

Запорізький національний університет



# Кристалохімія.

## Лекція 5.



Запоріжжя 2024.

# Тема 1. Типи хімічного зв'язку в кристалах. Кристалічні структури. Структурна гомологія

- Поняття про кристалічну решітку.
- Трансляції.
- Неможливість існування в кристалах осей 5-го, 7-го і вищого порядку.
- Плоскі сітки решітки.
- Визначення форми петлі плоскої сітки.
- 14 решіток Браве.
- Трансляції і гвинтові осі – додаткові елементи симетрії контініума.
- Загальні відомості про 230 просторових груп Федорова.

# Типи хімічного зв'язку в кристалах

1812 р Я. Берцеліус.

1897 р. Дж. Томсон

1911р. Е. Резерфорд

1913р. Н. Бор

1915р. Коссель

Гіпотеза про електричну полярність атомів

відкриття електрону

експеримент, гіпотеза наявності ядра.

Планетарна модель атома

теорія електростатичної валентності

## ***Іонний зв'язок.***

Енергія решітки  $U$  - енергія, яка виділяється при утворенні іонного кристалу з нескінченно розрідженого іонного газу ( у ньому іони не взаємодіють один з одним).

# Типи хімічного зв'язку в кристалах

Відмови від теорії Берцеліуса, бо нездатність пояснити утворення простих речовин.

XIX ст.

Виникнення теорії валентності, але механізм невідомий.

1916

Льюїс

електронна теорія валентності

1916

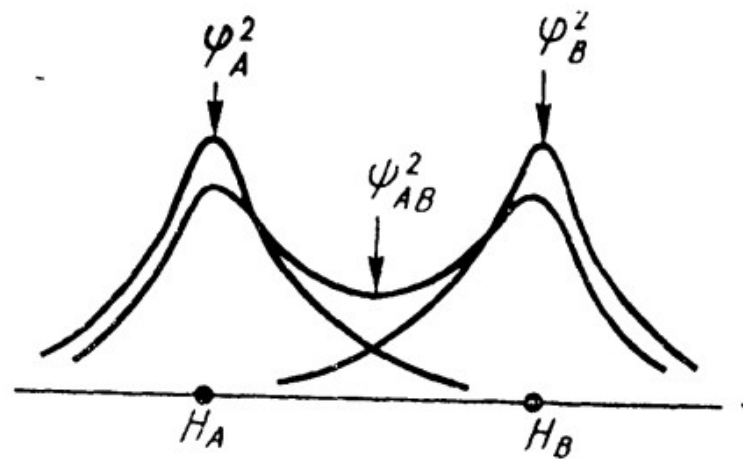
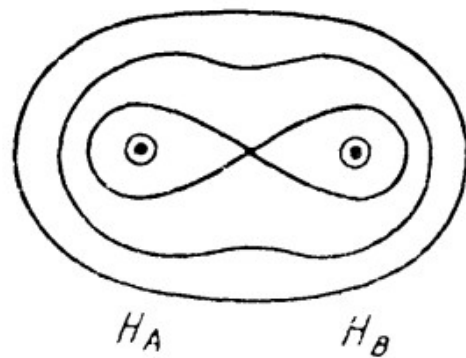
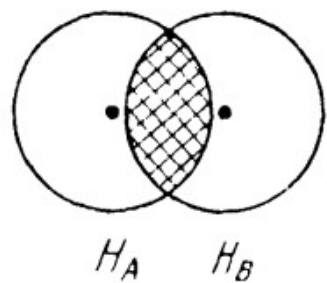
Ленгмюр

**Ковалентни зв'язок** - за рахунок спарювання електронів..



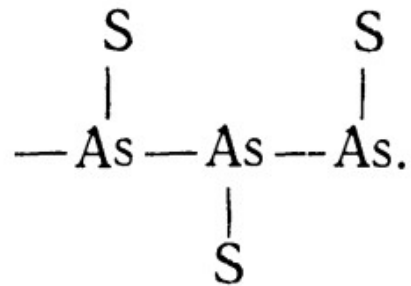
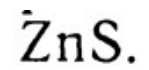
Фізичний зміст ковалентного зв'язку вдалось пояснити за допомогою квантової механіки.

## Типи хімічного зв'язку в кристалах



# Типи хімічного зв'язку в кристалах

Донорно-акцепторний зв'язок.



# Типи хімічного зв'язку в кристалах

Проміжні види зв'язку. Ступінь іонності зв'язку.

$$\Delta = D_{AB} - \frac{1}{2} (D_{AA} + D_{BB}),$$

$$0,208\sqrt{\Delta} = \chi_A - \chi_B.$$

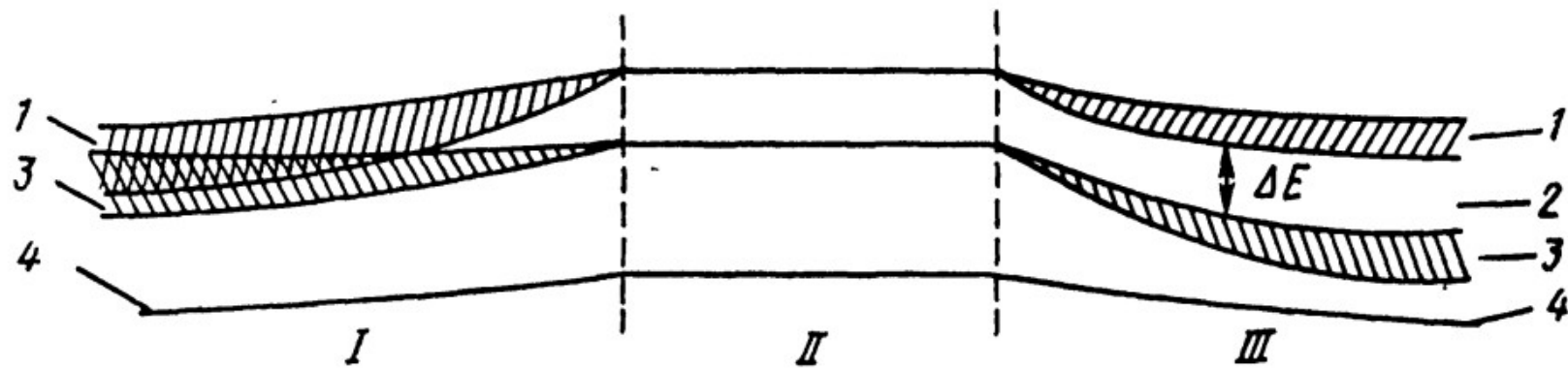
$$\chi_{\Pi} = \chi_M / 2,7.$$

$$E = \Delta H_f + \sum_m \Delta H_{ат.}$$

Элемент	ЭО	Элемент	ЭО	Элемент	ЭО	Элемент	ЭО
H	2,2	Cr VI	2,4	Tc V	1,9	Os III	2,0
Li	1,0	Mn II	1,4	Tc VII	2,3	Os IV	2,1
Be	1,6	Mn III	1,5	Ru III	2,0	Os VIII	2,4
B	2,0	Mn IV	2,1	Ru IV	2,1	Ir	2,1
C	2,6	Mn VII	2,5	Rh	2,1	Pt II	2,1
N	3,0	Fe II	1,8	Pd	2,1	Pt IV	2,2
O	3,1	Fe III	1,9	Ag	1,9	Pt VI	2,6
F	4,0	Co II	1,8	Cd	1,7	Au	2,3
Na	0,9	Ni II	1,8	In	1,8	Hg	2,0
Mg	1,2	Cu I	1,8	Sn II	1,8	Tl I	1,4
Al	1,6	Cu II	2,0	Sn IV	2,0	Tl III	1,9
Si	1,9	Zn	1,6	Sb III	1,9	Pb II	1,8
P	2,2	Ga	1,7	Sb V	2,2	Pb IV	2,1
S	2,6	Ge	2,0	Te	2,3	Bi III	2,0
Cl	3,2	As	2,1	I	2,6	Bi V	2,2
K	0,8	Se	2,5	Cs	0,7	Po	2,2
Ca	1,1	Br	3,0	Ba	0,9	At	2,3
Sc	1,3	Rb	0,8	TR	1,1	Fr	0,7
Ti II	1,4	Sr	1,0	Hf } La	1,2	Ra	0,9
Ti III	1,6	Y	1,2	Ta } Lu	1,4	Ac	1,1
V III	1,5	Zr II	1,3	W IV	1,5	U IV	1,4
V IV	1,7	Zr IV	1,5	W VI	1,6	U VI	1,9
V V	1,9	Nb	1,6	Re V	1,9		
Cr II	1,5	Mo IV	1,7	Re VII	2,1		
Cr III	1,6	Mo VI	2,3				

# Типи хімічного зв'язку в кристалах

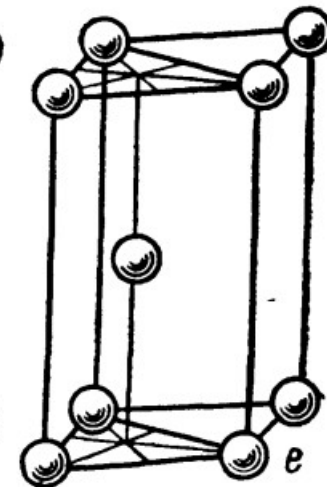
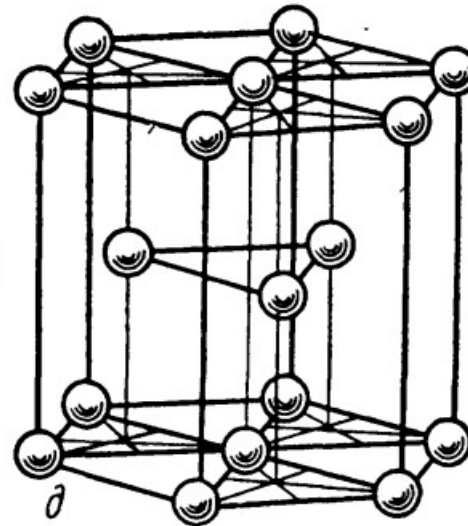
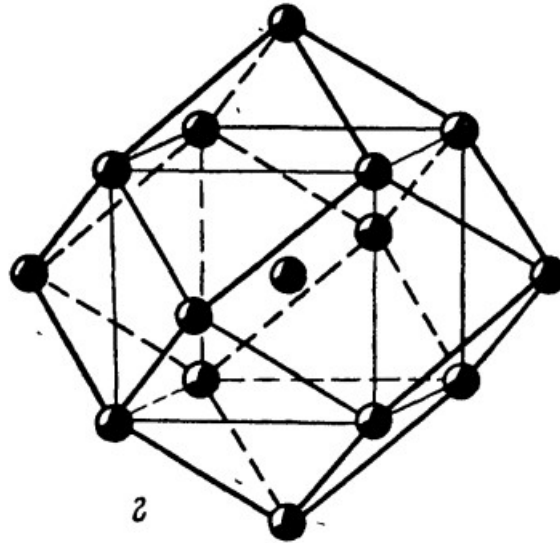
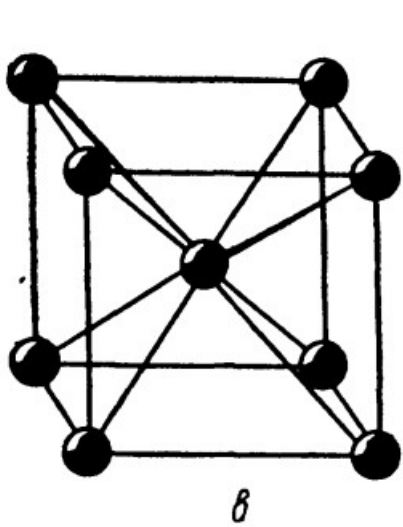
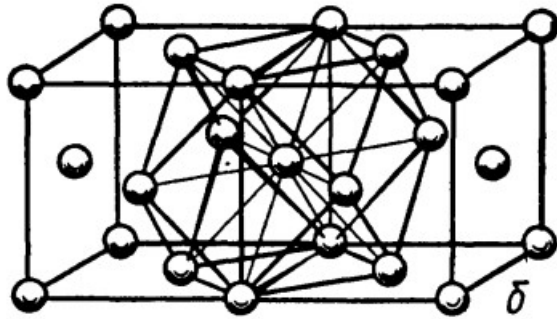
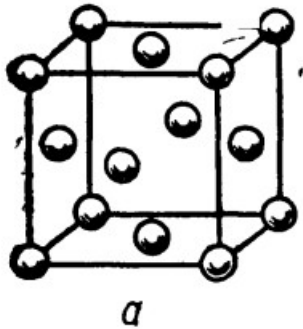
Металічний зв'язок.





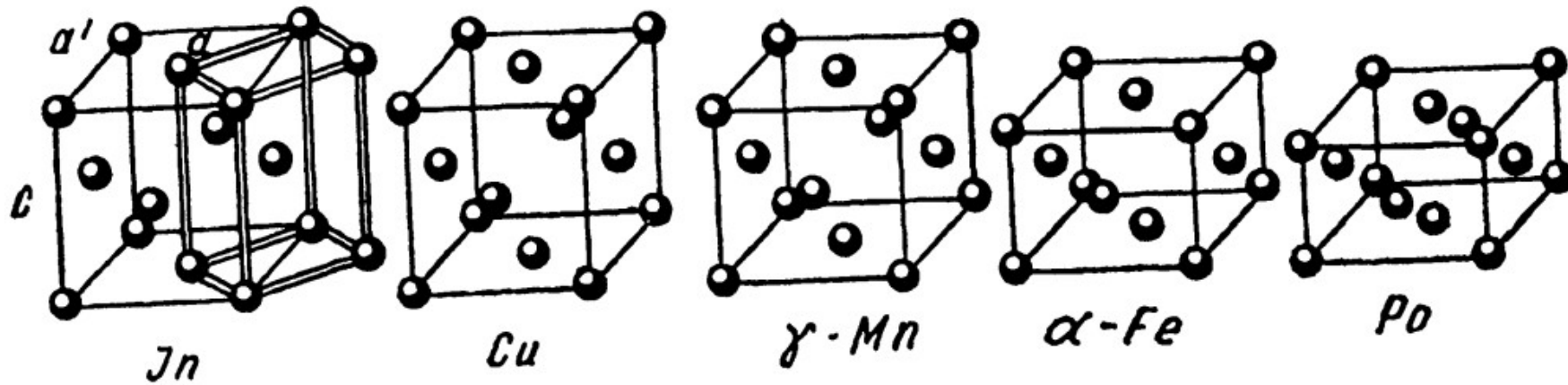
# Типи хімічного зв'язку в кристалах

Металічний зв'язок.



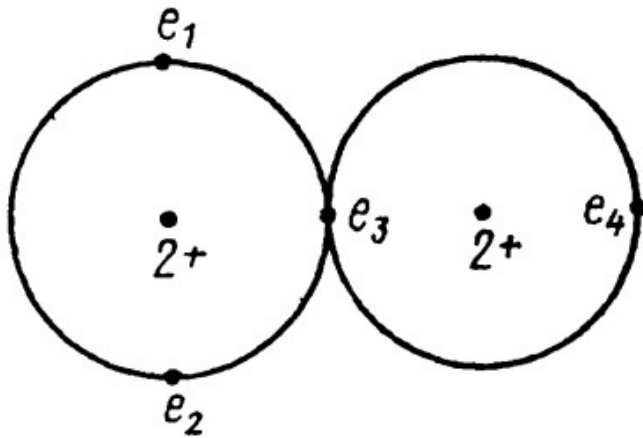
# Типи хімічного зв'язку в кристалах

Металічний зв'язок.



# Типи хімічного зв'язку в кристалах

Остаточний (Ван-дер-Ваальсов) зв'язок..



$1/R^2$ , Електростатичні сили

$1/R^6$ , Дисперсійна взаємодія

$1/R^{12}$ , Сили відштовхування

$$U_d = - \sum_i \frac{av_i}{R_i^m} + \sum_i \frac{bv_i}{R_i^p},$$

$$U_d = - \frac{S_m a}{R^m} + \frac{S_p b}{R^p},$$

# Типи хімічного зв'язку в кристалах

Водневий зв'язок..

