第二课：晶体的特性

Friday, August 30, 2019 2:03 AM

1. 晶体的类型和结合力：结合力、键、键合；
   a. 离子键和离子晶体：
      i. 电负性：用于比较不同元素的原子相互作用时彼此拉趣电子能力的大小。电负性的大小可以由原子的电离势能(I)和原子的电子亲和能(Y)的组合来表达；
         1) 电离势能I：原子放弃某一个电子时所消耗的能量；
         2) 电子亲和能Y：原子获得一个电子形成一价负离子时放出的能量；
         3) 当A放弃某个电子时，有：
            $A + B == A^+ + B^-$
            $\Delta E_1 = I_A - Y_B$
         4) 当A获得一个电子时：
            $A + B == A^- + B^+$
            $\Delta E_2 = I_B - Y_A$
         5) 当$\Delta E_1 = \Delta E_2$，有
            $I_A - Y_B = I_B - Y_A$，
            即：
            $I_A + Y_A = I_B + Y_B$，
            即：
            中性原子A和B形成A^+B^-和A^-B^+的倾向相等。即A和B的电负性相等；
         6) 当$\Delta E_1 > \Delta E_2$，有
            $I_A + Y_A > I_B + Y_B$，
            即：
            中性原子A和B形成A^-B^+所需的能量相对较低，生成的倾向即A的电负性比B大；
         7) 当$\Delta E_1 < \Delta E_2$，有
            $I_A + Y_A < I_B + Y_B$，
            即：
            中性原子A和B形成A^+B^-所需的能量相对较低，生成的倾向即B的电负性比A大；
         8) 因此可以使用I+Y来表示原子的电负性的相对大小，有人建议用X=K(I+Y)表示电负性。K为常数，若使Li原子的电负性定义为1，则K=0.18eV，故有X=0.18(I+Y)；
         9) 若组成晶体的两种元素电负性之差比较大，即$\Delta X > 1.5$，当两者相互作用时，价电子将几乎全部被电负性较大的原子占有，将形成离子键；
      ii. 离子键：
         1) 特点：没有饱和性和方向性；
         2) 离子晶体：一般具有硬度大、熔点较高、熔融后能导电以及许多离子晶体能溶于极性溶剂等特点；

离子晶体能溶于极性溶剂等特点；

b. 共价键和共价晶体：
   i. 同种元素原子之间或夺取电子能力相近的两种元素的原子之间相互作用时，即$\Delta X < 1.5$，原子通过公用电子对的方式相结合；
   ii. 共价键分为非极性共价键和极性共价键；
   iii. 杂化轨道：
      1) 在成健过程中，由于原子间的相互影响，同一原子的几个能量相近的不同类型的原子轨道（波函数），可以进行线性组合，重新分配能量和确定空间方向，组成数目相等的新原子轨道，这种能够轨道重新组合的方式称为杂化（hybridizaion），杂化后形成的新轨道称为杂化轨道（hybrid orbital）；
      2) 杂化轨道的角度函数在某个方向的值比杂化前的大得多，更有利于原子轨道间最大程度的重叠，杂化轨道比原来轨道的成键能力强；
      3) 杂化轨道之间力图在空间取最大的夹角分布，使相互间的排斥能最小，形成的键较稳定。不同类型的杂化轨道之间夹角不同，成键后形成的分子具有不同的空间构型；
   iv. 共价键的特点：方向性、饱和性；
   v. 共价键晶体的特点：熔点和硬度一般比较高，常温下纯净的共价晶体一般不导电；

c. 金属键和金属晶体：
   i. 电子气：金属原子的电负性较小，原子对外层电子的吸引作用较低，因此金属原子之间相互作用时既不能形成离子键，也不能形成共价键，而是采取核外电子公有化。游离出来的价电子为全部阳离子所有，称为“电子气”；
   ii. 金属键：电子气和阳离子之间的相互作用，形成金属键；
   iii. 金属晶体特点：有良好的导电性和延展性；

d. 分子键和分子晶体：
   i. 分子晶体：由分子间作用力(范德华力)构成的晶体称为分子晶体；
   ii. 范德华力：
      1) 静电力(葛生力)：极性分子间相互作用；
      2) 诱导力(德拜力)：极性分子和非极性分子间相互作用；
      3) 色散力(伦敦力)：非极性分子间的相互作用力；
      4) 分子晶体的电子云：因为存在热运动，电子云的分布并不是始终都是均匀的。电子云分布的瞬间不均匀形成瞬间偶极矩；
      5) 分子键特点：作用力比较弱；
      6) 分子晶体的特点：一般硬度小熔点低；

e. 氢键和氢键型晶体：
   i. 氢键：具有-OH、-NH基的分子或HF分子间会产生另外一种分子 间作用力。O、N、F电负性大，O-H、N-H沿键轴方向间存在 较大的极性及电偶极矩，H原子半径小，易伸入N、O原子的 电子壳中去，彼此产生较强的静电吸引；
   ii. 氢键的特点：有饱和性和方向性，但作用力比较弱；
   iii. 氢键型晶体的特点：配位数低、密度小、熔点低；

f. 混合价键型晶体；