Дәріс 11.
Атомдық және иондық радиустар. Координациялық сан және координациялық көпжақ

Дәріскер: х.ғ.к., доцент

Кудьярова Ж.Б.

Дәрістің мақсаты: студенттерді атомдық және иондық радиустармен және олардың өзгеру заңдылықтарымен таныстыру. Координациялық сан және координациялық көпжақты құрылымда табуды үйрету.

Дәрісте қарастырылатын сұрақтар:

1) Атомдық радиустар
2) Иондық радиустар
3) Атом немесе ионның эффективті радиусы
4) Периодтық жүйеде атомдық және иондық радиустардың өзгеру заңдылықтары
5) Координациялық сан және координациялық көпжақтар
6) Нақты құрылымдарда координациялық сан және координациялық көпжақтарды табу.

Кристалдарды құраушы атомдар мен иондардың өзара әсер күштері бірдей емес, олай болса олардың ара қашықтығы да бірдей емес, сондықтан кристалдардың құрылымы да бірдей болмайды.

Демек, химиялық құрамы әр түрлі заттардың кристалдық құрылымы да әр түрлі болады.

Кристалдық құрылымның ең басты элементі — бөлшектердің ара қашықтығы. Ара қашықтықты табу үшін әрбір атомның немесе ионның айналасында өзі әсер ететін меншікті өрісі бар деп есептеледі. Осындай меншікті әсер өрісін ***атомдық*** немесе ***иондық сфера*** деп атайды. Ал, оның радиусын атомдық немесе иондық радиус дейді. Сонымен, әрбір атомның (ионның) центрі көршілес атомның (ионның) сфера бетіне ең жақын келетін ара қашықтығы (немесе өрісі) атомдық (иондық) радиус болып табылады.

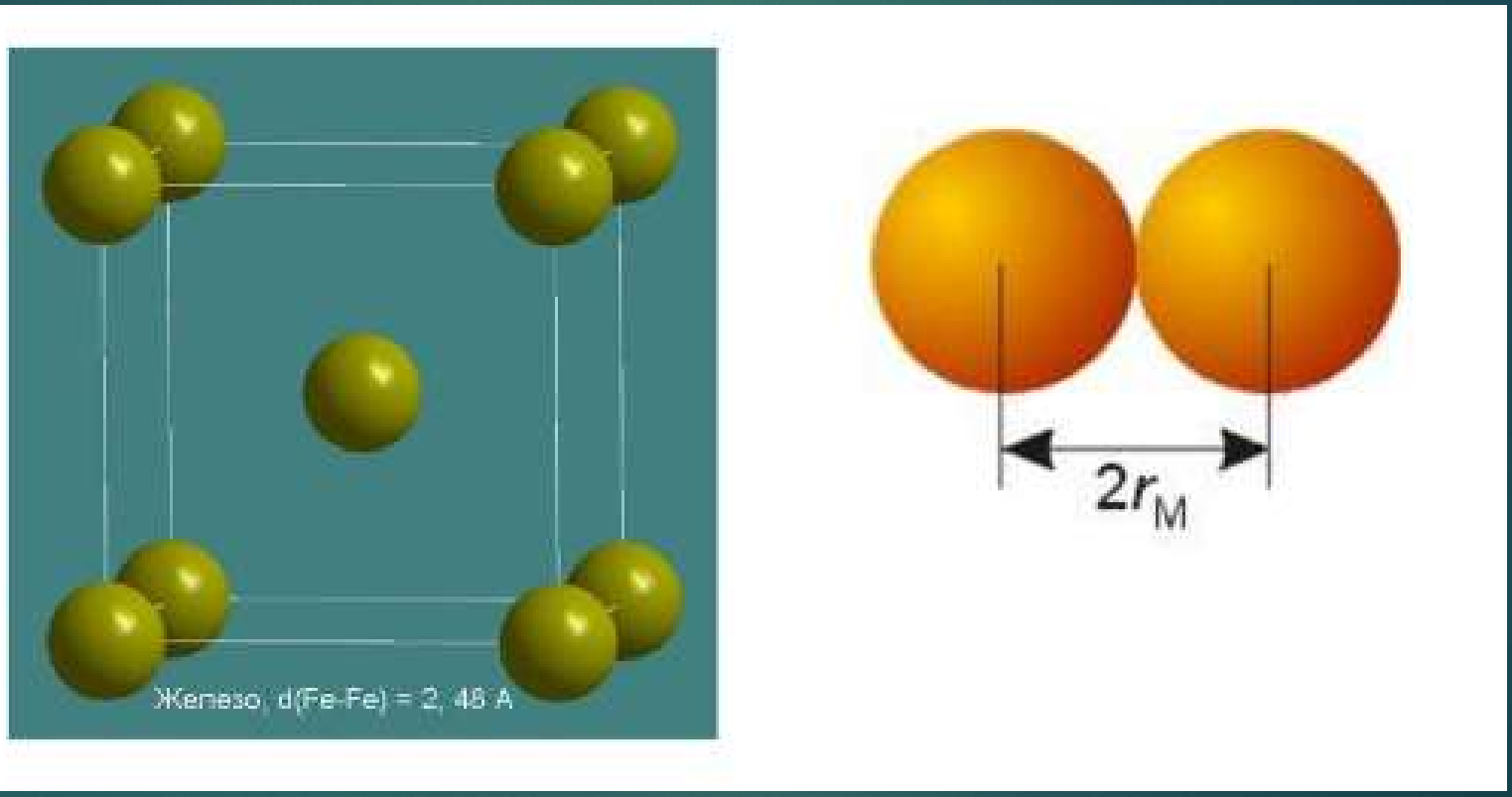
Кристалдық құрылымдардың айырмашылығы мен түрлері заттардың химиялық табиғатына, атомдардың немесе иондардың өлшеміне және олардың арасындағы байланыс күштеріне тәуелді болады.

Атомның немесе ионның әсер ету сферасының радиусы оның **эффективті радиусы** деп аталады, бұл жерде атом (ион) сығылмайтын шар деп қарастырылады. Планетарлық модель бойынша атом ядродан және оның айналысында орбиталарымен қозғалатын электрондардан тұрады. Менделеевтің периодтық жүйесінде элементтердің реті электрондық қабаттардың толу ретіне сәйкес болады.

Эффективті радиус шамасын анықтау үшін кристалл құрылымындағы атомдарды (иондарды) жанасатын қатты шарлар деп қарастырады және олардың центрлерінің арасындағы қашықтық радиустардың қосындысына тең болады. Атом және ион радиустары эксперимент жүзінде рентген өлшеулерінен және теория жүзінде кванттық-механикалық есептеу негізінде табылған.

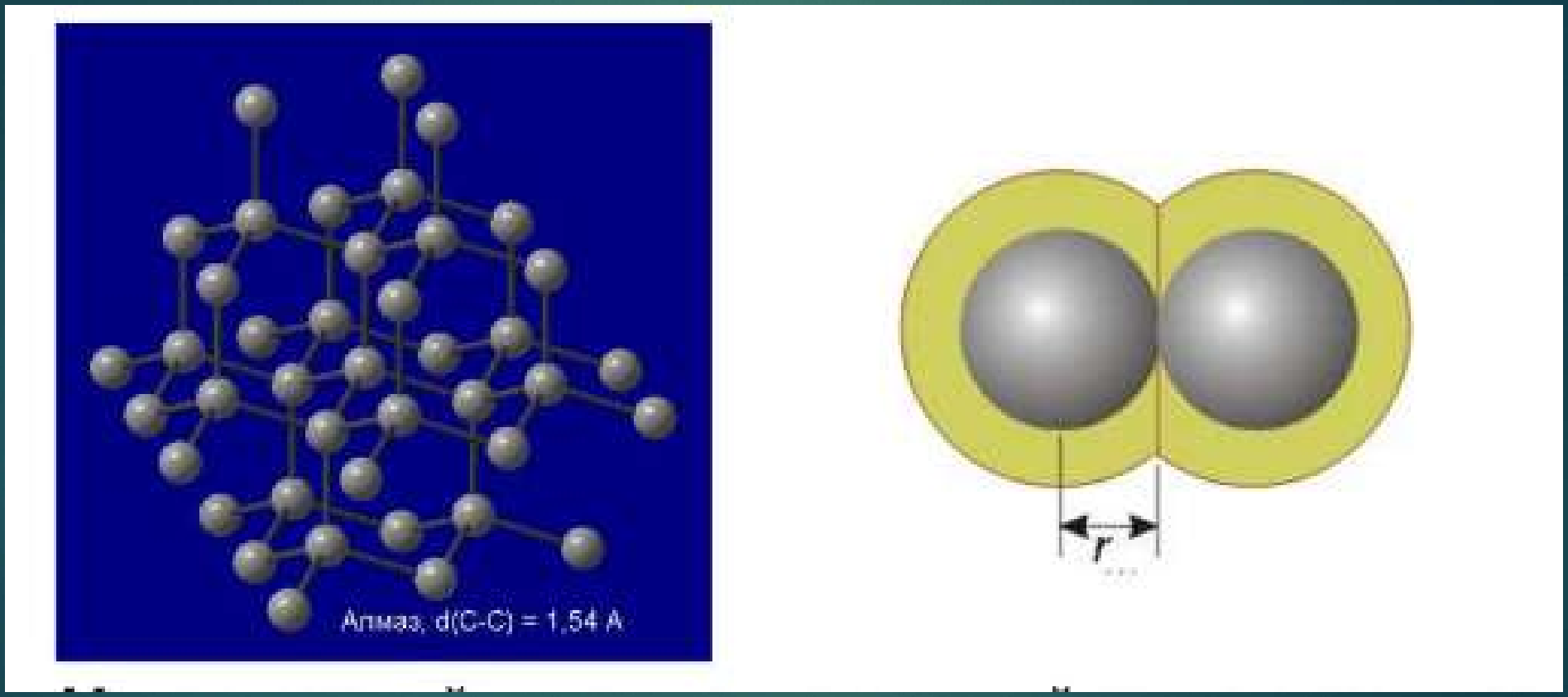
Металдық радиус

Металдық радиус (металдар үшін) - көрші атомдар ядроларының арасындағы жарты арақашықтық



Коваленттік радиус

Коваленттік радиус (бейметалдар үшін) - көрші атомдар ядроларының арасындағы жарты арақашықтық



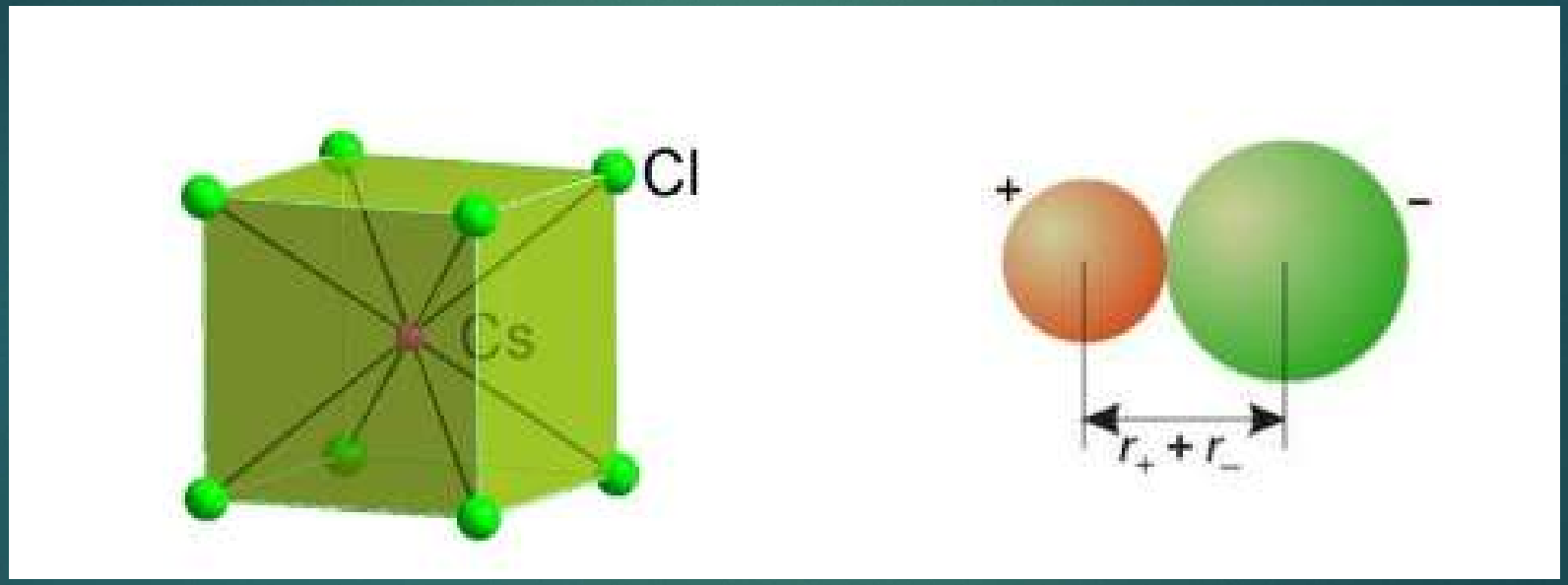
Металдық және коваленттік радиустар атомдық радиустар деп аталады.

Атомдық радиустардың өзгеруі



Иондық радиус

Иондық радиус (иондық қосылыстар үшін, мысалы CsCl) - РҚТ нәтижелері бойынша электрондық тығыздық картасын анықтайды және Cs-Cl түзуі бойындағы электрон тығыздығы ең минималды болатын жерде Cs^+ Cl^- шекарасын анықтайды.



Ион радиустарының өлшемдері келесі заңдылықтарға бағынады:

1. Периодтық жүйенің бір вертикал қатарының ішінде заряды бірдей иондардың радиустары атом нөмірі өскен сайын үлкейеді, өйткені электрондық қабаттар саны өседі және сонымен қатар атом мөлшеріде өседі. Мысалы:

Атом нөмірі	**3**	**11**	**19**	**37**	**55**
Элемент	**Li**	**Na**	**K**	**Rb**	**Cs**
Радиусы, нм	**0.156**	**0.186**	**0.223**	**0.236**	**0.255**
Элемент	**Li^+**	**Na^+**	**K^+**	**Rb^+**	**Cs^+**
Радиусы, нм	**0.070**	**0.098**	**0.133**	**0.152**	**0.170**

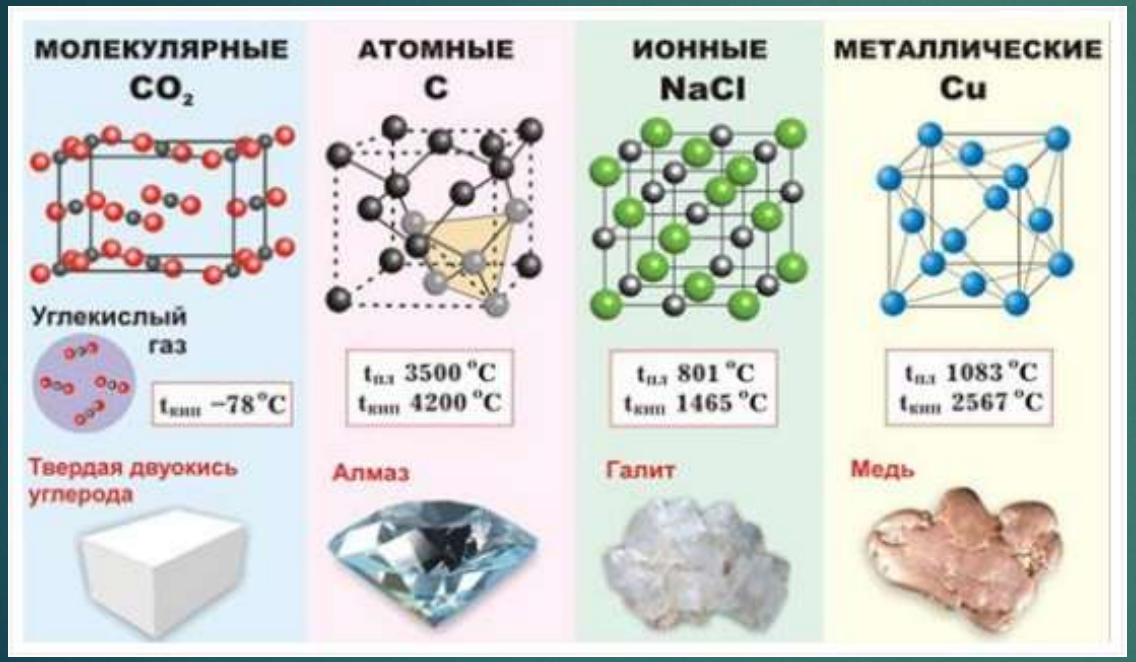
2. Бір элемент үшін иондық радиус теріс заряды үлкейген сайын өседі, ал оң заряды үлкейген сайын кемиді. Анион радиусы катион радиусынан үлкен болады, өйткені анион артық электронға ие болады, ал катионда электрондар жетіспейді. Мысалы:

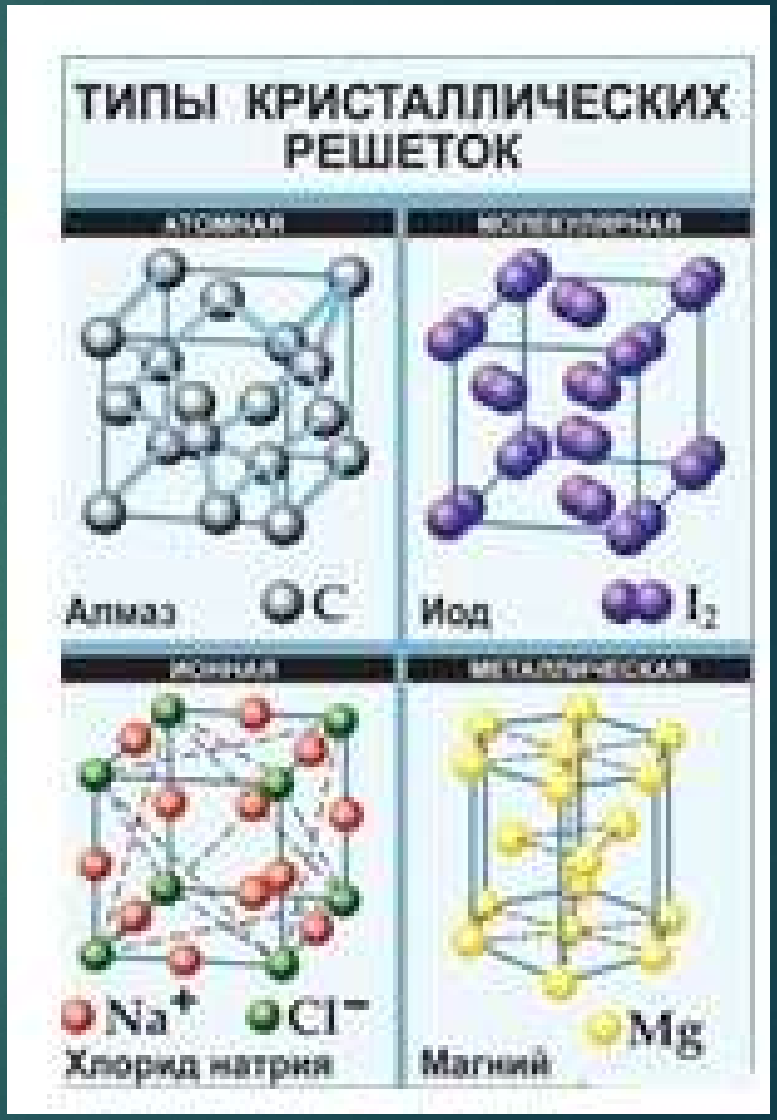
Элемент	Fe	Fe^{2+}	Fe^{3+}	
Радиусы, нм	0.126	0.080	0.067	
Элемент	Si^{4-}	Si	Si^{4+}	
Радиусы, нм	0.198	0.118	0.040	
Элемент	Pb^{4-}	Pb	Pb^{2+}	Pb^{4+}
Радиусы, нм	0.215	0.174	0.118	0.070

3. Атомдар мен иондардың өлшемдері Менделеев жүйесінің периодтығына сәйкес; тек №57 (лантан) элементтен бастап №71 (лютеций) элементке дейінгі элементтер үшін (лантанидтік сығылу деп аталатын) және №89 (актиний) элементтен бастап ары қарай (актинидтік сығылу) атомның нөмірі өскен сайын радиустар керісінше бірқалыпты кемитін құбылыс байқалады.

(Студенттерге тапсырма: *лантаноидтар мен актиноидтар қатарынан 1 элементтің электрондық конфигурациясын толығымен жазып, сығылу процесін түсіндіру)*

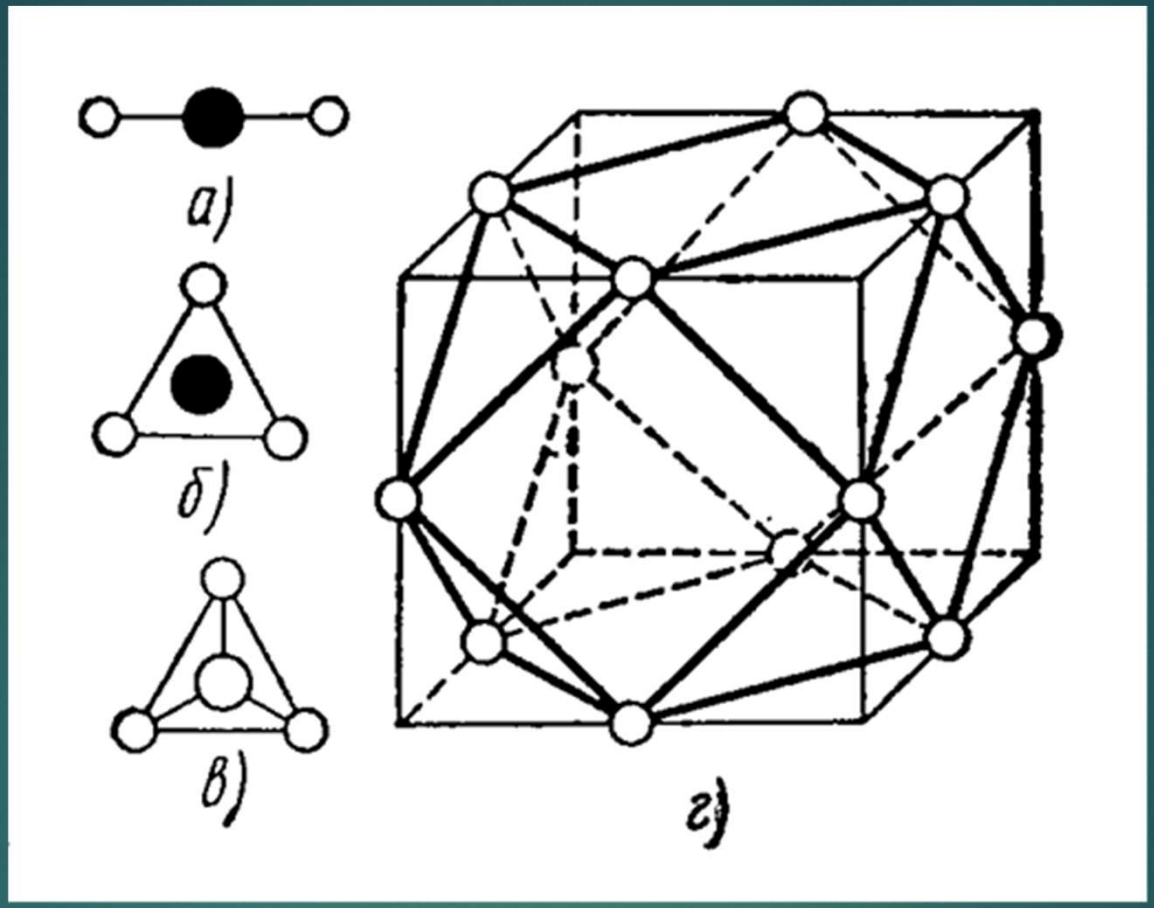
Кристалдық тордың типтері





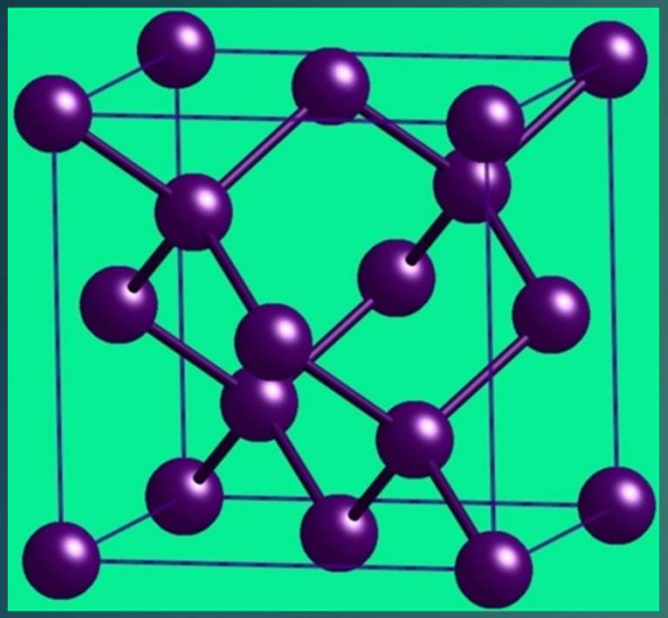
Координациялық сандар және көпжақтар

- **Координациялық сан** – кристалдық тордағы әрбір атомның (ионның) айналасында бірдей қашықтықта орналасқан ең жақын атомдардың (иондардың) саны. Кристалдық тордағы металдар үшін Координациялық сан 8 және 12, ал кешенді қосылыстардағы Координациялық сан 1-ден 12-ге дейін болады. Егер іргелес орналасқан атомдардың (иондардың) арасын өзара түзумен қосса, онда координациялық көпжақ деп аталатын фигура шығады.
- **Көпжақ** – бірнеше (шектеулі) жазық көпбұрыштан құрылған геометриялық бет. Көпжақ құрамындағы көпбұрыштың әрбір қабырғасы оған іргелес екінші көпбұрыштың да қабырғасы болып саналады. Жазық көпбұрыштарды көпжақтың жақтары деп, екі көпбұрыштың ортақ қабырғасын көпжақтың қырлары деп, ал көпбұрыштардың төбелерін көпжақтың төбелері деп атайды. Координациялық көпжақ тұрғызылатын атом көпжақ ортасында орналасады. Координациялық көпжақ кристалдың сыртқы формасымен байланысты емес және оған сәйкес келмейді.
- Металдар үшін координациялық сан 12-ге тең. Жартылай өткізгіш кристалдарда оның мәні 4 немесе 6.

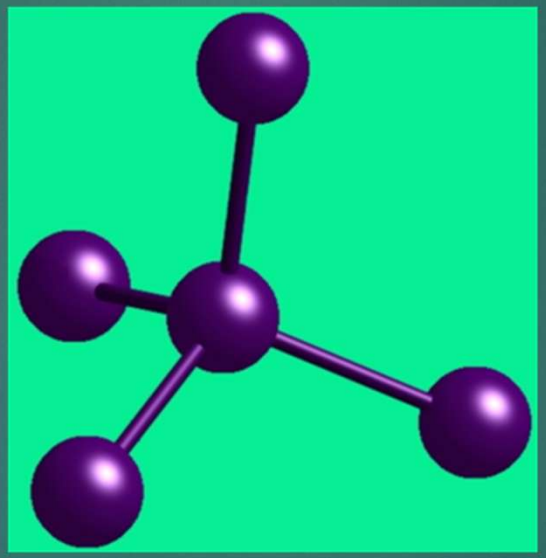


Қарапайым координациялық көпжақтар
а – гантель, К.С.=2;
б – үшбұрыш, К.С.=3;
в – тетраэдр, К.С.=4;
г – гексаэдр К.С.=8

- **Алмаз** құрылымында жақын орналасқан көрші атомдар саны – 4, яғни координациялық сан 4-ке тең. Ал координациялық көпжақ – тетраэдр



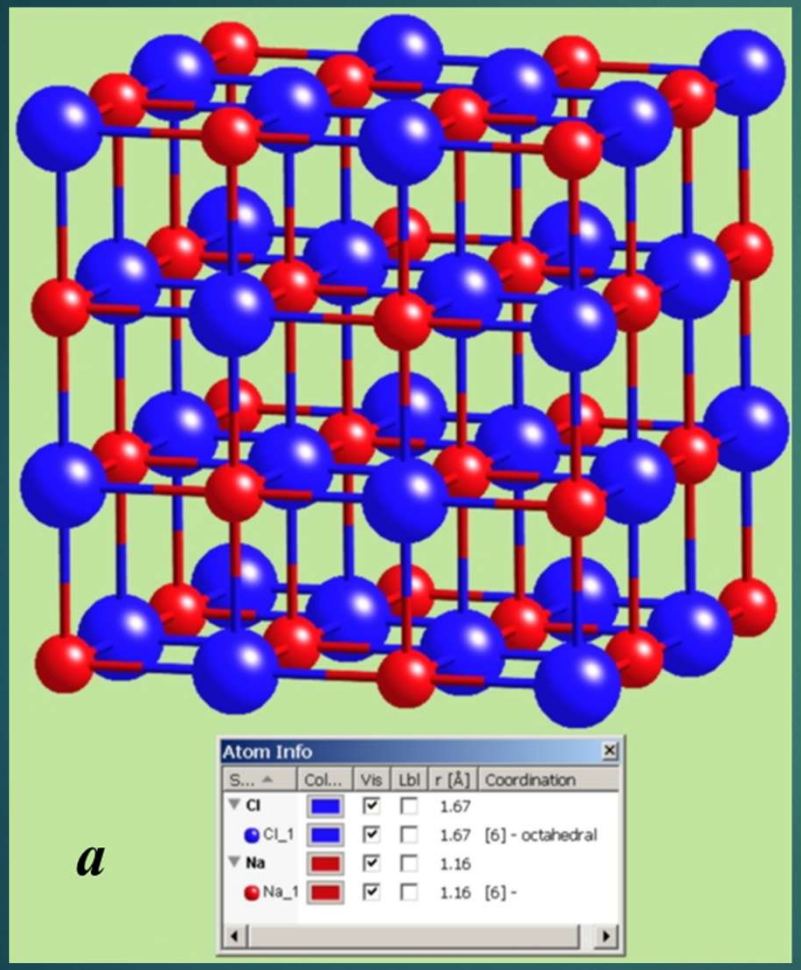
а

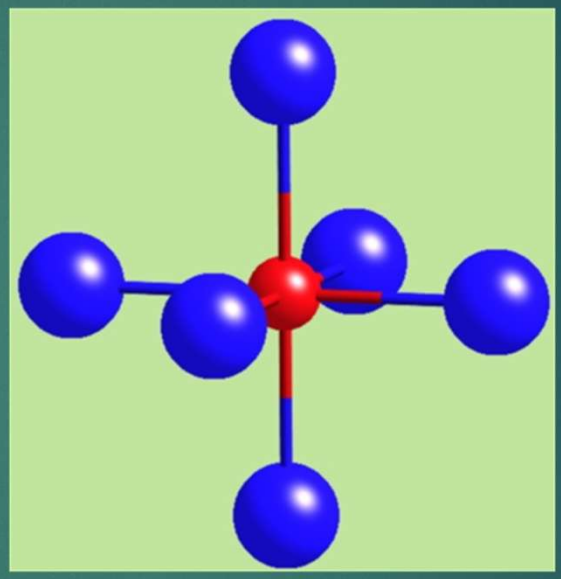


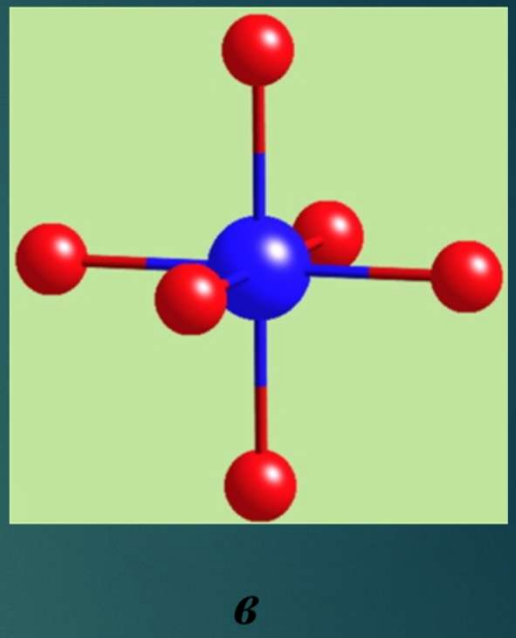
б



Ас тұзының құрылымын қарасақ, әрбір Cl ионы октаэдр төбелерінде орналасқан алты Na ионымен қоршалған. Координациялық сан 6-ға тең, координациялық көпжақ – октаэдр.

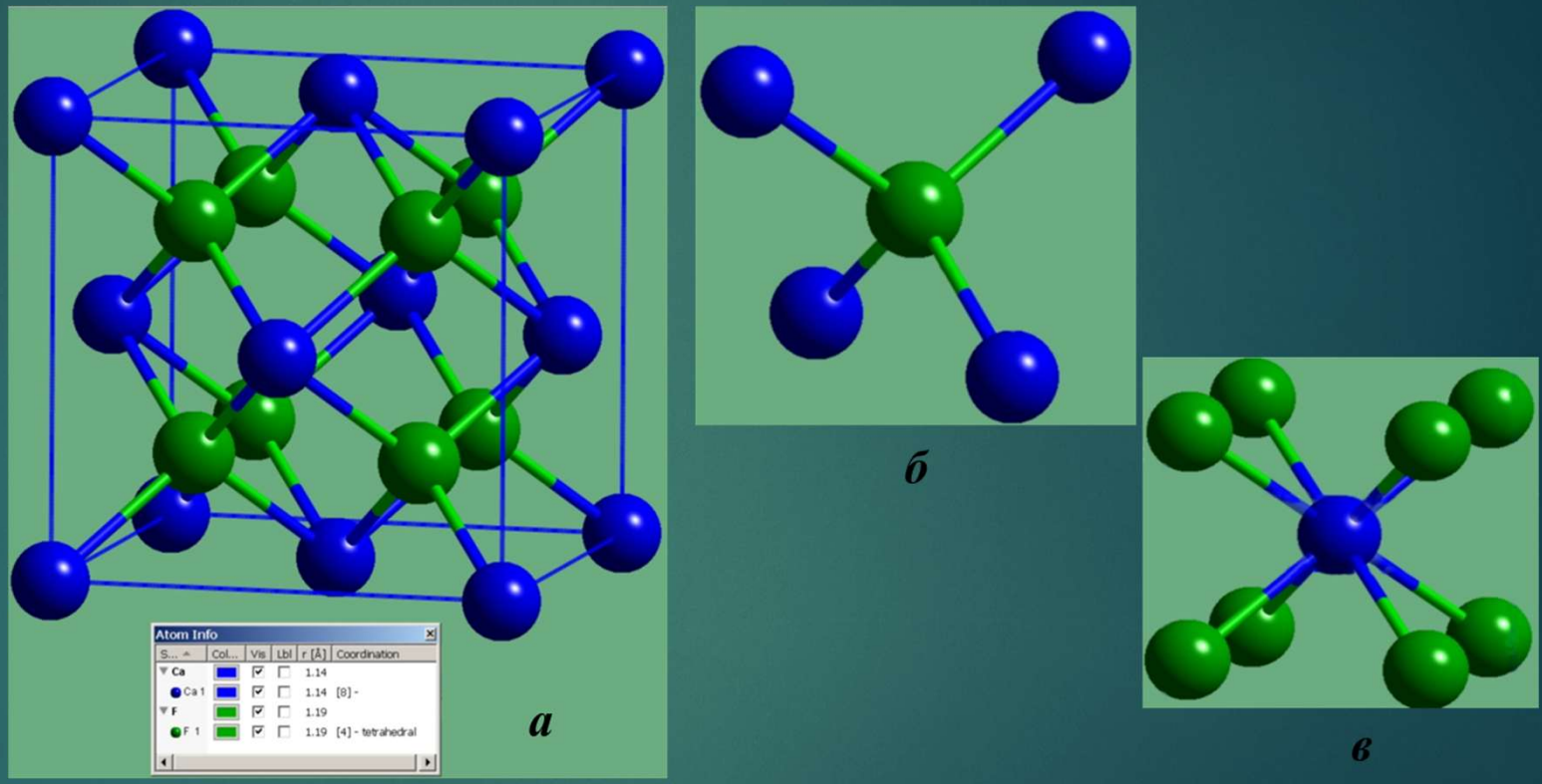






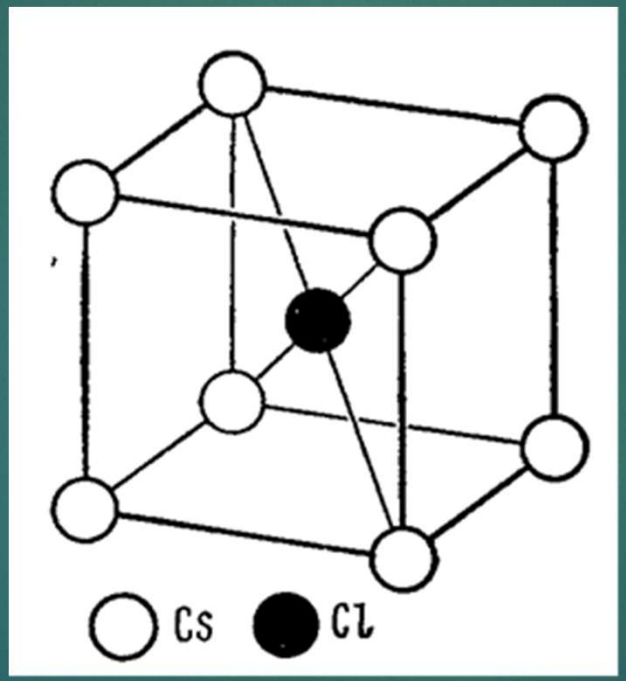
NaCl құрылымындағы элементар ұяшық (а) және координациялық көпжақтар (б, в).

Флюорит CaF_2 құрылымында (6 сур.) кальций ионы 8 фтор иондарымен, ал фтор ионы – 4 кальций иондарымен қоршалған; к.с. $Ca_F = 8$; к.к. – куб; к.с. $F_{Ca} = 4$; к.к. – тетраэдр.

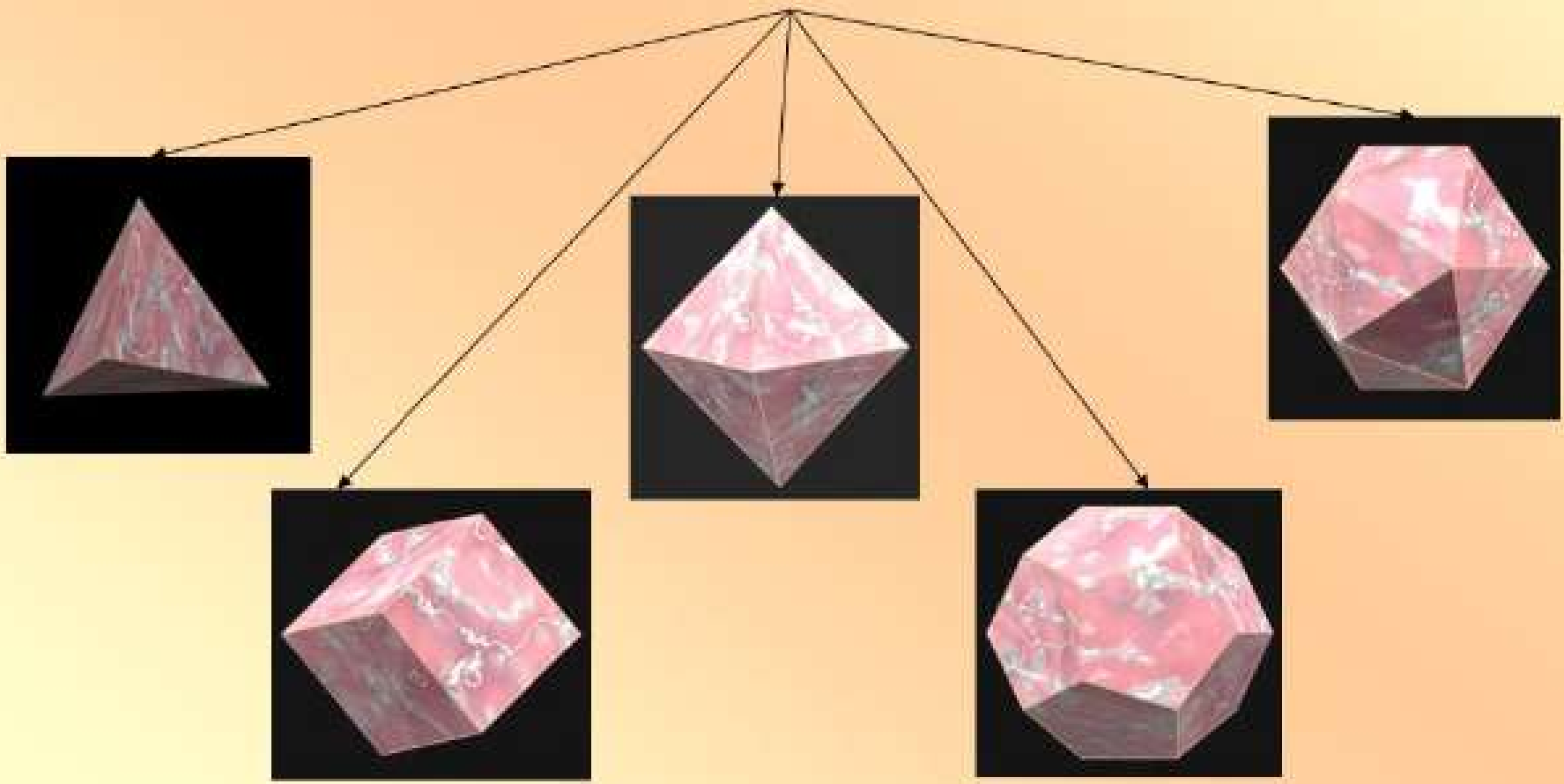


Флюорит CaF2 құрылымындағы элементар ұяшық (а) және координациялық көпжақтар (б, в).

CsCl құрылымының элементарлы ұяшығы

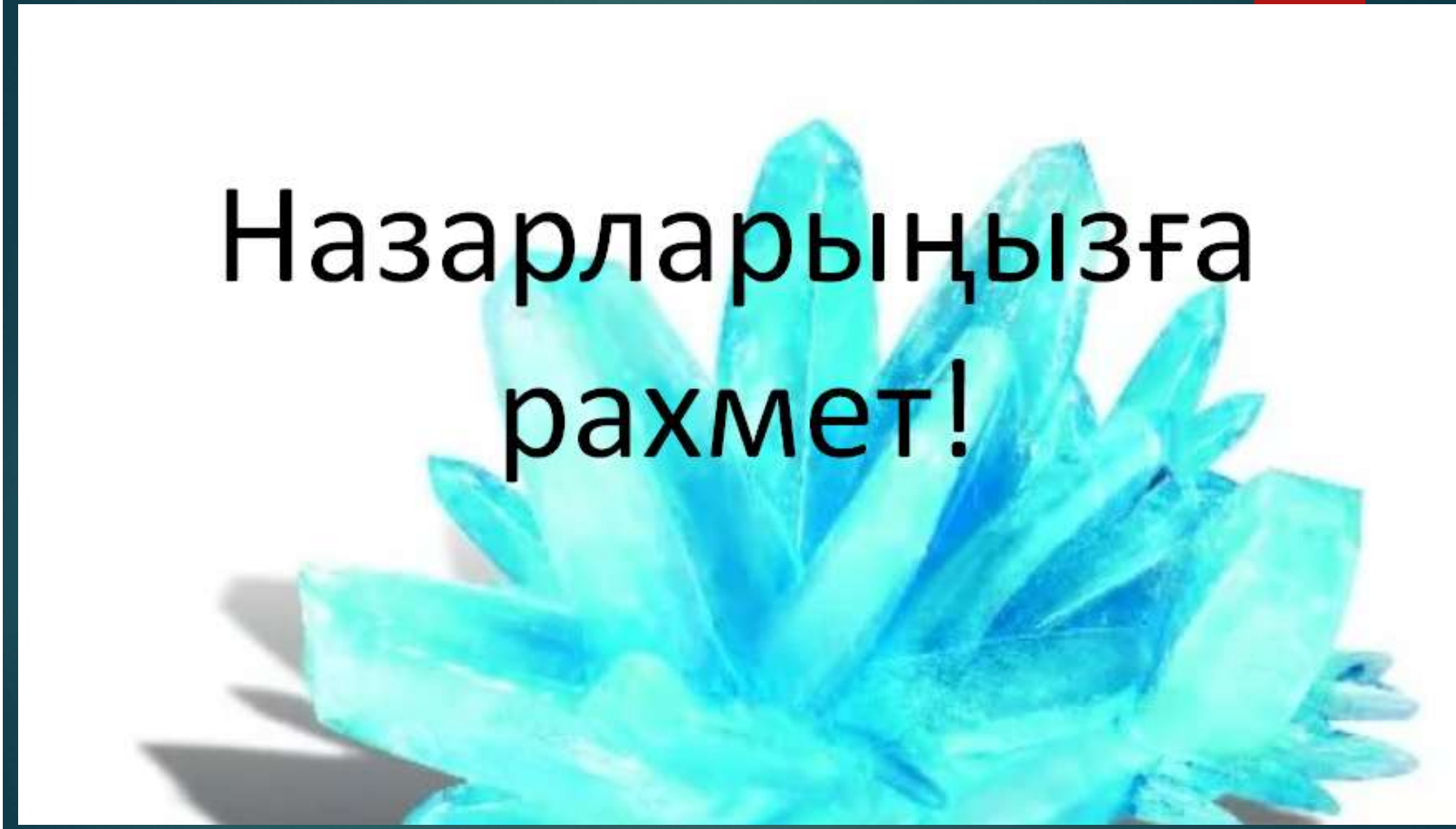


ПРАВИЛЬНЫЕ МНОГОГРАННИКИ



Бақылау сұрақтары:

- Атомдық және иондық радиустар дегеніміз не?
- Атомдық және иондық радиустардың өзгеру заңдылықтарын түсіндіріңіз.
- Координациялық санға анықтама беріңіз.
- Координациялық көпжақтарды сипаттап, мысалдар келтіріңіз.


Назарларыңызға
рахмет!