, As, H, P, Se, I, C, S, Br, Cl, N, O, F																																																																																																																																									
<table border="1" style="width: 100%; border-collapse: collapse; text-align: center;"> <thead> <tr> <th>I^A</th> <th>II^A</th> <th>III^A</th> <th>IV^A</th> <th>V^A</th> <th>VI^A</th> <th>VII^A</th> <th>VIII</th> <th>IX</th> <th>X</th> <th>I^B</th> <th>II^B</th> <th>III^B</th> <th>IV^B</th> <th>V^B</th> <th>VI^B</th> <th>VII^B</th> <th>VIII^B</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>1 H 1.008 водород</td> <td>2 He 4.003 гелий</td> <td>3 Li 6.941 литий</td> <td>4 Be 9.012 бериллий</td> <td>5 B 10.811 бор</td> <td>6 C 12.011 углерод</td> <td>7 N 14.007 азот</td> <td>8 O 15.999 кислород</td> <td>9 F 18.998 фтор</td> <td>10 Ne 20.180 неон</td> <td>11 Na 22.990 натрий</td> <td>12 Mg 24.305 магний</td> <td>13 Al 26.982 алюминий</td> <td>14 Si 28.086 кремний</td> <td>15 P 30.974 фосфор</td> <td>16 S 32.06 сера</td> <td>17 Cl 35.45 хлор</td> <td>18 Ar 39.948 аргон</td> </tr> <tr> <td>19 K 39.098 калий</td> <td>20 Ca 40.078 кальций</td> <td>21 Sc 44.956 скандий</td> <td>22 Ti 47.88 титан</td> <td>23 V 50.942 ванадий</td> <td>24 Cr 52.00 хром</td> <td>25 Mn 54.938 марганец</td> <td>26 Fe 55.845 железо</td> <td>27 Co 58.933 кобальт</td> <td>28 Ni 58.69 никель</td> <td>29 Cu 63.546 медь</td> <td>30 Zn 65.38 цинк</td> <td>31 Ga 69.723 галлий</td> <td>32 Ge 72.63 германий</td> <td>33 As 74.922 мышьяк</td> <td>34 Se 78.96 селен</td> <td>35 Br 79.904 бром</td> <td>36 Kr 83.80 криптон</td> </tr> <tr> <td>37 Rb 85.468 рубидий</td> <td>38 Sr 87.62 стронций</td> <td>39 Y 88.906 иттрий</td> <td>40 Zr 91.224 цирконий</td> <td>41 Nb 92.906 ниобий</td> <td>42 Mo 95.94 молибден</td> <td>43 Tc 98.906 технеций</td> <td>44 Ru 101.07 рутений</td> <td>45 Rh 102.91 родий</td> <td>46 Pd 106.42 палладий</td> <td>47 Ag 107.87 серебро</td> <td>48 Cd 112.41 кадмий</td> <td>49 In 114.82 индий</td> <td>50 Sn 118.71 олово</td> <td>51 Sb 121.76 сурьма</td> <td>52 Te 127.60 теллур</td> <td>53 I 126.91 йод</td> <td>54 Xe 131.29 ксенон</td> </tr> <tr> <td>55 Cs 132.91 цезий</td> <td>56 Ba 137.33 барий</td> <td>* лантаноиды</td> <td>72 Hf 178.49 гафний</td> <td>73 Ta 180.95 тантал</td> <td>74 W 183.85 вольфрам</td> <td>75 Re 186.21 рений</td> <td>76 Os 190.23 осмий</td> <td>77 Ir 192.22 иридий</td> <td>78 Pt 195.08 платина</td> <td>79 Au 196.97 золото</td> <td>81 Tl 204.38 таллий</td> <td>82 Pb 207.2 свинец</td> <td>83 Bi 208.98 висмут</td> <td>84 Po 209 полоний</td> <td>85 At 210 астат</td> <td>86 Rn 222 радон</td> </tr> <tr> <td>87 Fr 223 франций</td> <td>88 Ra 226 радий</td> <td>** актиноиды</td> <td>104 Rf 261 резерфордий</td> <td>105 Db 262 дубний</td> <td>106 Sg 263 себоргий</td> <td>107 Bh 264 борий</td> <td>108 Hs 265 хасий</td> <td>109 Mt 266 мейтнерий</td> <td>110 Ds 267 дармштадтий</td> <td>111 Rg 268 рентгений</td> <td>113 Uut 268 унунтрий</td> <td>114 Uuq 269 унункваторий</td> <td>115 Uup 269 унунпятий</td> <td>116 Uuh 269 унуншестий</td> <td>117 Uus 269 унунседьмой</td> <td>118 Uuo 269 унунвосьмой</td> </tr> <tr> <td>89 Ac 227 актиний</td> <td>90 Th 232 торий</td> <td>91 Pa 231 протактиний</td> <td>92 U 238 уран</td> <td>93 Np 237 нептуний</td> <td>94 Pu 244 плутоний</td> <td>95 Am 243 амерций</td> <td>96 Cm 247 куриум</td> <td>97 Bk 247 берклий</td> <td>98 Cf 251 кальфорний</td> <td>99 Fm 253 фермий</td> <td>101 Md 258 мendelevium</td> <td>102 No 259 nobelium</td> <td>103 Lr 260 lawrencium</td> </tr> </tbody> </table>																		I ^A	II ^A	III ^A	IV ^A	V ^A	VI ^A	VII ^A	VIII	IX	X	I ^B	II ^B	III ^B	IV ^B	V ^B	VI ^B	VII ^B	VIII ^B	1 H 1.008 водород	2 He 4.003 гелий	3 Li 6.941 литий	4 Be 9.012 бериллий	5 B 10.811 бор	6 C 12.011 углерод	7 N 14.007 азот	8 O 15.999 кислород	9 F 18.998 фтор	10 Ne 20.180 неон	11 Na 22.990 натрий	12 Mg 24.305 магний	13 Al 26.982 алюминий	14 Si 28.086 кремний	15 P 30.974 фосфор	16 S 32.06 сера	17 Cl 35.45 хлор	18 Ar 39.948 аргон	19 K 39.098 калий	20 Ca 40.078 кальций	21 Sc 44.956 скандий	22 Ti 47.88 титан	23 V 50.942 ванадий	24 Cr 52.00 хром	25 Mn 54.938 марганец	26 Fe 55.845 железо	27 Co 58.933 кобальт	28 Ni 58.69 никель	29 Cu 63.546 медь	30 Zn 65.38 цинк	31 Ga 69.723 галлий	32 Ge 72.63 германий	33 As 74.922 мышьяк	34 Se 78.96 селен	35 Br 79.904 бром	36 Kr 83.80 криптон	37 Rb 85.468 рубидий	38 Sr 87.62 стронций	39 Y 88.906 иттрий	40 Zr 91.224 цирконий	41 Nb 92.906 ниобий	42 Mo 95.94 молибден	43 Tc 98.906 технеций	44 Ru 101.07 рутений	45 Rh 102.91 родий	46 Pd 106.42 палладий	47 Ag 107.87 серебро	48 Cd 112.41 кадмий	49 In 114.82 индий	50 Sn 118.71 олово	51 Sb 121.76 сурьма	52 Te 127.60 теллур	53 I 126.91 йод	54 Xe 131.29 ксенон	55 Cs 132.91 цезий	56 Ba 137.33 барий	* лантаноиды	72 Hf 178.49 гафний	73 Ta 180.95 тантал	74 W 183.85 вольфрам	75 Re 186.21 рений	76 Os 190.23 осмий	77 Ir 192.22 иридий	78 Pt 195.08 платина	79 Au 196.97 золото	81 Tl 204.38 таллий	82 Pb 207.2 свинец	83 Bi 208.98 висмут	84 Po 209 полоний	85 At 210 астат	86 Rn 222 радон	87 Fr 223 франций	88 Ra 226 радий	** актиноиды	104 Rf 261 резерфордий	105 Db 262 дубний	106 Sg 263 себоргий	107 Bh 264 борий	108 Hs 265 хасий	109 Mt 266 мейтнерий	110 Ds 267 дармштадтий	111 Rg 268 рентгений	113 Uut 268 унунтрий	114 Uuq 269 унункваторий	115 Uup 269 унунпятий	116 Uuh 269 унуншестий	117 Uus 269 унунседьмой	118 Uuo 269 унунвосьмой	89 Ac 227 актиний	90 Th 232 торий	91 Pa 231 протактиний	92 U 238 уран	93 Np 237 нептуний	94 Pu 244 плутоний	95 Am 243 амерций	96 Cm 247 куриум	97 Bk 247 берклий	98 Cf 251 кальфорний	99 Fm 253 фермий	101 Md 258 мendelevium	102 No 259 nobelium	103 Lr 260 lawrencium
I ^A	II ^A	III ^A	IV ^A	V ^A	VI ^A	VII ^A	VIII	IX	X	I ^B	II ^B	III ^B	IV ^B	V ^B	VI ^B	VII ^B	VIII ^B																																																																																																																								
1 H 1.008 водород	2 He 4.003 гелий	3 Li 6.941 литий	4 Be 9.012 бериллий	5 B 10.811 бор	6 C 12.011 углерод	7 N 14.007 азот	8 O 15.999 кислород	9 F 18.998 фтор	10 Ne 20.180 неон	11 Na 22.990 натрий	12 Mg 24.305 магний	13 Al 26.982 алюминий	14 Si 28.086 кремний	15 P 30.974 фосфор	16 S 32.06 сера	17 Cl 35.45 хлор	18 Ar 39.948 аргон																																																																																																																								
19 K 39.098 калий	20 Ca 40.078 кальций	21 Sc 44.956 скандий	22 Ti 47.88 титан	23 V 50.942 ванадий	24 Cr 52.00 хром	25 Mn 54.938 марганец	26 Fe 55.845 железо	27 Co 58.933 кобальт	28 Ni 58.69 никель	29 Cu 63.546 медь	30 Zn 65.38 цинк	31 Ga 69.723 галлий	32 Ge 72.63 германий	33 As 74.922 мышьяк	34 Se 78.96 селен	35 Br 79.904 бром	36 Kr 83.80 криптон																																																																																																																								
37 Rb 85.468 рубидий	38 Sr 87.62 стронций	39 Y 88.906 иттрий	40 Zr 91.224 цирконий	41 Nb 92.906 ниобий	42 Mo 95.94 молибден	43 Tc 98.906 технеций	44 Ru 101.07 рутений	45 Rh 102.91 родий	46 Pd 106.42 палладий	47 Ag 107.87 серебро	48 Cd 112.41 кадмий	49 In 114.82 индий	50 Sn 118.71 олово	51 Sb 121.76 сурьма	52 Te 127.60 теллур	53 I 126.91 йод	54 Xe 131.29 ксенон																																																																																																																								
55 Cs 132.91 цезий	56 Ba 137.33 барий	* лантаноиды	72 Hf 178.49 гафний	73 Ta 180.95 тантал	74 W 183.85 вольфрам	75 Re 186.21 рений	76 Os 190.23 осмий	77 Ir 192.22 иридий	78 Pt 195.08 платина	79 Au 196.97 золото	81 Tl 204.38 таллий	82 Pb 207.2 свинец	83 Bi 208.98 висмут	84 Po 209 полоний	85 At 210 астат	86 Rn 222 радон																																																																																																																									
87 Fr 223 франций	88 Ra 226 радий	** актиноиды	104 Rf 261 резерфордий	105 Db 262 дубний	106 Sg 263 себоргий	107 Bh 264 борий	108 Hs 265 хасий	109 Mt 266 мейтнерий	110 Ds 267 дармштадтий	111 Rg 268 рентгений	113 Uut 268 унунтрий	114 Uuq 269 унункваторий	115 Uup 269 унунпятий	116 Uuh 269 унуншестий	117 Uus 269 унунседьмой	118 Uuo 269 унунвосьмой																																																																																																																									
89 Ac 227 актиний	90 Th 232 торий	91 Pa 231 протактиний	92 U 238 уран	93 Np 237 нептуний	94 Pu 244 плутоний	95 Am 243 амерций	96 Cm 247 куриум	97 Bk 247 берклий	98 Cf 251 кальфорний	99 Fm 253 фермий	101 Md 258 мendelevium	102 No 259 nobelium	103 Lr 260 lawrencium																																																																																																																												

* лантаноиды
 ** актиноиды
 * лантаноиды
 ** актиноиды

разработано редакцией dorus.by.ru

Таблица Менделеева

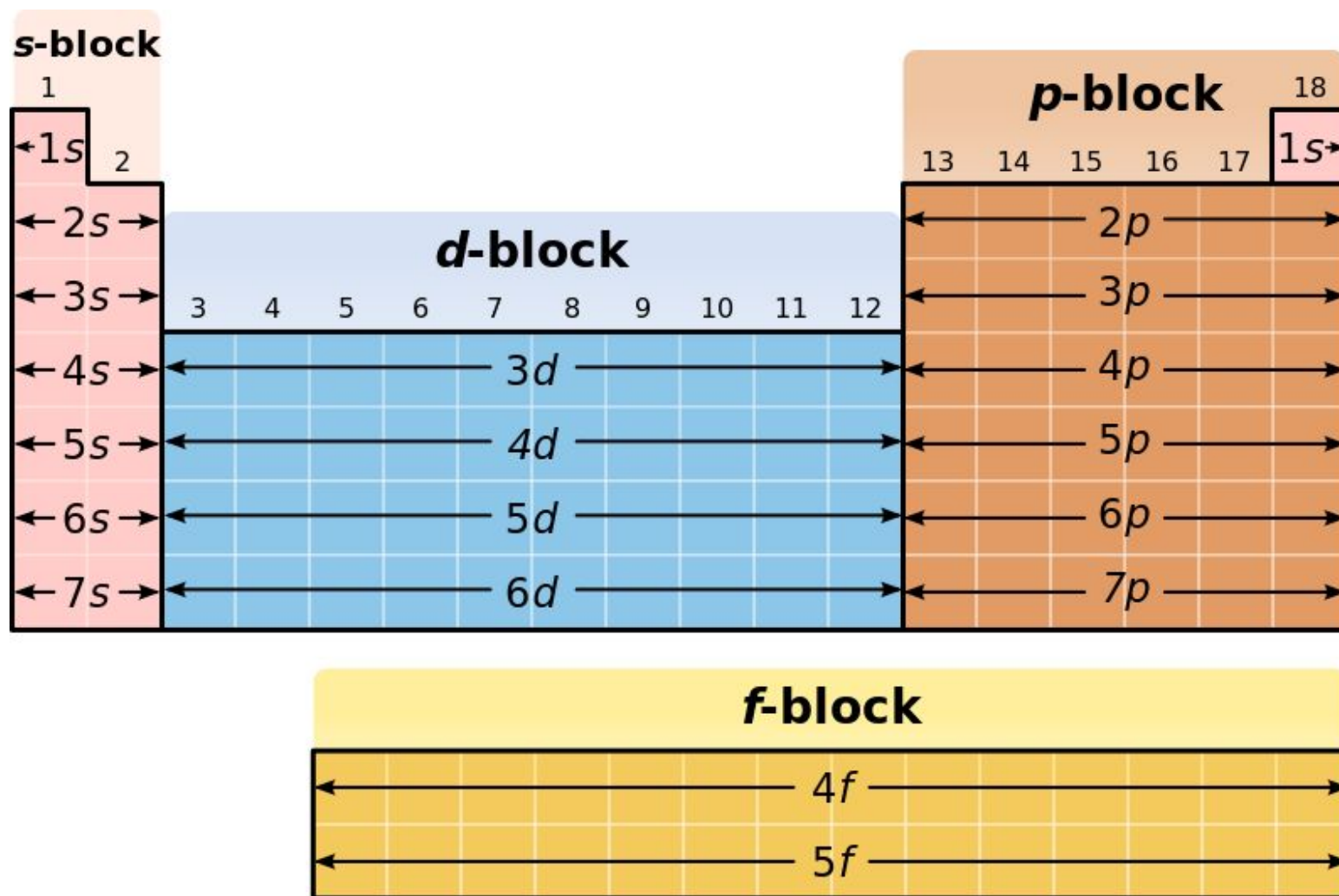
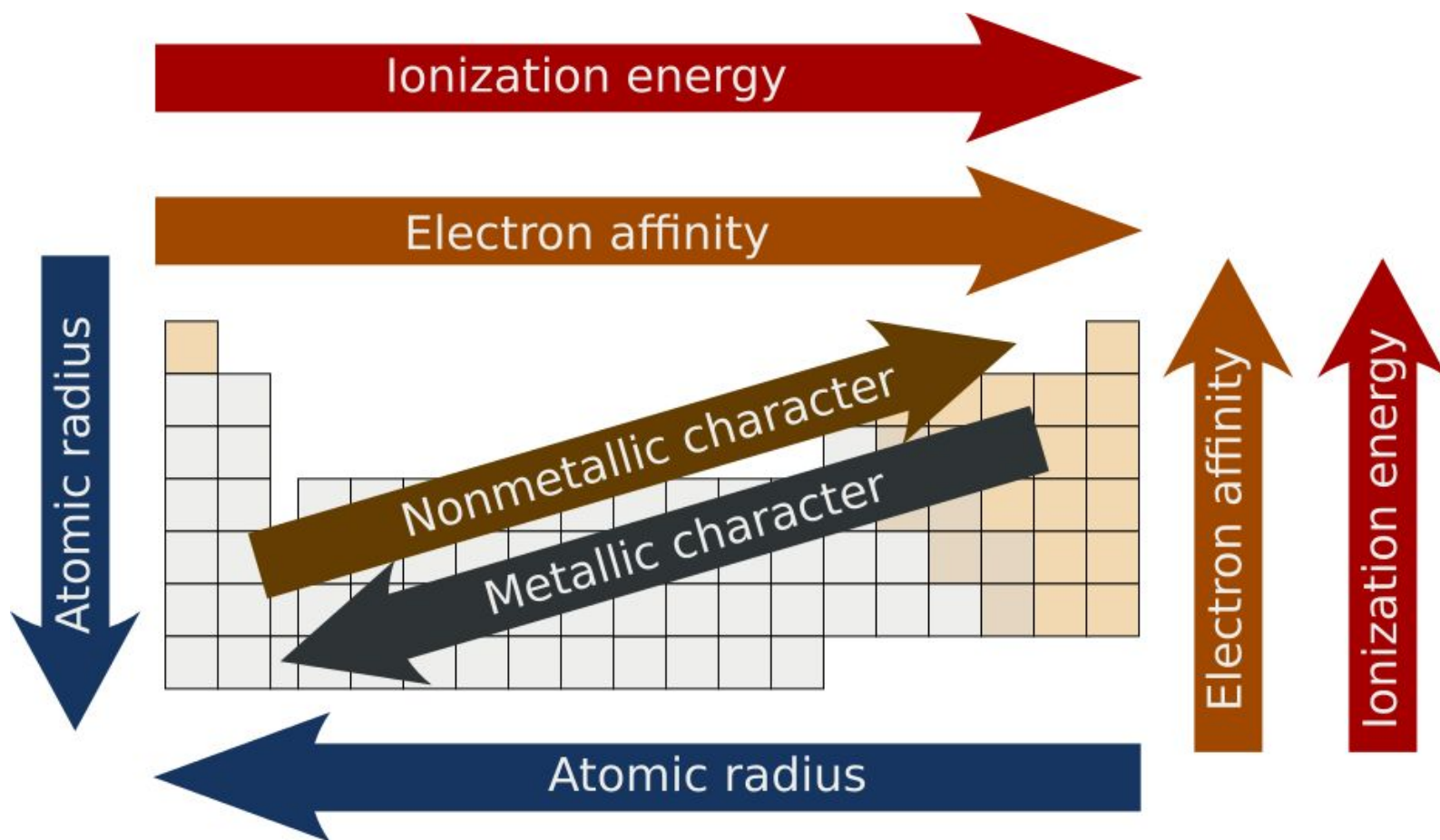
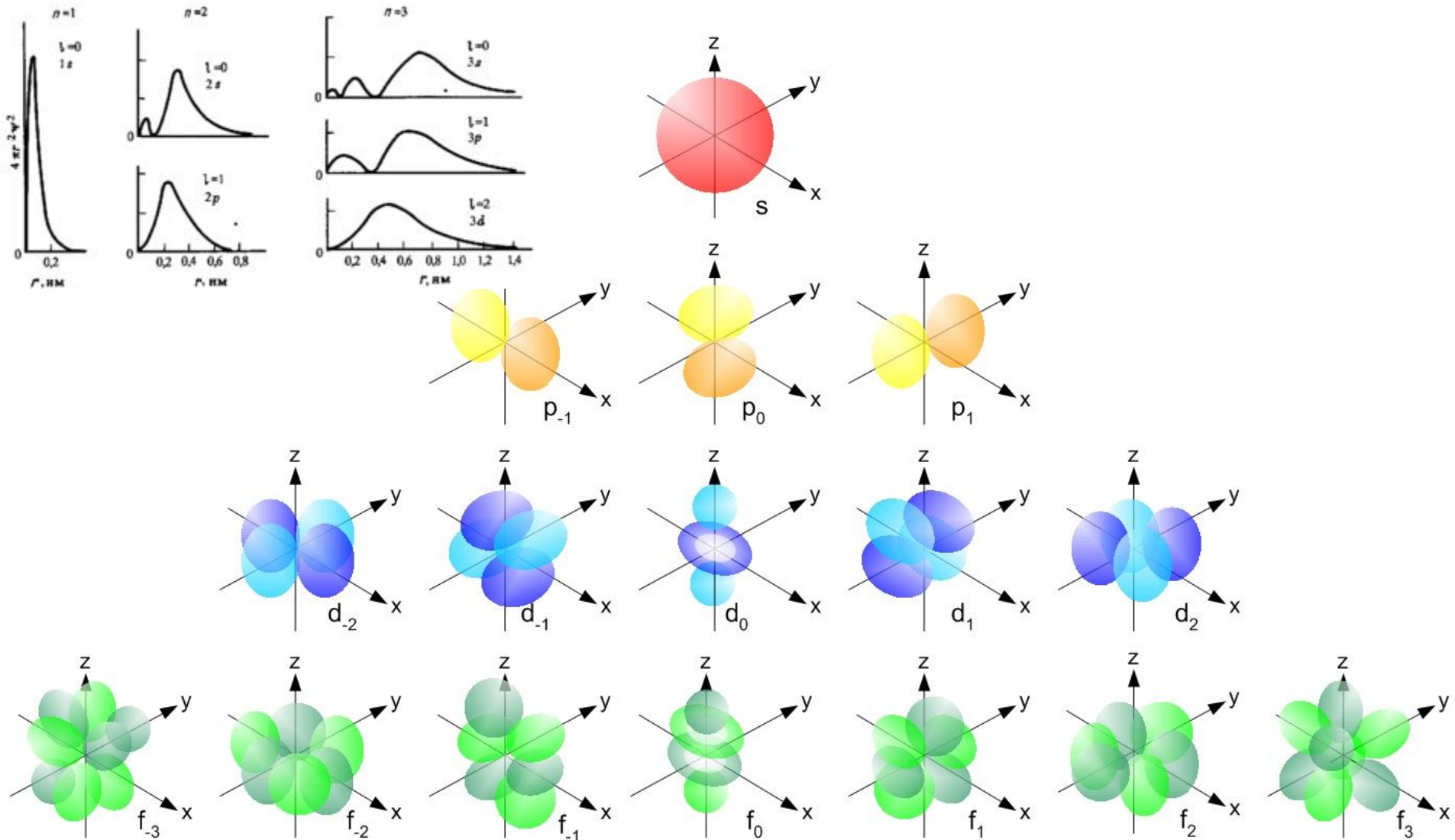


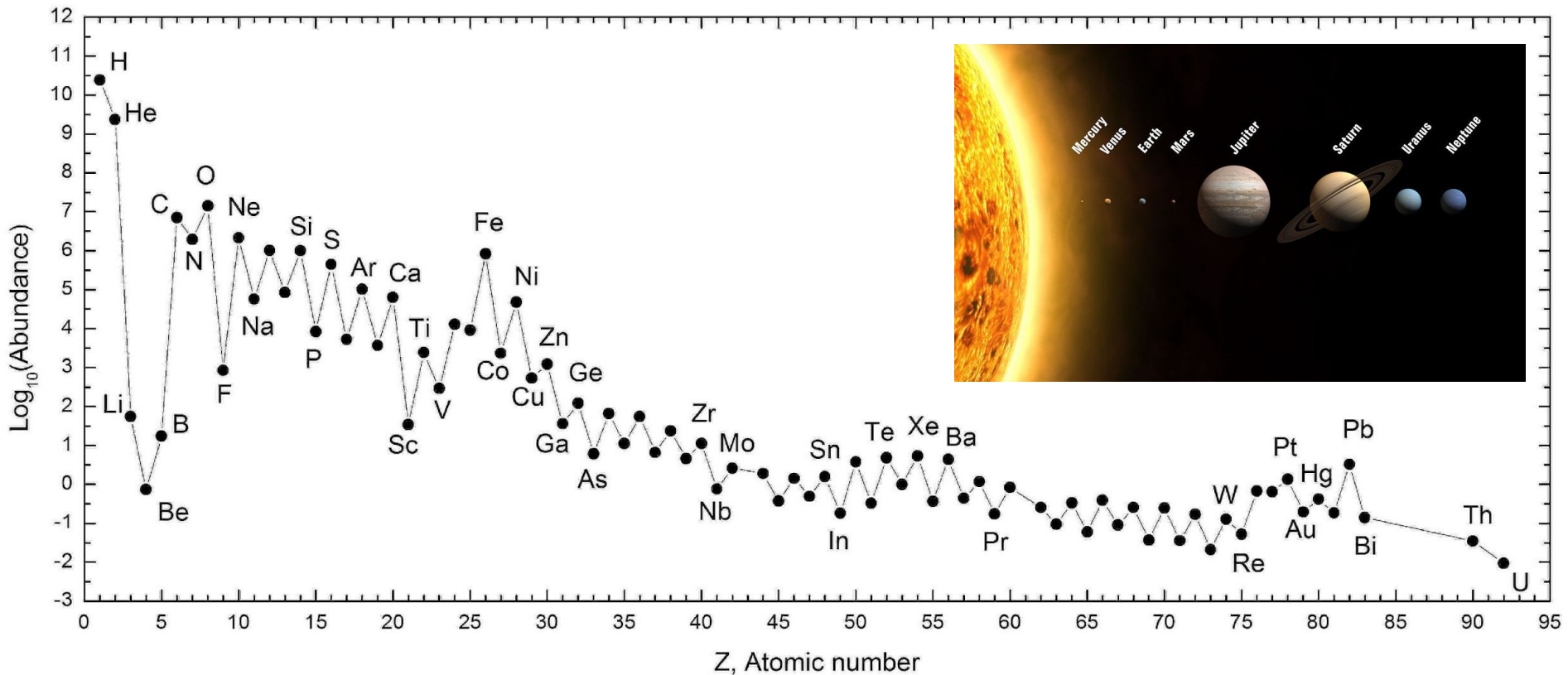
Таблица Менделеева



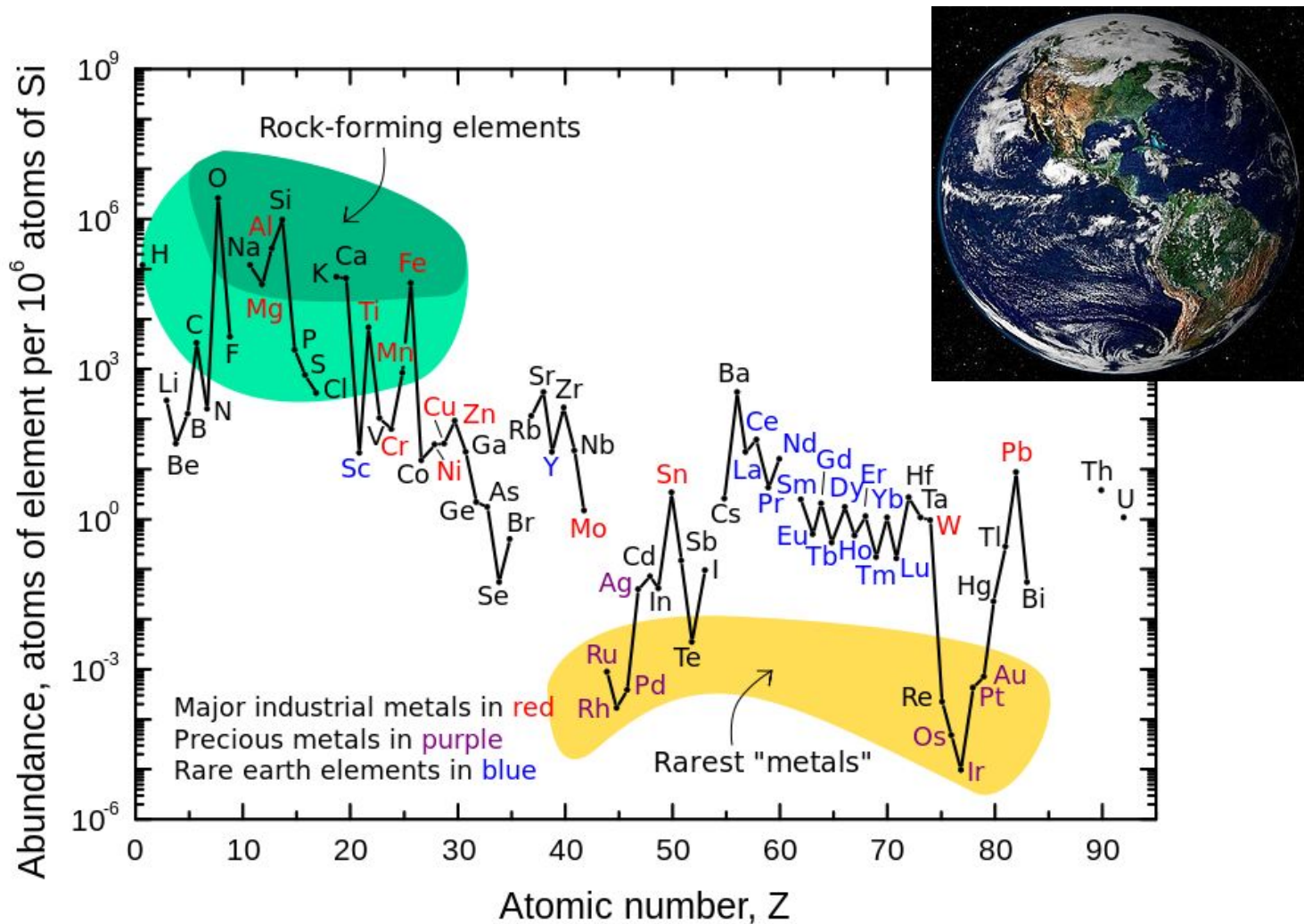
Атомные орбитали



Распространенность элементов в Солнечной системе



Распространенность элементов на Земле



Химическая связь

- Химическая связь – взаимное притяжение атомов, приводящее к образованию молекул, кристаллов, конденсированной фазы.

Химическая связь

- Тип связи определяет электронные свойства
- Тип связи определяет колебательные свойства
- Энергия связи определяет характерную величину взаимодействия, необходимую для воздействия на связь (температура плавления, энергия сублимации и т.д.)

Типы химических связей

- Силы Ван-дер-Ваальса
- Ионная связь
- Ковалентная связь
- Металлическая связь
- Водородная связь

Силы Ван-дер-Ваальса



- Силы межатомного (межмолекулярного взаимодействия) с энергией 10-20 кДж/моль.
- Классификация ван-дер-ваальсовых сил
 - Ориентационные силы, диполь-дипольное притяжение. Энергия такого взаимодействия обратно пропорциональна кубу расстояния между диполями.
 - Дисперсионное притяжение (лондоновские силы). Взаимодействием между мгновенным и наведенным диполем. Энергия такого взаимодействия обратно пропорциональна шестой степени расстояния между диполями.
 - Индукционное притяжение. Взаимодействие между постоянным диполем и наведенным (индуцированным)

Силы Ван-дер-Ваальса-Лондона: кристаллы инертных газов

- Энергия взаимодействия двух диполей:

$$U(R) \approx -\frac{2p_1p_2}{R^3} = -\frac{4\alpha p^2}{R^6}$$

где α – электронная поляризуемость, p – дипольный момент.

- Характерная оценка $U(R) \approx -\frac{10^{-58}}{R^6}$ эрг * см⁶.

Для $R=4\text{А}$ получаем $\frac{U(R)}{k_B} \approx 100K$

Силы Ван-дер-Ваальса-Лондона: кристаллы инертных газов

- Энергия взаимодействия с учетом отталкивания:

$$U(R) \approx 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{R}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{R}\right)^6 \right]$$

- Равновесное расстояние в ГЦК кристалла:

$$R_0/\sigma = 1.09$$

- Энергия связи:

$$U_{tot}(R_0) = -2.15(4N\epsilon)$$

- Объемный модуль:

$$B \approx \epsilon/\sigma^3$$

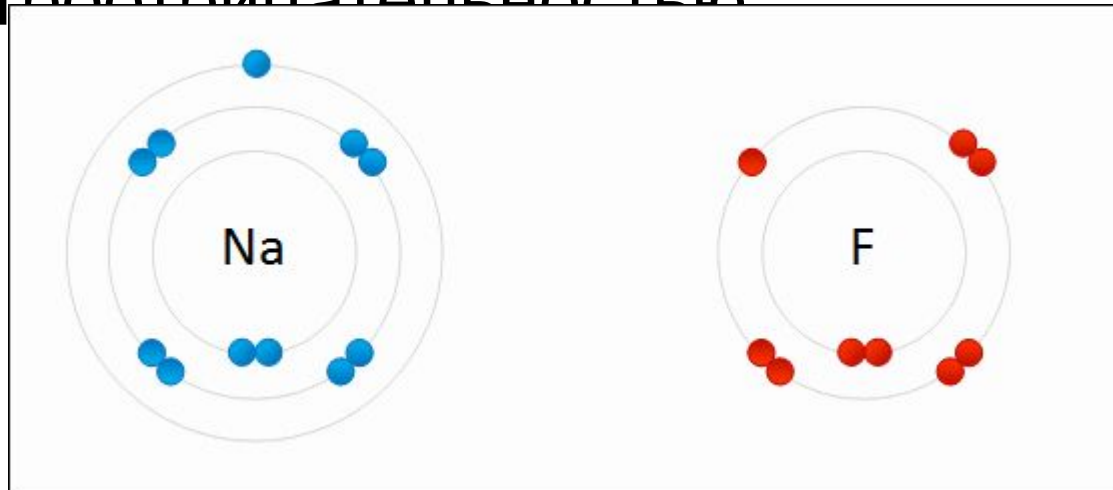
Силы Ван-дер-Ваальса-Лондона: кристаллы инертных газов

- Примеры кристаллов инертных газов

	Расстояние между ближайшим и соседями, А	Температура плавления	$\epsilon, 10^{-16}$ эрг	$\sigma, \text{А}$
Ne	3.13	24	50	2.74
Ar	3.76	84	167	3.40
Kr	4.01	117	225	3.65
Xe	4.35	161	320	3.98

Ионная связь

- Ионная связь - очень прочная химическая связь, образуемая между атомами с большой разностью электроотрицательностью, при которой общая электронная пара переходит преимущественно к атому с большей электроотрицательностью



Электростатическая энергия или энергия Маделунга

- Энергия парного взаимодействия:

$$U_{ij} = \lambda \exp\left(-\frac{r_{ij}}{\rho}\right) \pm \frac{q^2}{r_{ij}}$$

- Постоянная Маделунга ($p_{ij} = r_{ij}/R$):

$$\alpha = \sum_j \frac{\pm}{p_{ij}}$$

- Общая энергия в состоянии равновесия:

$$U_{tot} = -\frac{N\alpha q^2}{R_0} \left(1 - \frac{\rho}{R_0}\right)$$

Постоянная Маделунга

$$\alpha = \sum_j \frac{\pm}{r_{ij}}$$

Значения постоянной Маделунга

Тип структуры	Пример соединения	Координационное число	Постоянная Маделунга
Хлорид натрия	NaCl, AgCl, CdO, PbS	6	1,747558
Хлорид цезия	CsCl, TlCl, RbF	8	1,763
Вюрцит	ZnS, BeO, ZnO, CdS	4	1,641
Сфалерит (цинковая обманка)	ZnS, CuCl, AgI, HgS	4	1,638
Флюорит	CaF ₂ , PbF ₂ , UO ₂ , Na ₂ S	8(4)	5,039
Рутил	TiO ₂ , MgF ₂ , MnO ₂ , NiF ₂	6(3)	4,816
Куприт	Cu ₂ O	4(2)	4,332

Объемный модуль упругости

- Объемный модуль:

$$B = \frac{\alpha q^2}{18R_0^4} \left(\frac{R_0}{\rho} - 1 \right)$$

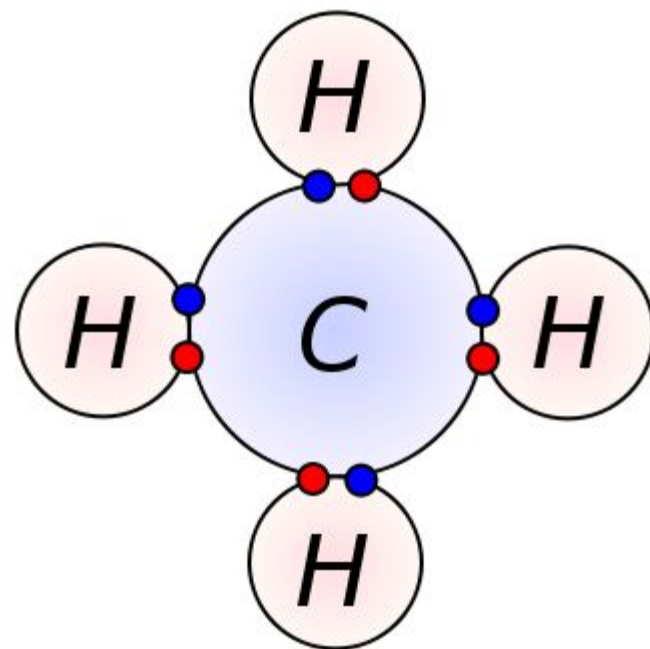
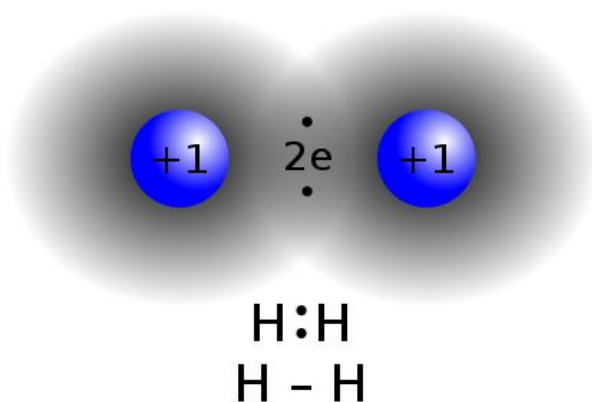
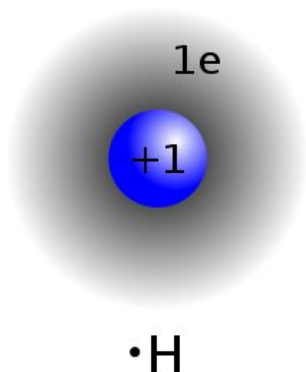
- Из экспериментального значения модуля сдвига определяют отношение $\frac{R_0}{\rho}$. Для KCl:

$$\frac{R_0}{\rho} \approx 10$$

Для многих щелочно-галогидных солей $\rho \approx 0.3 \text{ \AA}$

Ковалентная связь

- Ковалентная связь – химическая связь, образованная перекрытием пары валентных электронных облаков.



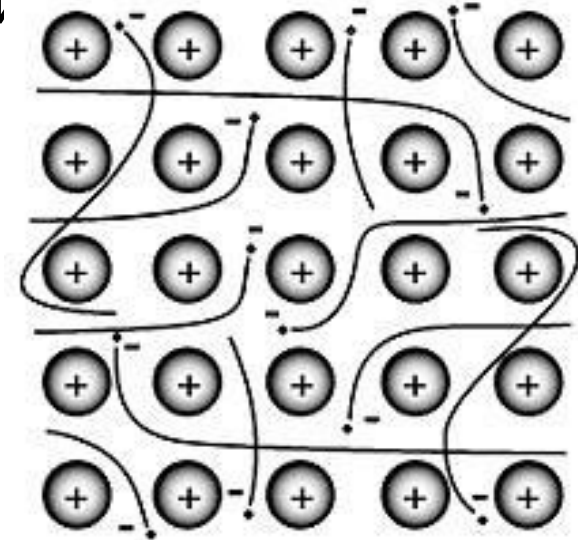
- Electron from hydrogen
- Electron from carbon

Ковалентная связь

- Характерные свойства - направленность, насыщенность, полярность, поляризуемость.
- Насыщенность - способность атомов образовывать ограниченное число ковалентных связей.
- Полярность связи обусловлена неравномерным распределением электронной плотности.
- Валентность – число химических связей.

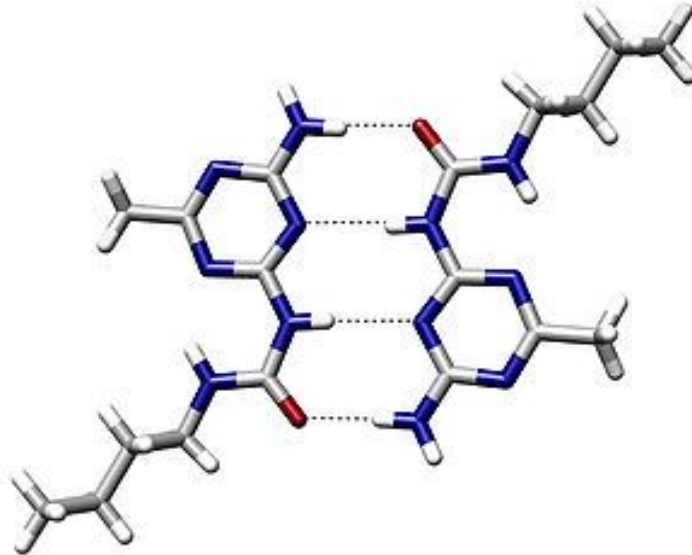
Металлическая связь

- Химическая связь между атомами, возникающая за счёт обобществления их валентных электронов.
- Характерна для атомов с близкой электроотрицательностью и со слабо связанными электронами



Водородная связь

- Образование связи электроотрицательного иона с атомом водорода, который ковалентно связан с другим электроотрицательных ионом
- Характерная энергия связи – 0,1 эВ.



Вопросы

- Получить постоянную Маделунга для первых трех координационных сфер кристалла NaCl.
- Оценить объемный модуль для кристалла Xe

Список литературы

- Физико-химический основы материаловедения. // Г. Готтштайн (2009).
- Материаловедение. // Адаскин, Седов, Онегина, Климов (2005).