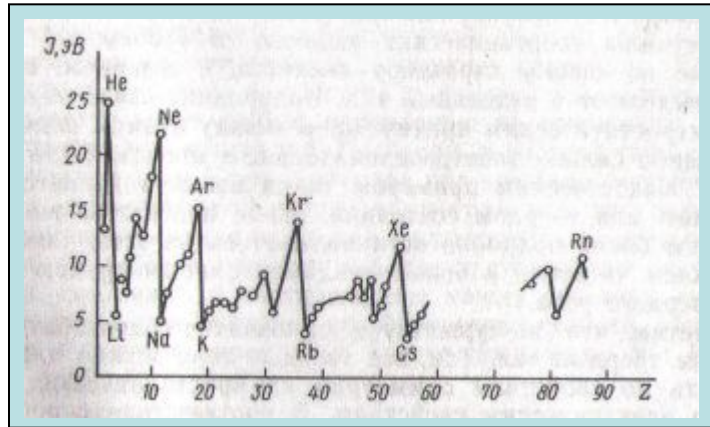


Ионные кристаллы

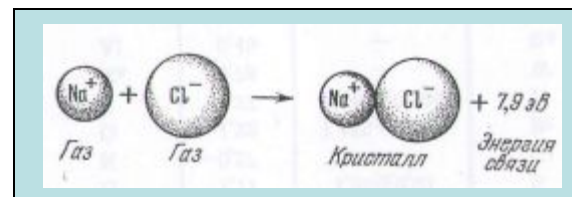
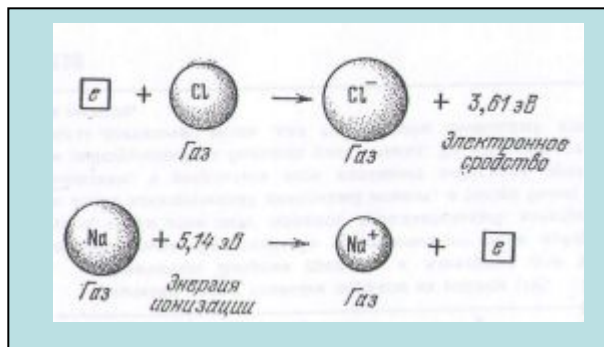
ИОННАЯ СВЯЗЬ



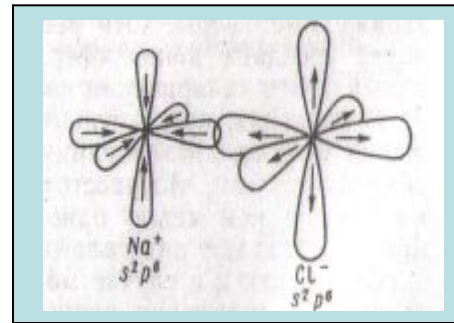
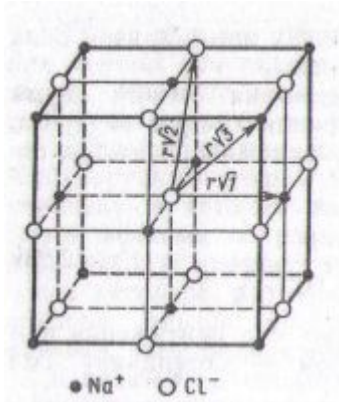
Зависимость первого потенциала ионизации от порядкового номера элемента

Первый потенциал ионизации – энергия необходимая для отрыва электрона от нейтрального невозбужденного атома

Сродство к электрону – энергия, освобождающаяся при присоединении электрона к нейтральному невозбужденному атому с образованием аниона



Энергия связи ионных кристаллов



Стрелками показаны направления сдвига электронной плотности в структурах типа *NaCl*

Энергия взаимодействия между двумя ионами *i* и *j*

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

Полная энергия одного иона в кристалле $U_i = \sum_j U_{ij}$

Полная энергия решетки кристалла $U = NU_i$

Энергия Маделунга

$$U_{ij} = \left\{ \begin{array}{ll} \lambda \exp\left(-\frac{R}{\rho}\right) - \frac{q^2}{R} & \text{для ближайших пар ионов} \\ \pm \frac{1}{p_{ij}} \frac{q^2}{R} & \text{для всех других пар ионов} \end{array} \right\}$$

Постоянная Маделунга

$$\alpha_m = \sum_j \frac{(\pm)}{p_{ij}}$$

Энергия кристаллической решетки из $2N$ ионов

$$U = -\frac{N\alpha_m q^2}{R_0} \left(1 - \frac{\rho}{R_0}\right)$$

6
6
6
6

Объемный модуль упругости для структуры NaCl

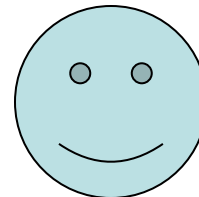
$$B = \frac{\alpha_m q^2}{18R_0^4} \left(\frac{R_0}{\rho} - 2 \right)$$

Сравнение с экспериментом (*KCl*)

α_m	1,75
R_0	$3,14 \cdot 10^{-8} \text{ см}$
B	$1,97 \cdot 10^{11} \text{ дин / см}^2$

$\Rightarrow \rho \approx 0,3 \cdot 10^{-8} \text{ см}$

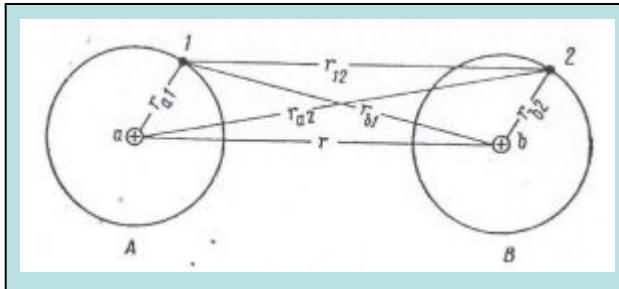
$$\frac{U}{N} = -\frac{\alpha_m q^2}{R_0} \left(1 - \frac{\rho}{R_0} \right) \approx -7,26 \text{ эВ}$$



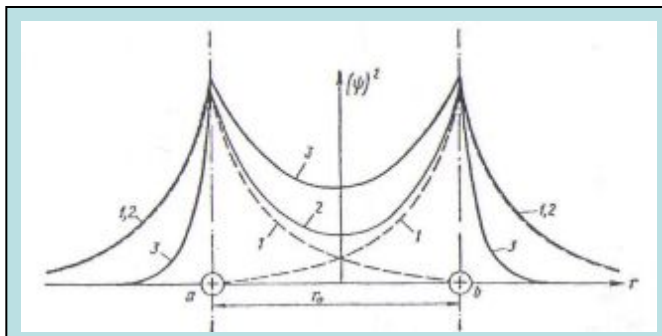
$$\left(\frac{U}{N} \right)_{\text{exp}} = -7,397 \text{ эВ}$$

Ковалентные кристаллы

Ковалентная связь



Два атома водорода на большом расстоянии друг от друга.



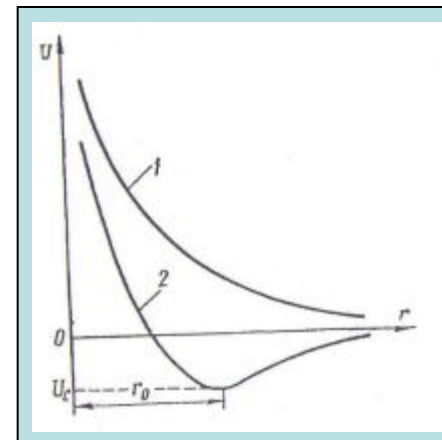
Плотность электронных облаков:
 1- изолированных атомов;
 2- при простом сложении;
 3- при обобществлении электронов.

$$U_s = 2E_0 + \frac{K + A}{1 + S^2}$$

$$U_a = 2E_0 + \frac{K - A}{1 - S^2}$$

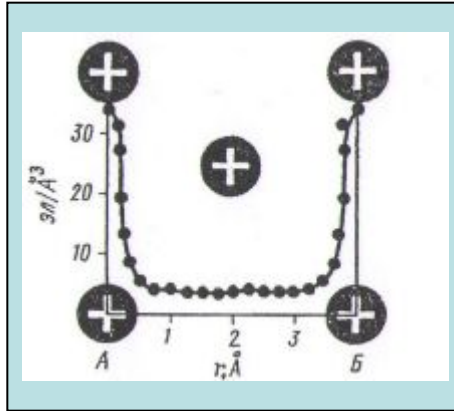


Энергия связи двух атомов водорода в симметричном U_s (2) и антисимметричном U_a (1) состояниях.



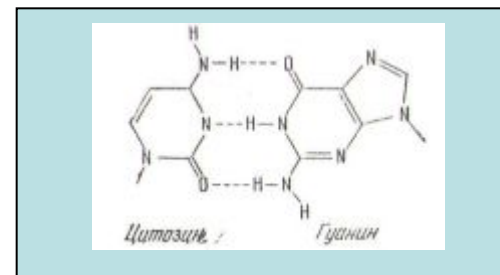
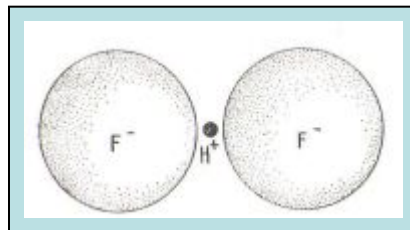
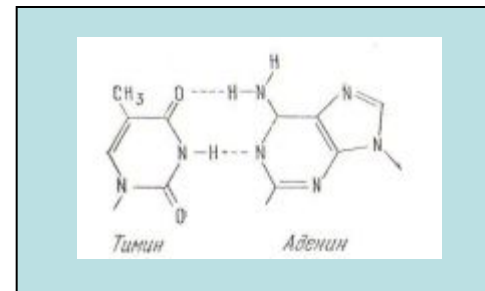
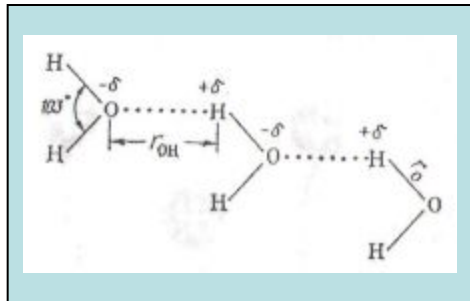
Металлические кристаллы

Металлическая связь



Распределение электронной плотности между узлами кристаллической решетки алюминия.

Водородная связь



Сравнение различных видов СВЯЗИ

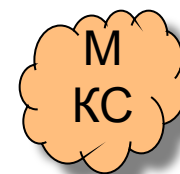
Элемент	<i>Ne</i>	<i>Ar</i>	N_2	O_2	<i>CO</i>	CH_4
$U, 10^3 \text{ Дж / моль}$	1,9	8,4	6,6	8,2	8,4	10,8



Элемент	<i>LiF</i>	<i>NaCl</i>	<i>KCl</i>	<i>RbCl</i>
$U, 10^5 \text{ Дж / моль}$	10,15	7,65	6,95	6,67



Газ	<i>CO</i>	H_2	N_2	O_2
$U, 10^5 \text{ Дж / моль}$	10,8	4,4	9,5	5,0



Кристаллы	алмаз	<i>Si</i>	<i>Ge</i>	
$U, 10^5 \text{ Дж / моль}$	6,8	4,4	3,5	

