

Компьютерный дизайн новых материалов

Артем Р. Оганов (Сколтех и МИСиС, Россия)

Лекция 3: Введение в кристаллографию: связь структуры и свойств

Физические свойства кристаллов, их тензорное описание и связь с кристаллической структурой.

Тензорное описание физических свойств кристаллов

Упругие постоянные.

- $K = -V(dP/dV)$ (несжимаемость, модуль сжатия) – простейшее упругое свойство. Описывает сжатие под малым изотропным давлением.
- Упругий тензор C_{ijkl} описывает деформацию под произвольным малым напряжением.
- C_{ijkl} – тензор 4го ранга, содержит 81 компоненту.
- Обозначения Фохта: $C_{ijkl} \rightarrow C_{ij}$. Симметричная матрица 6×6 , содержит до 21 независимой компоненты.
- Симметрия сокращает это число – например, до 3 для кубических кристаллов.

Упругие постоянные.

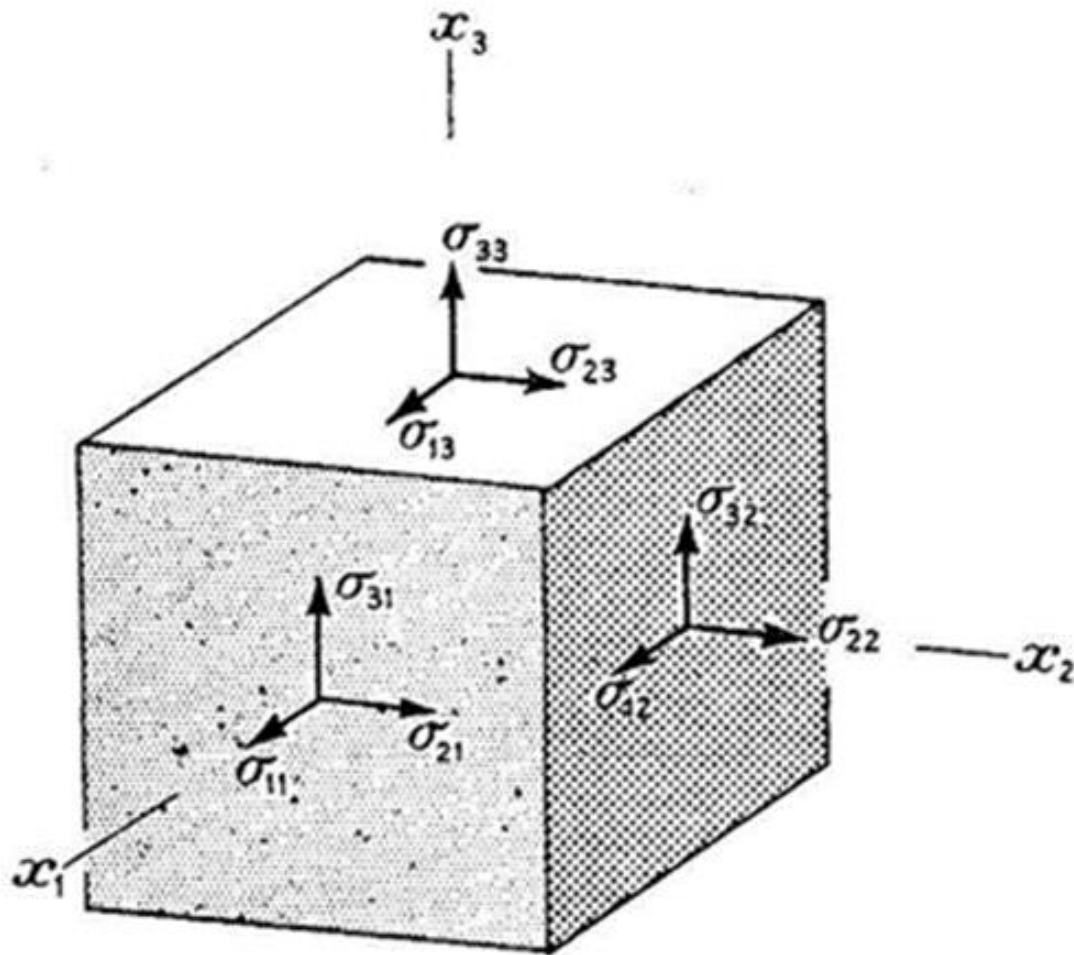


FIG. 5.1. The forces on the faces of a unit cube in a homogeneously stressed body.

- Обобщенный закон Гука:

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} e_{kl} ,$$

где σ_{ij} тензор напряжений,
 e_{kl} - тензор деформаций.

- В обозначениях Фохта:

$$\sigma_i = C_{ij} e_j$$

- Кубические кристаллы,
деформация вдоль оси x
(e_1):

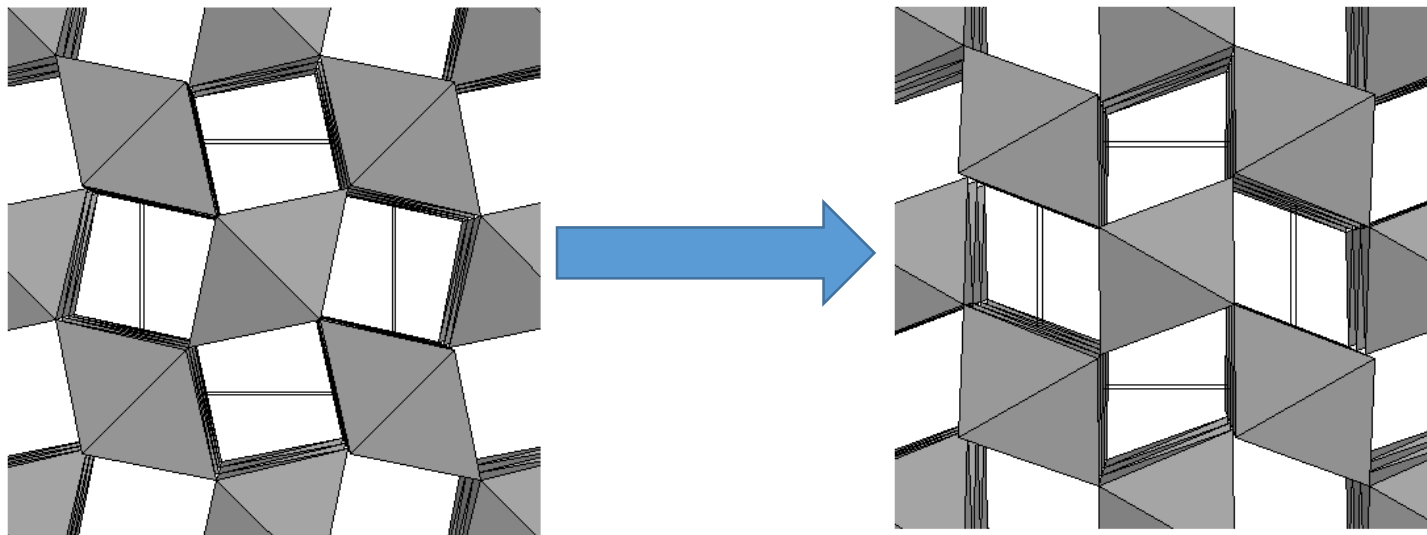
$$\sigma_1 = C_{11} e_1$$

$$\sigma_2 = C_{12} e_1$$

Механическая (не)стабильность.

- Стабильные кристаллы: матрица C_{ij} положительная определенная.
- В противном случае, скорость звука падает до нуля и становится мнимой, и происходит ферроупругий/сегнетоупругий фазовый переход.
- Пример:

Стишовит (SiO_2) при высоких давлениях переходит в структуру типа CaCl_2 .



Тензоры 1го ранга.

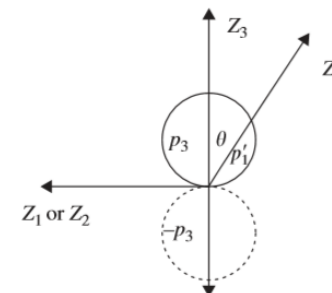
Пироэлектричество

$$P_i = D_i = p_i \delta T \text{ [C/m}^2\text{]}$$

$$D'_i = a_{ij} D_j$$

$\delta T' = \delta T$. Тензор нулевого ранга
(скаляр)

Турмалин,
точечная
группа $3m$



Пироэлектричество исчезает в
центросимметричных кристаллах

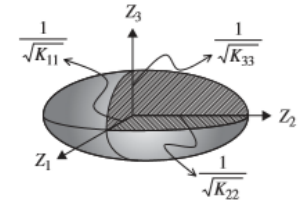
$$(p') = \begin{pmatrix} p'_1 \\ p'_2 \\ p'_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p_1 \\ p_2 \\ p_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -p_1 \\ -p_2 \\ -p_3 \end{pmatrix} = -(p).$$

Из принципа
Неймана

$$\begin{pmatrix} -p_1 \\ -p_2 \\ -p_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p_1 \\ p_2 \\ p_3 \end{pmatrix}$$

$$p_1 = p_2 = p_3 = 0$$

Тензоры 2го ранга.



Диэлектрические
постоянные

$$D_i = \varepsilon_{ij} E_j.$$

Диэлектрический тензор для кубических
кристаллов сводится к скаляру

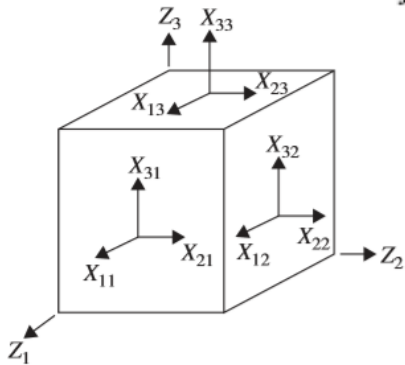
<i>Triclinic crystals</i> Classes 1 and $\bar{1}$ Six coefficients	$\begin{pmatrix} K_{11} & K_{12} & K_{13} \\ K_{12} & K_{22} & K_{23} \\ K_{13} & K_{23} & K_{33} \end{pmatrix}$
<i>Monoclinic crystals</i> Classes 2, m , and $2/m$ Four coefficients	$\begin{pmatrix} K_{11} & 0 & K_{13} \\ 0 & K_{22} & 0 \\ K_{13} & 0 & K_{33} \end{pmatrix}$
<i>Orthorhombic crystals</i> Classes 222 , $mm2$, and mmm Three coefficients	$\begin{pmatrix} K_{11} & 0 & 0 \\ 0 & K_{22} & 0 \\ 0 & 0 & K_{33} \end{pmatrix}$
<i>Uniaxial crystals</i> Classes 3, $\bar{3}$, 32 , $3m$, $\bar{3}m$, 4, $\bar{4}$, $4/m$, 422 , $4mm$, $\bar{4}2m$, $4/mmm$, 6, $\bar{6}$, $6/m$, 622 , $6mm$, $\bar{6}m2$, and $6/mmm$ Curie groups ∞ , ∞m , ∞/m , $\infty 2$, and ∞/mm Two coefficients	$\begin{pmatrix} K_{11} & 0 & 0 \\ 0 & K_{11} & 0 \\ 0 & 0 & K_{33} \end{pmatrix}$
<i>Cubic crystals</i> Classes 23 , $m\bar{3}$, 432 , $\bar{4}3m$ and $m\bar{3}m$ Curie groups $\infty\infty\infty$ and $\infty\infty\infty m$ One coefficient	$\begin{pmatrix} K_{11} & 0 & 0 \\ 0 & K_{11} & 0 \\ 0 & 0 & K_{11} \end{pmatrix}$

Тензоры 2го ранга.

Напряжение и деформация

$$(X_{ij}) = \begin{pmatrix} X_{11} & X_{12} & X_{13} \\ X_{12} & X_{22} & X_{23} \\ X_{13} & X_{23} & X_{33} \end{pmatrix} \text{ [N/m}^2\text{]} \quad \text{Тензор напряжений}$$

$$X'_{ij} = a_{ik}a_{jl}X_{kl}$$



9 компонент
тензора
напряжений (3
растяжения и 6
сдвиговых)

Примеры частных случаев

$$\begin{pmatrix} X_{11} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} X_1 = X_{11} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \cdot \text{Одноосное напряжение}$$

$$\begin{pmatrix} X_{11} & 0 & 0 \\ 0 & X_{22} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} X_1 = X_{11} \\ X_2 = X_{22} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \cdot \text{Двуосное напряжение}$$

$$\begin{pmatrix} -p & 0 & 0 \\ 0 & -p & 0 \\ 0 & 0 & -p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -p \\ -p \\ -p \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \cdot \text{Гидростатическое давление}$$

Тензоры 2го ранга.

Напряжение и деформация

Тензор деформаций симметричен

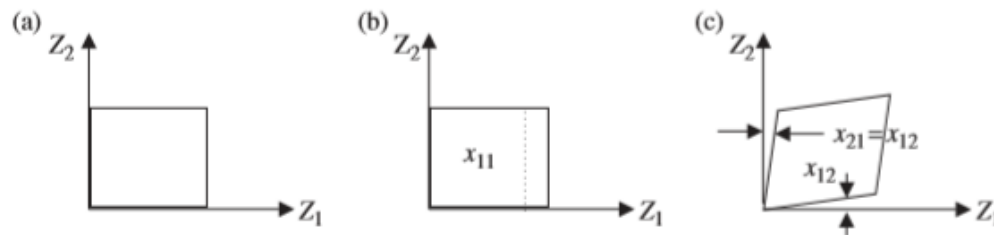
$$u_i = x_{ij}Z_j. \quad (x_{ij} = x_{ji})$$

$$(x_{ij}) = \frac{\delta u_i}{\delta Z_j} = \begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & x_{13} \\ x_{12} & x_{22} & x_{23} \\ x_{13} & x_{23} & x_{33} \end{pmatrix}$$

symmetric

second rank tensor

The stress and strain matrix transformations are often used in working with higher rank tensor properties such as piezoelectricity and elasticity.



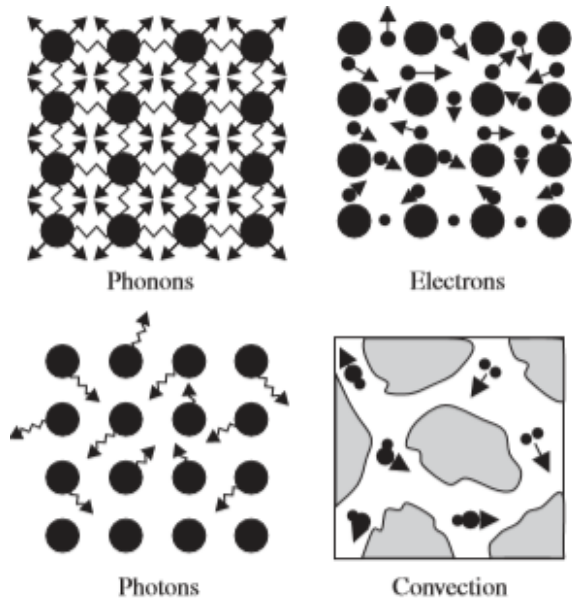
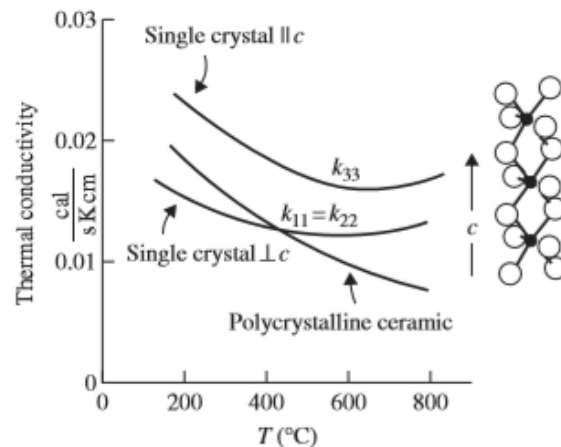
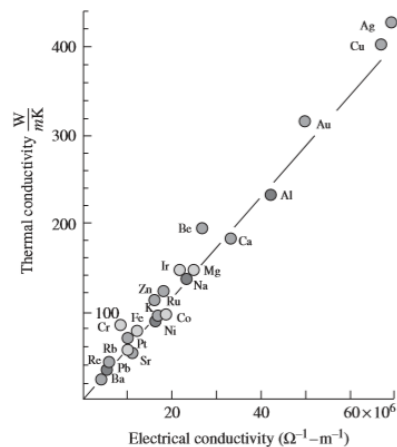
(a) an unstrained solid, (b) tensile strain x_{11} , (c) shear strain $x_{12} = x_{21}$.

Тензоры 2го ранга.

Теплопроводность -

Количественная мера скорости переноса тепла по градиенту температуры

$$h_i = -k_{ij} \left(\frac{dT}{dz_j} \right) \quad k_{ij} = k_{ji}. \text{ Симметричный тензор}$$

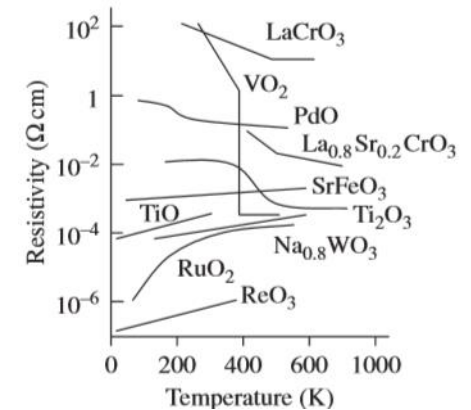
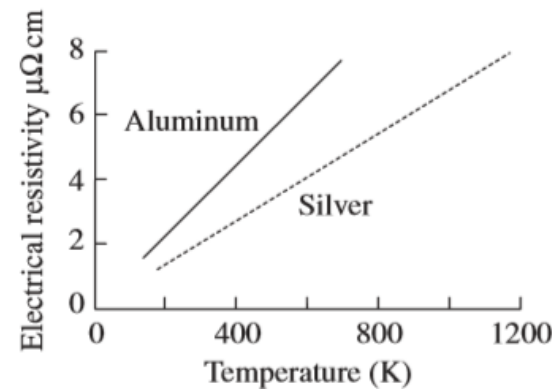
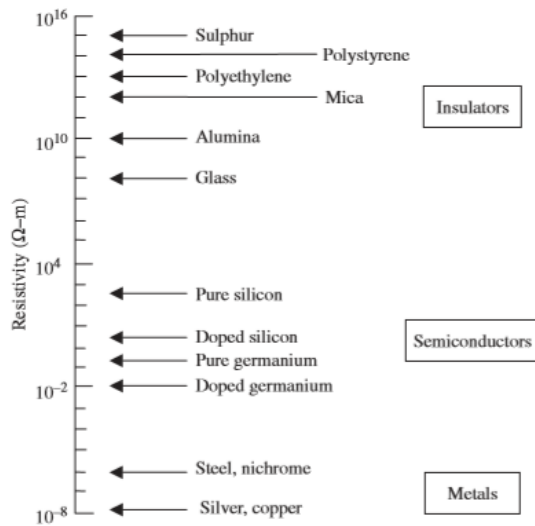


Механизмы теплопроводности в твердых телах

Тензоры 2го ранга.

Электрическое сопротивление и электропроводность - симметричные тензоры

$$E_i = \rho_{ij} J_j \quad J_i = \sigma_{ij} E_j$$



Электропроводность металлов падает с ростом температуры, электропроводность полупроводников и диэлектриков – растет с температурой

Тензоры 3го ранга.

Пьезоэлектричество

$$P'_i = a_{ij}d_{jkl}a_{mk}a_{nl}X'_{mn} = d'_{imn}X'_{mn}$$

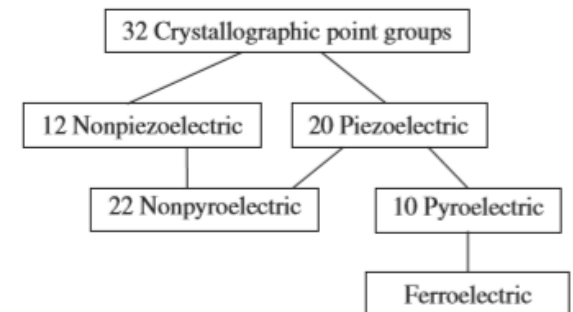
$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & d_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & d_{15} & 0 & 0 \\ d_{31} & d_{31} & d_{33} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$3^3 = 27$ Компонент тензора, но в силу симметричности тензора напряжений имеем только 18 независимых компонент

$$(d') = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d_{11} & d_{12} & d_{13} & -d_{14} & d_{15} & -d_{16} \\ d_{21} & d_{22} & d_{23} & -d_{24} & d_{25} & -d_{26} \\ d_{31} & d_{32} & d_{33} & -d_{34} & d_{35} & -d_{36} \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} -d_{11} & -d_{12} & -d_{13} & +d_{14} & -d_{15} & +d_{16} \\ +d_{21} & +d_{22} & +d_{23} & -d_{24} & +d_{25} & -d_{26} \\ -d_{31} & -d_{32} & -d_{33} & +d_{34} & -d_{35} & +d_{36} \end{pmatrix}.$$

Для полярных сегнетоэлектрических керамик и других материалов с точечной группой ∞m , пьезоэлектрическая матрица содержит 5 компонент, 3 из которых независимы



Пьезоэлектрическая матрица для точечной группы 2 имеет только 8 ненулевых компонент!

Примеры: сахароза ($C_{12}H_{22}O_{11}$) и сульфат триглицина $TGS = (NH_2CH_2COOH)_3 \cdot H_2SO_4$

Тензоры 3го ранга.

Пьезоэлектрические матрицы для кристаллографических и предельных точечных группing point groups

Point groups $\bar{1}$, $2/m$, mmm , $\bar{3}$, $\bar{3}m$, $4/m$,
 $4/mmm$, $6/m$, $6/mmm$, $m\bar{3}$, 432 ,
 $m\bar{3}m$, ∞/m , ∞/mm , $\infty\infty$, $\infty\infty m$

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Point group 1

$$\begin{pmatrix} d_{11} & d_{12} & d_{13} & d_{14} & d_{15} & d_{16} \\ d_{21} & d_{22} & d_{23} & d_{24} & d_{25} & d_{26} \\ d_{31} & d_{32} & d_{33} & d_{34} & d_{35} & d_{36} \end{pmatrix}$$

(18)

Point group 2

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & d_{14} & 0 & d_{16} \\ d_{21} & d_{22} & d_{23} & 0 & d_{25} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & d_{34} & 0 & d_{36} \end{pmatrix}$$

(8)

Point group m

$$\begin{pmatrix} d_{11} & d_{12} & d_{13} & 0 & d_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & d_{24} & 0 & d_{26} \\ d_{31} & d_{32} & d_{33} & 0 & d_{35} & 0 \end{pmatrix}$$

(10)

Point group $mm2$

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & d_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & d_{24} & 0 & 0 \\ d_{31} & d_{32} & d_{33} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

(5)

Point group 222

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & d_{14} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & d_{25} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & d_{36} \end{pmatrix}$$

(3)

Point group 3

$$\begin{pmatrix} d_{11} & -d_{11} & 0 & d_{14} & d_{15} & -2d_{22} \\ -d_{22} & d_{22} & 0 & d_{15} & -d_{14} & -2d_{11} \\ d_{31} & d_{31} & d_{33} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

(6)

Point group 32

$$\begin{pmatrix} d_{11} & -d_{11} & 0 & d_{14} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -d_{14} & -2d_{11} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

(2)

Point group $3m$

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & d_{15} & -2d_{22} \\ -d_{22} & d_{22} & 0 & d_{15} & 0 & 0 \\ d_{31} & d_{31} & d_{33} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

(4)

Point group 4, 6, ∞

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & d_{14} & d_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & d_{15} & -d_{14} & 0 \\ d_{31} & d_{31} & d_{33} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

(4)

Point group $\bar{4}$

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & d_{14} & -d_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & d_{25} & d_{14} & 0 \\ d_{31} & -d_{31} & 0 & 0 & 0 & d_{36} \end{pmatrix}$$

(3)

Point group $4mm$, $6mm$, ∞m

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & d_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & d_{15} & 0 & 0 \\ d_{31} & d_{31} & d_{33} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

(3)

Point group 422, 622, $\infty 2$

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & d_{14} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -d_{14} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

(1)

Point group $\bar{4}2m$

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & d_{14} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & d_{14} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & d_{36} \end{pmatrix}$$

(2)

Point group $\bar{6}$

$$\begin{pmatrix} d_{11} & -d_{11} & 0 & 0 & 0 & -2d_{22} \\ -d_{22} & d_{22} & 0 & 0 & 0 & -2d_{11} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

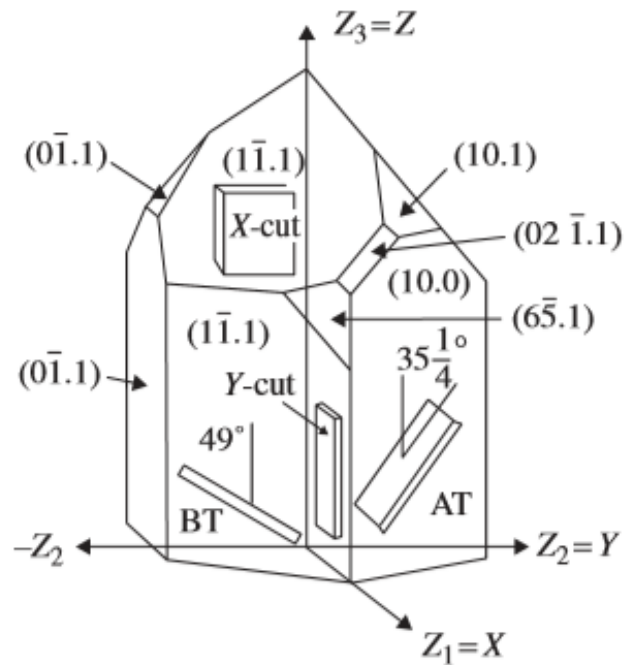
(2)

Point group $\bar{6}m2$

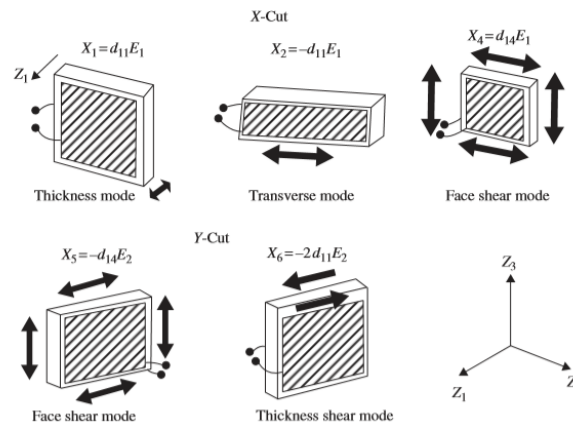
$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -2d_{22} \\ -d_{22} & d_{22} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

(1)

Тензоры 3го ранга.



Правый кристалл кварца



Электроиндуцированные
моды колебаний X- и Y-
срезов кварца



Кварц

- 5 ненулевых
пьезоэлектрических
коэффициентов

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \\ x_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_{11} & 0 & 0 \\ -d_{11} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ d_{14} & 0 & 0 \\ 0 & -d_{14} & 0 \\ 0 & -2d_{11} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_1 \\ E_2 \\ E_3 \end{pmatrix}$$

Тензоры 3го ранга.

Пьезомагнетизм

магнитный аналог
пьезоэлектричества

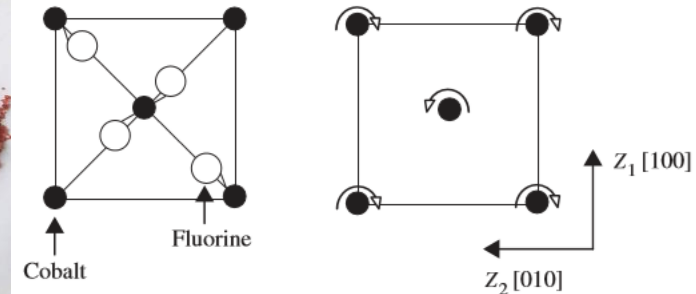
$$I'_i = \pm |a| a_{ij} I_j = \pm |a| a_{ij} Q_{jkl} X_{kl}$$

$$= \pm |a| a_{ij} a_{mk} a_{nl} Q_{jkl} X'_{mn} = Q'_{imn} X'_{mn}$$

$$Q'_{imn} = \pm |a| a_{ij} a_{mk} a_{nl} Q_{jkl}. \text{ тензор третьего ранга}$$



фторид
кобальта (CoF_2)



Кристаллическая и
магнитная структура
ниже $T_N = 38 \text{ K}$

1, $\bar{1}$

$$\begin{pmatrix} Q_{11} & Q_{12} & Q_{13} & Q_{14} & Q_{15} & Q_{16} \\ Q_{21} & Q_{22} & Q_{23} & Q_{24} & Q_{25} & Q_{26} \\ Q_{31} & Q_{32} & Q_{33} & Q_{34} & Q_{35} & Q_{36} \end{pmatrix}$$

2, m , $2/m$

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & Q_{14} & 0 & Q_{16} \\ Q_{21} & Q_{22} & Q_{23} & 0 & Q_{25} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & Q_{34} & 0 & Q_{36} \end{pmatrix}$$

$2'$, m' , $2'/m'$

$$\begin{pmatrix} Q_{11} & Q_{12} & Q_{13} & 0 & Q_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & Q_{24} & 0 & Q_{26} \\ Q_{31} & Q_{32} & Q_{33} & 0 & Q_{35} & 0 \end{pmatrix}$$

222, $mm2$, mmm

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & Q_{14} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & Q_{25} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & Q_{36} \end{pmatrix}$$

$4'$, $\bar{4}'$, $4'/m$

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & Q_{14} & Q_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -Q_{15} & Q_{14} & 0 \\ Q_{31} & -Q_{31} & 0 & 0 & 0 & Q_{36} \end{pmatrix}$$

422 , $4mm$, $\bar{4}2m$, $4/mmm$, 622 , $6mm$, $\bar{6}m2$,
 $6/mmm$, $\infty 2$

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & Q_{14} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -Q_{14} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$4'22$, $4'mm'$, $\bar{4}'2m'$, $\bar{4}'2'm$, $4'/mmm'$

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & Q_{14} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & Q_{14} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & Q_{36} \end{pmatrix}$$

$42'2'$, $4m'm'$, $\bar{4}2'm'$, $4/mm'm'$, $62'2'$,
 $6m'm'$, $6m'2'$, $6/mm'm'$, $\infty 2'$, ∞/mm'

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & Q_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & Q_{15} & 0 & 0 \\ Q_{31} & Q_{31} & Q_{33} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$6'$, $\bar{6}'$, $6'/m'$

$$\begin{pmatrix} Q_{11} & -Q_{11} & 0 & 0 & 0 & -2Q_{22} \\ -Q_{22} & Q_{22} & 0 & 0 & 0 & -2Q_{11} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Эффект
отсутствует
в
немагнитных
группах
симметрии

Тензоры 4го ранга.

Упругие постоянные

$$X_{ij} = c_{ijkl} x_{kl}$$

$$c'_{ijop} = a_{ik} a_{jl} a_{om} a_{pn} c_{klmn}$$

$(3)^4 = 81$ компонент тензора

$$c_{ijkl} = c_{jikl} = c_{ijlk} = c_{jilk}$$

Число независимых
компонент тензора
сокращается с 81 до 36.

Симметрия
относительно диагонали
сокращает до 21
компоненты.

$$\begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \\ X_3 \\ X_4 \\ X_5 \\ X_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & c_{14} & c_{15} & c_{16} \\ c_{21} & c_{22} & c_{23} & c_{24} & c_{25} & c_{26} \\ c_{31} & c_{32} & c_{33} & c_{34} & c_{35} & c_{36} \\ c_{41} & c_{42} & c_{43} & c_{44} & c_{45} & c_{46} \\ c_{51} & c_{52} & c_{53} & c_{54} & c_{55} & c_{56} \\ c_{61} & c_{62} & c_{63} & c_{64} & c_{65} & c_{66} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \\ x_6 \end{pmatrix}$$

Симметрия тензора в
тетрагональной
точечной группе 4/m

1111 → 2222	($s_{11} = s_{22}$)
2222 → 1111	($s_{22} = s_{11}$)
3333 → 3333	(s_{33})
1122 → 2211	($s_{12} = s_{21}$)
1133 → 2233	($s_{13} = s_{23}$)
1212 → 2121	(s_{66})
1313 → 2323	($s_{55} = s_{44}$)
1233 → -2133	($s_{63} = -s_{63} = 0$)
2321 → 1312	($s_{46} = s_{56}$)
1312 → -2321	($s_{56} = -s_{46} = -s_{56} = 0$)
1112 → -2221	($s_{16} = -s_{26}$)
⋮	

$$\begin{pmatrix} s_{11} & s_{12} & s_{13} & 0 & 0 & s_{16} \\ s_{12} & s_{11} & s_{13} & 0 & 0 & -s_{16} \\ s_{13} & s_{13} & s_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & s_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & s_{44} & 0 \\ s_{16} & -s_{16} & 0 & 0 & 0 & s_{66} \end{pmatrix}$$

Тензоры 4го ранга.

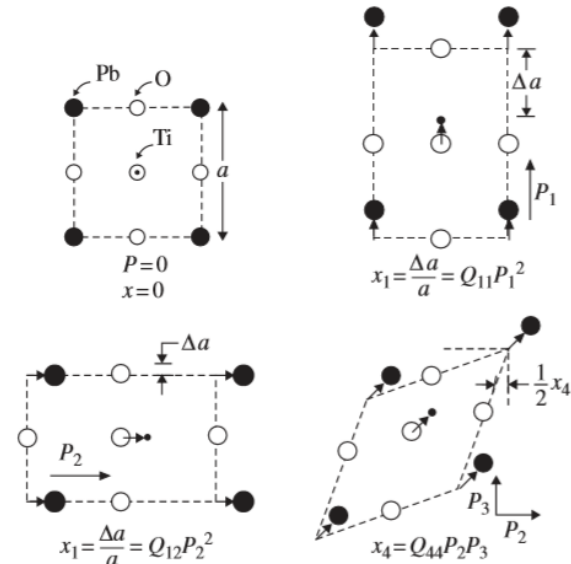
Электрострикция

$x_{ij} = d_{ijk}E_k + M_{ijkl}E_kE_l$ полярный тензор

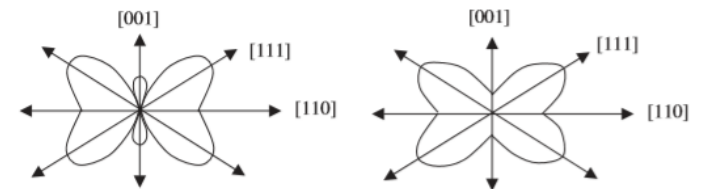
$x_{ij} = Q_{ijkl}P_kP_l$ 4го ранга

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \\ x_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Q_{11} & Q_{12} & Q_{12} & 0 & 0 & 0 \\ Q_{12} & Q_{11} & Q_{12} & 0 & 0 & 0 \\ Q_{12} & Q_{12} & Q_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & Q_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & Q_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & Q_{44} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} P_1^2 \\ P_2^2 \\ P_3^2 \\ P_2P_3 \\ P_3P_1 \\ P_1P_2 \end{pmatrix}$$

$$2Q_{44} = Q_{11} - Q_{12}$$



Электрострикция кубических перовскитов, показывающая физическую природу коэффициентов Q_{11} , Q_{12} and Q_{44}



CaF2. Elastic compliance and electrostrictive coefficients show similar anisotropy with the largest coefficients in body diagonal directions.

Тензоры 4го ранга.

Магнитострикция

$$x'_{ij} = a_{ik}a_{jl}x_{kl} = a_{ik}a_{jl}N_{klmn}I_mI_n$$

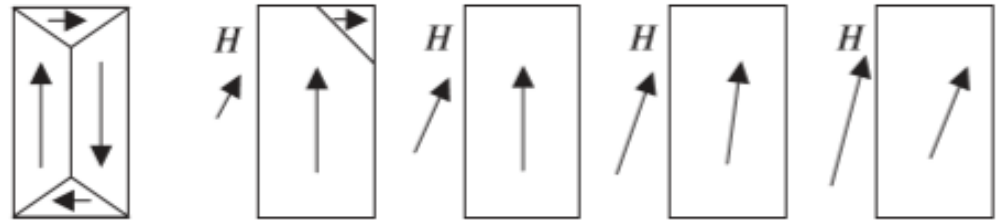
$$= a_{ik}a_{jl}N_{klmn}(\pm|a|a_{om}I'_o)(\pm|a|a_{pn}I'_p)$$

$$= N'_{ijop}I'_oI'_p$$

$$N'_{ijop} = a_{ik}a_{jl}a_{om}a_{pn}N_{klmn} \cdot \text{Полярный тензор 4го ранга}$$

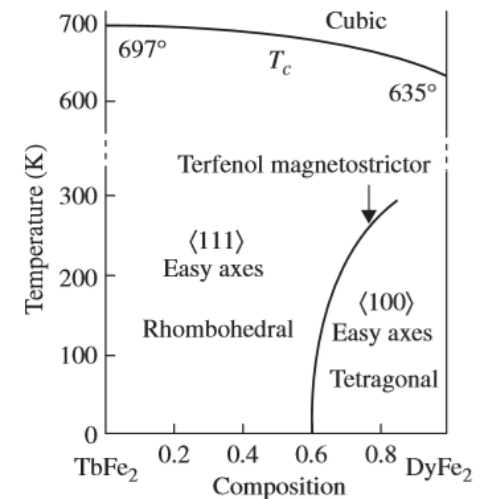
$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \\ x_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} N_{11} & N_{12} & N_{13} & N_{14} & N_{15} & N_{16} \\ N_{21} & N_{22} & N_{23} & N_{24} & N_{25} & N_{26} \\ N_{31} & N_{32} & N_{33} & N_{34} & N_{35} & N_{36} \\ N_{41} & N_{42} & N_{43} & N_{44} & N_{45} & N_{46} \\ N_{51} & N_{52} & N_{53} & N_{54} & N_{55} & N_{56} \\ N_{61} & N_{62} & N_{63} & N_{64} & N_{65} & N_{66} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I_1^2 \\ I_2^2 \\ I_3^2 \\ I_2I_3 \\ I_3I_1 \\ I_1I_2 \end{pmatrix}$$

Сильный эффект в кобальтовых сплавах, а также в терфеноле-D.



В сильном магнитном поле меняется доменная структура и намагниченность совпадает с направлением поля

Современные актюаторы развивают силу более 50 МПа и деформации до 0.6%, а магнитостриктивные сенсоры в сотни раз чувствительнее, чем полупроводниковые датчики деформации



Тензоры 6го ранга.

Нелинейные упругие свойства

$$X_{ij} = c_{ijkl}x_{kl} + c_{ijklmn}x_{kl}x_{mn} + \dots$$

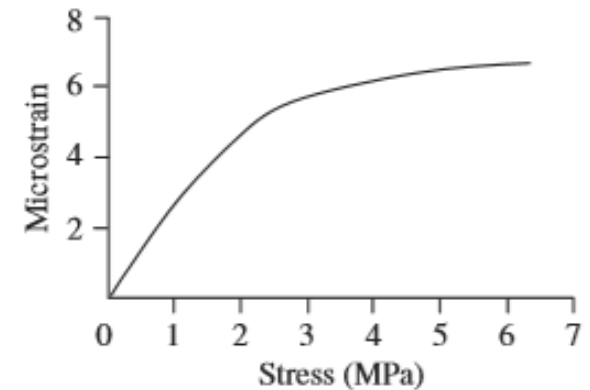
$$c'_{ijklmn} = a_{io}a_{jp}a_{kq}a_{lr}a_{ms}a_{nt}c_{opqrst} \quad \text{тензор 6го ранга}$$

$$3^6 = 729 \quad \text{коэффициентов}$$

*Коммутация сокращает
число компонент с 729 до
216, из которых 56
независимы.*



*Вулканизированная
резина*



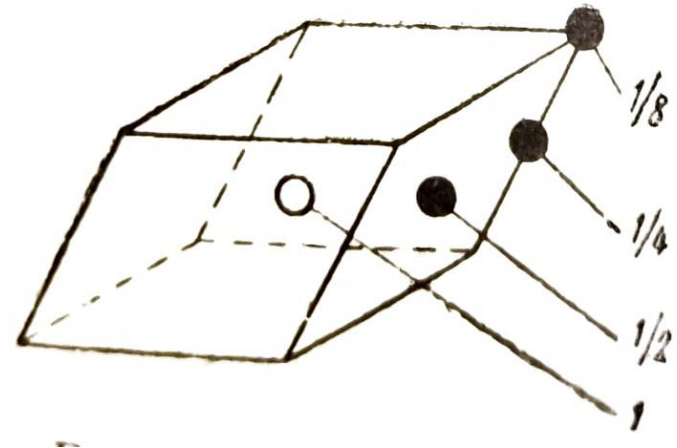
Symmetry	Second order	Third order
Triclinic ($1, \bar{1}$)	21	56
Monoclinic ($2, m, 2/m$)	13	32
Orthorhombic ($222, mm2, mmm$)	9	20
Trigonal ($3, \bar{3}$)	7	20
($32, 3m, \bar{3}m$)	6	14
Tetragonal ($4, \bar{4}, 4/m$)	7	16
($422, 4mm, \bar{4}2m, 4/mmm$)	6	12
Hexagonal ($6, \bar{6}, 6/m$)	5	12
($\bar{6}m2, 622, 6mm, 6/mmm$)	5	10
Cubic ($23, m\bar{3}$)	3	8
($432, \bar{4}3m, m\bar{3}m$)	3	6

число независимых упругих
постоянных второго и третьего
порядка

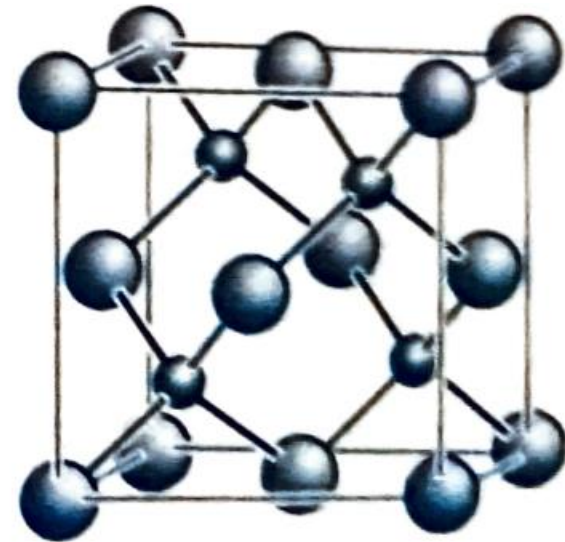
Описание кристаллических структур

Как посчитать число атомов в ячейке?

- Атом внутри ячейки считается как 1 атом, на грани – как $\frac{1}{2}$ атома, на ребре – как $\frac{1}{4}$, а в вершине ячейки – как $\frac{1}{8}$ атома.

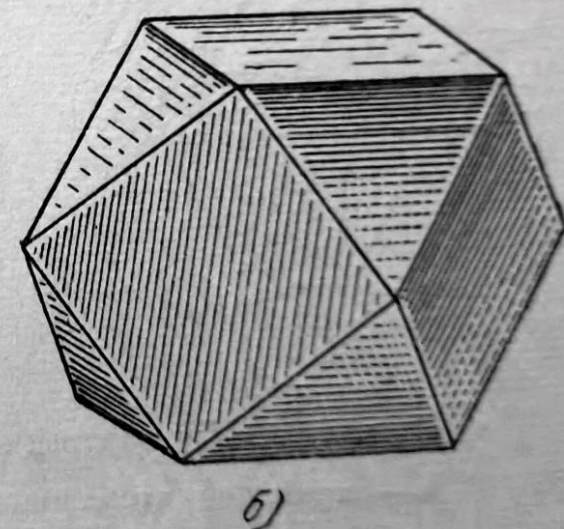
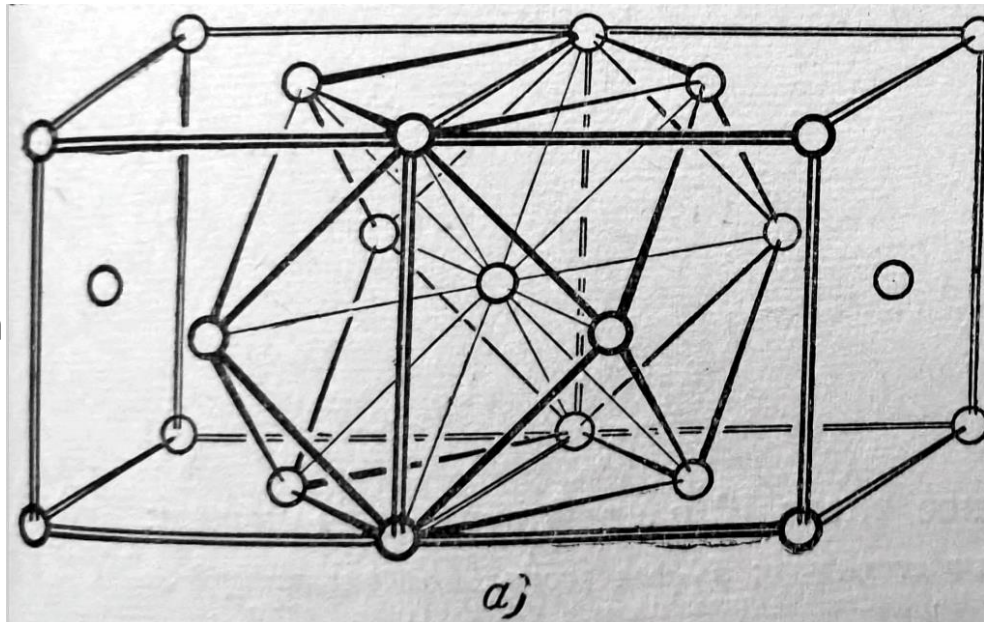


- Упражнение: посчитайте число атомов Zn (маленькие шары) и S (крупные шары) в ячейке сфалерита.

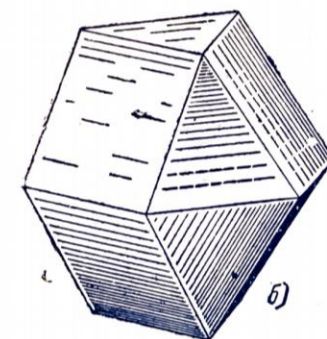
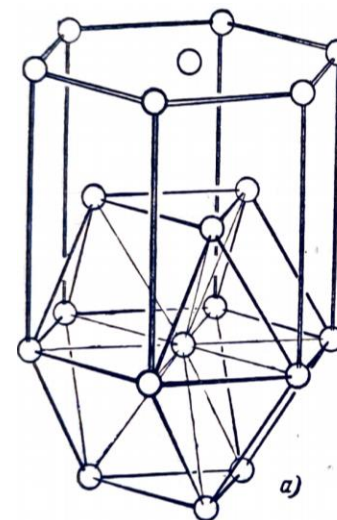


Координационное число и координационный полиэдр

Кубическая
плотнейшая упаковка
(структурный тип Cu)

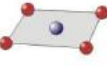
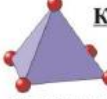
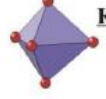
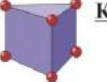
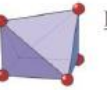
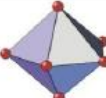
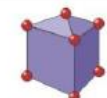
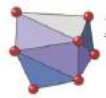
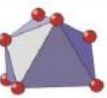
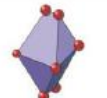
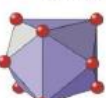
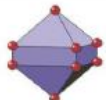
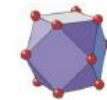
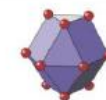
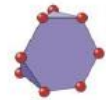
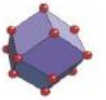


- Координационное число (КЧ) = число ближайших соседей.
- Координационный полиэдр – фигура, в вершинах которой ближайшие соседи данного атома.
- В плотнейших упаковках КЧ = 12.
- В КПУ – архимедов кубоктаэдр. В ГПУ – гексагональный кубоктаэдр.



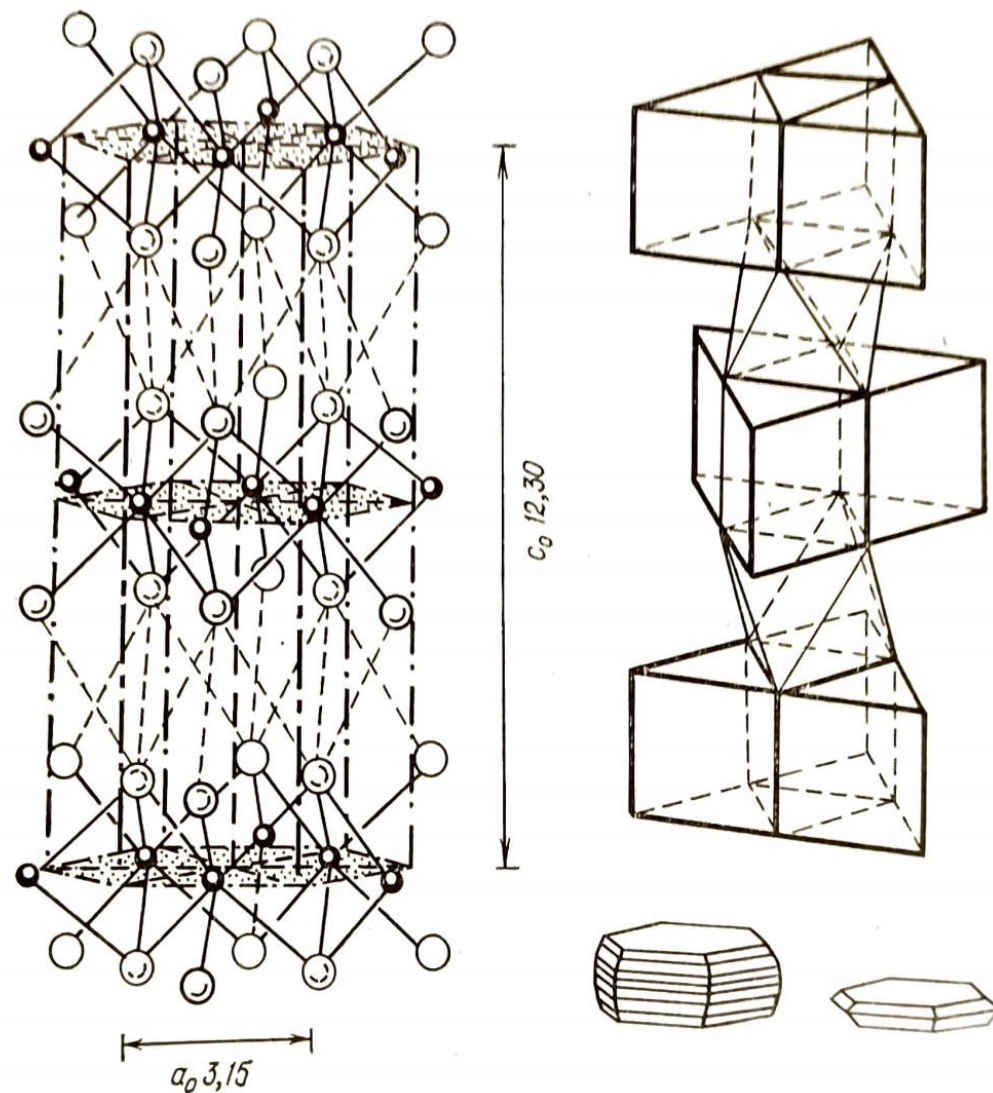
Гексагональная
плотнейшая упаковка
(структурный тип Mg)

Наиболее распространенные координационные полиэдры

<u>КЧ=1</u>  Гантель (из 1 сорта атомов) I_2, FeS_2 <i>a</i>	<u>КЧ=2</u>  Гантель Cu_2O, CO_2 <i>б</i>	<u>КЧ=2</u>  Уголок H_2O <i>в</i>	<u>КЧ=3</u>  Треугольник $[CO_3], [BO_3]$ <i>г</i>	<u>КЧ=3</u>  Треугольный зонтичный полиэдр CdI_2, MoS_2 <i>д</i>
<u>КЧ=4</u>  Квадрат $[CuO_4], PtS$ <i>е</i>	<u>КЧ=4</u>  Тетраэдр $[SiO_4], [BO_4], [PO_4], [SO_4]$ <i>ж</i>	<u>КЧ=5</u>  Полуоктаэдр (тетрагональная пирамида) NiS - миллерит <i>з</i>	<u>КЧ=5</u>  Тригональная бипирамида K_2ZrF_6 <i>и</i>	<u>КЧ=6</u>  Октаэдр (тетрагональная бипирамида) $TiO_2, FeS_2, NiAs, Al_2O_3$ <i>й</i>
<u>КЧ=6</u>  Тригональная призма $NiAs, MoS_2$ <i>к</i>	<u>КЧ=6</u>  Уплощенный октаэдр (куб, усеченный по телесной диагонали) As_2O_3 арсенолит <i>л</i>	<u>КЧ=6</u>  Шестивершинник с квадратной гранью $(Mn, Fe)_2O_3$ (биксбиит) <i>м</i>	<u>КЧ=7</u>  Одношапочный октаэдр $PbBi_2S_4$ <i>н</i>	<u>КЧ=7</u>  Усеченная квадратная антипризма Ni_3B_3 <i>о</i>
<u>КЧ=7</u>  Пентагональная бипирамида $PaCl_5$ <i>п</i>	<u>КЧ=7</u>  Куб, усеченный по 1-ой вершине ZrO_2 (бадделейт) <i>р</i>	<u>КЧ=7</u>  Одношапочная тригональная призма $CaMg[B_2O_3]$ <i>с</i>	<u>КЧ=8</u>  Куб (тетрагональная призма) CaF_2 (флюорит) <i>т</i>	<u>КЧ=8</u>  Куб Томпсона (квадратная антипризма) $A_2B_3[SiO_4]_3$ (гранаты) <i>у</i>
<u>КЧ=8</u>  Додекаэдр Симэкса $ZrSiO_4$ (циркон) <i>ф</i>	<u>КЧ=8</u>  Двухшапочная тригональная призма Ca (в ряде боратов) <i>х</i>	<u>КЧ=8</u>  Тетрагональная бипирамида с 2-мя расщепленными вершинами Th_3P_4 <i>ц</i>	<u>КЧ=9</u>  Одношапочный куб Томпсона $Ca_2[B_4O_{13}(OH)_2]$ <i>ч</i>	<u>КЧ=9</u>  Трехшапочная тригональная призма $La[IO_3]_3$ <i>ш</i>
<u>КЧ=10</u>  Двухшапочная тетрагональная призма CaC_2 <i>щ</i>	<u>КЧ=10</u>  Дважды косоусеченный икосаэдр $MnAl_6$ <i>ъ</i>	<u>КЧ=11</u>  Усеченный икосаэдр Fe_4Al_{13} <i>ы</i>	<u>КЧ=12</u>  Кубоктаэдр Cu, Ag <i>б</i>	<u>КЧ=12</u>  Гексагональный кубоктаэдр Mg, He <i>ю</i>
<u>КЧ=12</u>  Лавесовский (усеченный) тетраэдр $MgCu_2, MgZn_2$ (фазы Лавеса) <i>ю</i>	<u>КЧ=12</u>  Гексагональная антипризма Cs (в берилле) <i>я</i>	<u>КЧ=12</u>  Икосаэдр AlB_{12} <i>аа</i>	<u>КЧ=12-16</u>  Полиэдры Франка-Каспера (Интерметаллиды с близкими r) <i>аб</i>	<u>КЧ=14</u>  Ромбододекаэдр $\alpha\text{-Fe}, BiF_3$ <i>ав</i>

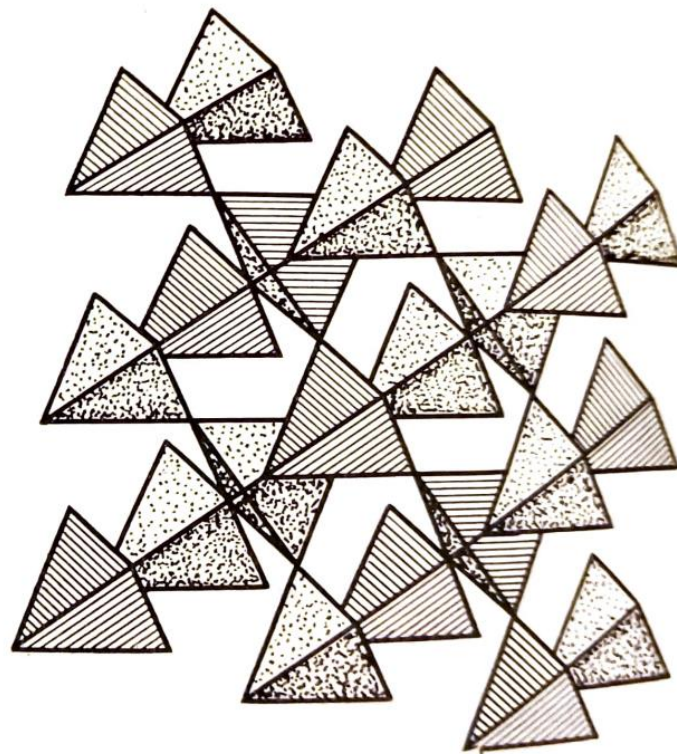
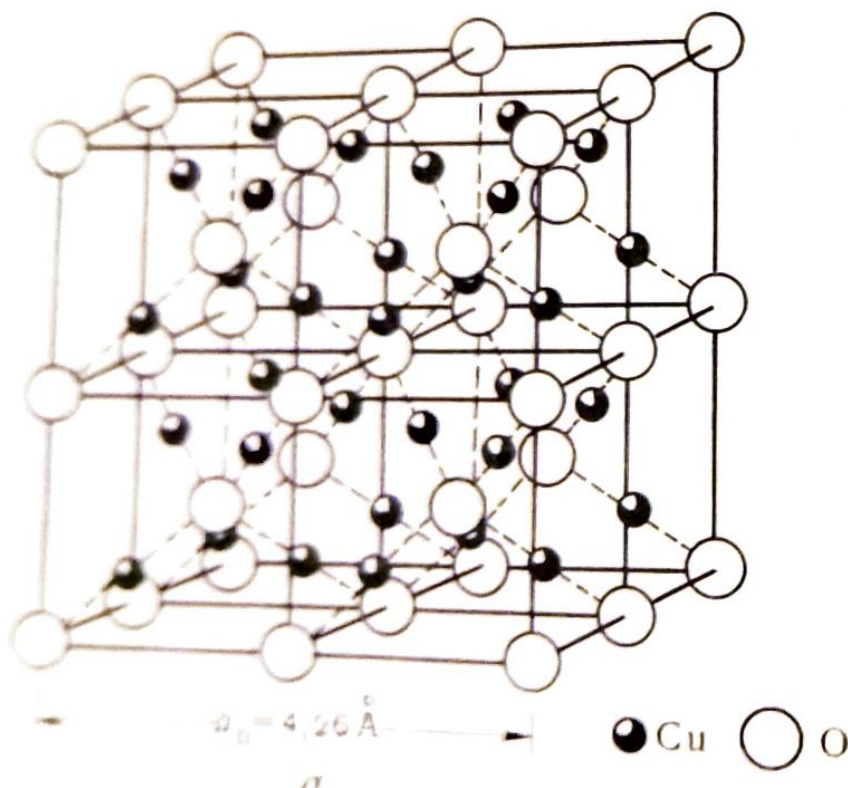
Структурный тип молибденита MoS_2 .

- $\text{КЧ}(\text{Mo}) = 6$ (тригонально-призматическая координация).
- $\text{КЧ}(\text{S}) = 3$ (тригональная зонтичная координация).
- Асимметричная координация S возможна из-за ее высокой поляризуемости. Слоистые структуры стабилизированы высокополяризуемыми атомами.
- Тригональные призмы MoS_6 образуют слои. Между слоями – ван-дер-ваальсова связь.
- Однослойный MoS_2 – важнейший двумерный материал.



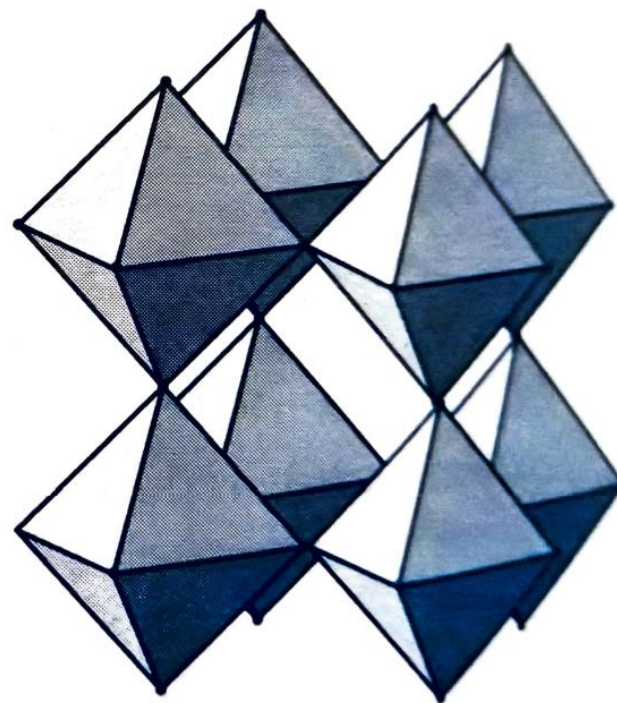
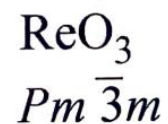
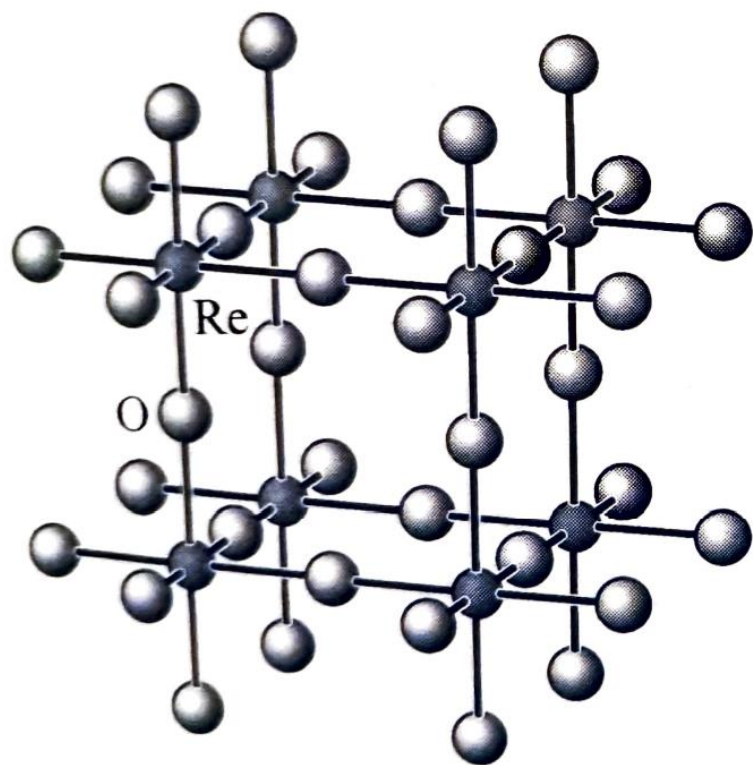
Структурный тип куприта Cu_2O .

- $\text{КЧ}(\text{Cu}) = 2$ (линейная координация).
- $\text{КЧ}(\text{O}) = 4$ (тетраэдрическая координация).
- Уникальная «3D-катенановая» топология – два непересекающихся тетраэдрических каркаса, вставленных друг в друга.



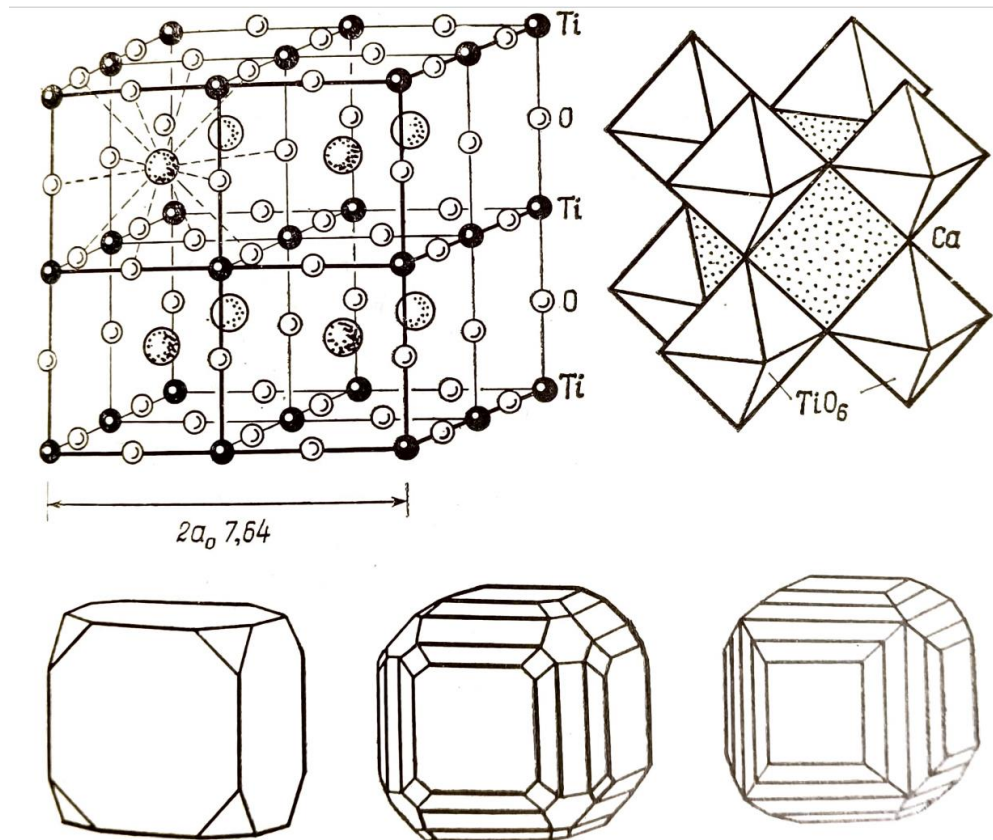
Структурный тип ReO_3 .

- $\text{KЧ}(\text{Re}) = 6$ (октаэдрическая координация).
- $\text{KЧ}(\text{O}) = 2$ (линейная координация).

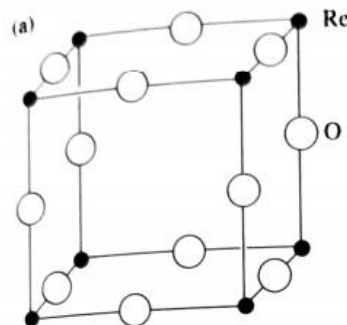


Структурный тип перовскита CaTiO_3 .

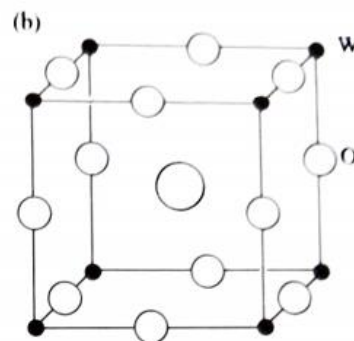
- Структура типа ReO_3 , начиненная атомами Ca.
- $\text{КЧ}(\text{Ti}) = 6$, октаэдрическая координация.
- $\text{КЧ}(\text{Ca}) = 12$, кубоктаэдрическая координация.
- Очень часты искаженные (некубические) варианты этой структуры. Сегнетоэлектрический тетрагональный BaTiO_3 ($P4mm$). Ромбический ($Pnma$) MgSiO_3 -перовскит составляет $\sim 40\%$ объема Земли.



Na_xWO_3 : промежуточный случай между структурами перовскита и ReO_3

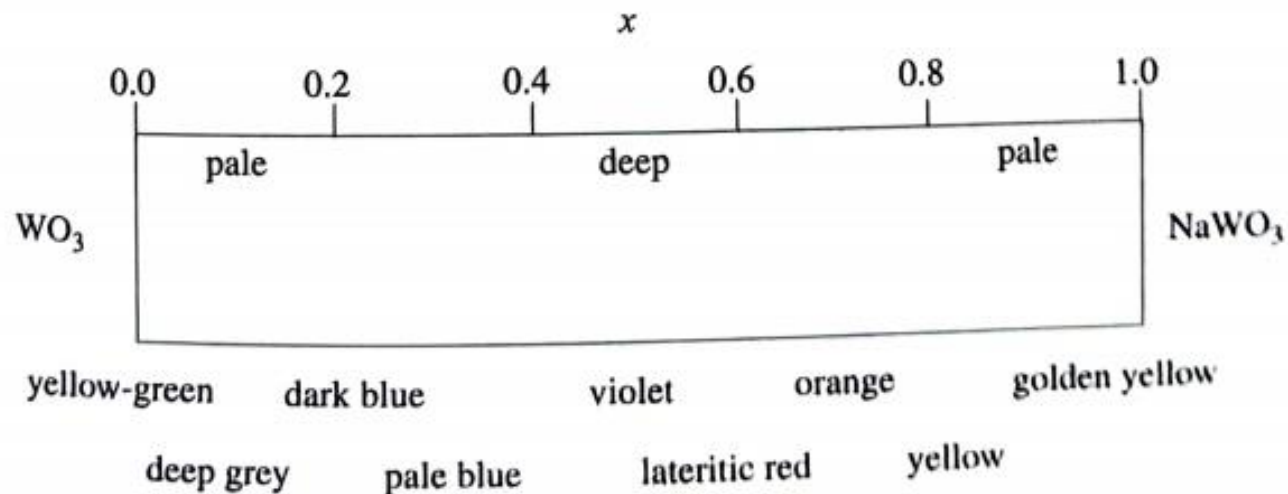


Структура WO_3 и ReO_3



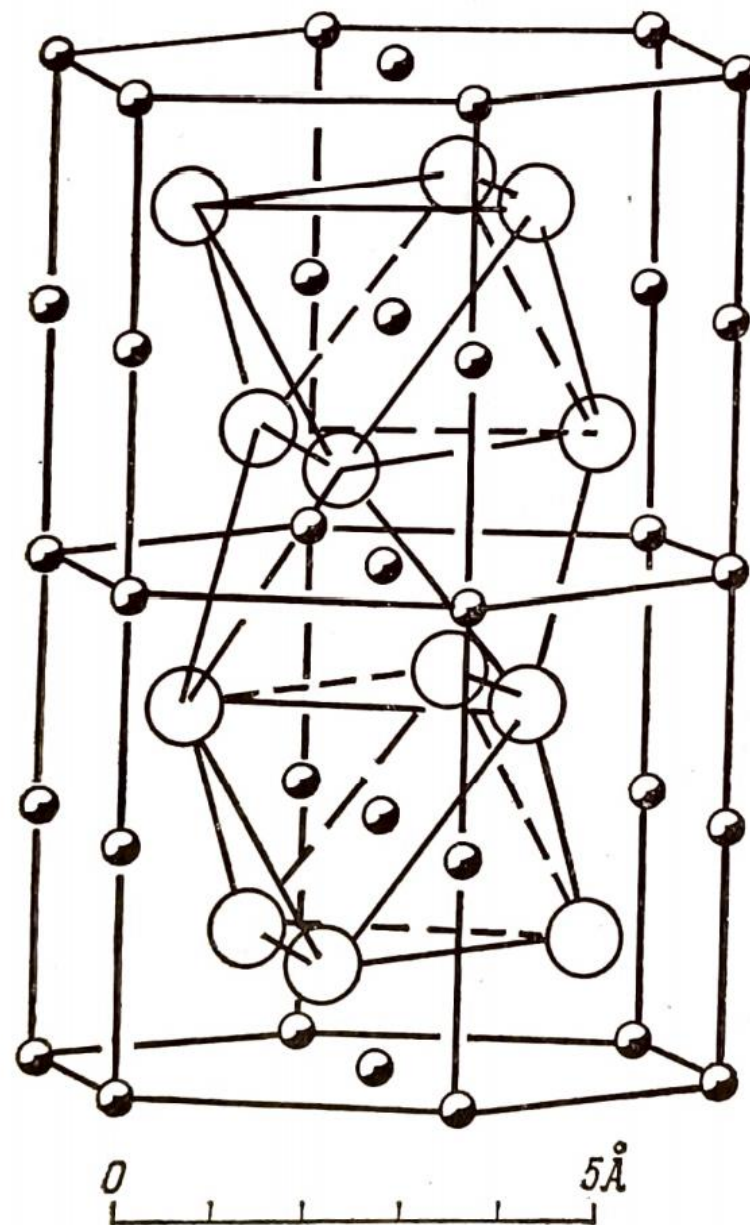
Структура Na_xWO_3

- Частичное внедрение Na^+ в структуру WO_3 приводит к восстановлению части W^{6+} до W^{5+} .
- Na_xWO_3 – одна из «вольфрамовых бронз» (которые имеют густой цвет, металлический блеск, являются металлами или полупроводниками). С изменением x меняется цвет «вольфрамовой бронзы»



Структурный тип никелина NiAs.

- Атомы Ni в октаэдрической координации (КЧ=6).
- Атомы As в тригонально-призматической координации (КЧ=6).
- NiAs_6 -октаэдры делят грани $\rightarrow$ короткое расстояние Ni-Ni (металлическая связь).



Примеры соединения полиэдров.

Расстояния между центрами полиэдров минимальны при гранном соединении, максимальны – при вершинном соединении (или когда нет соединения).

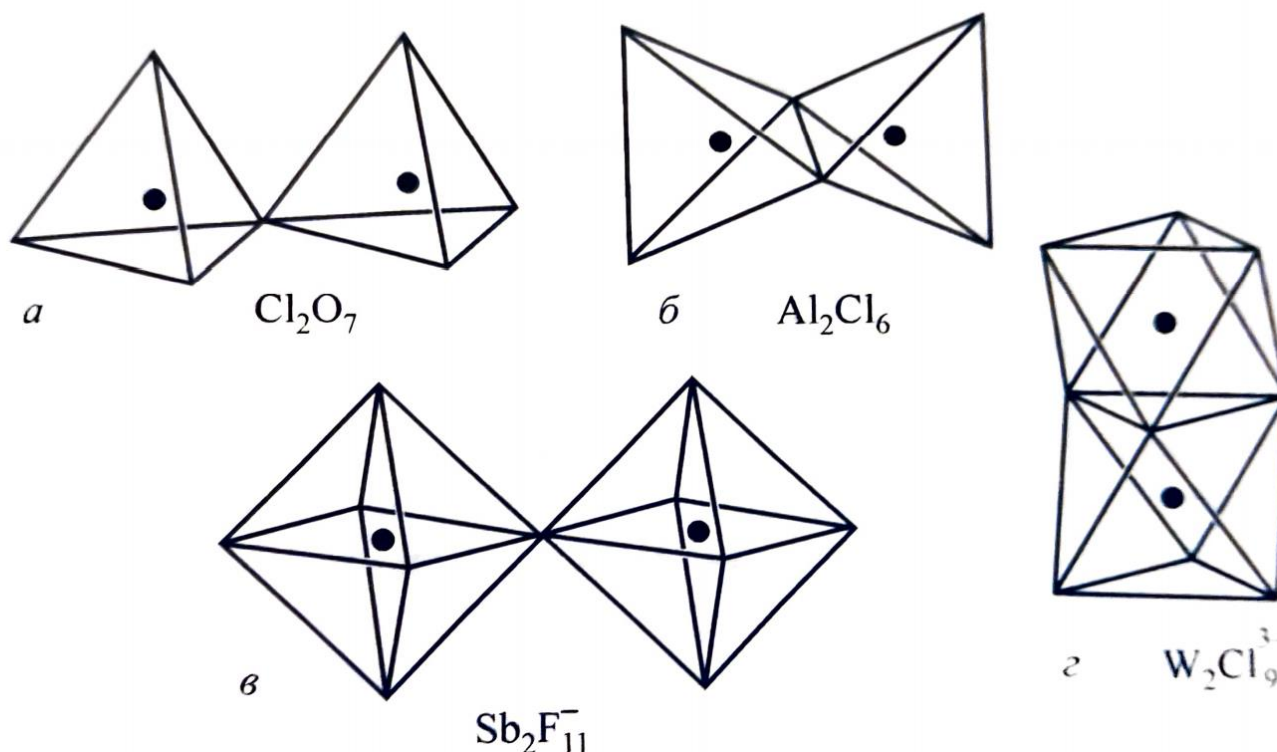
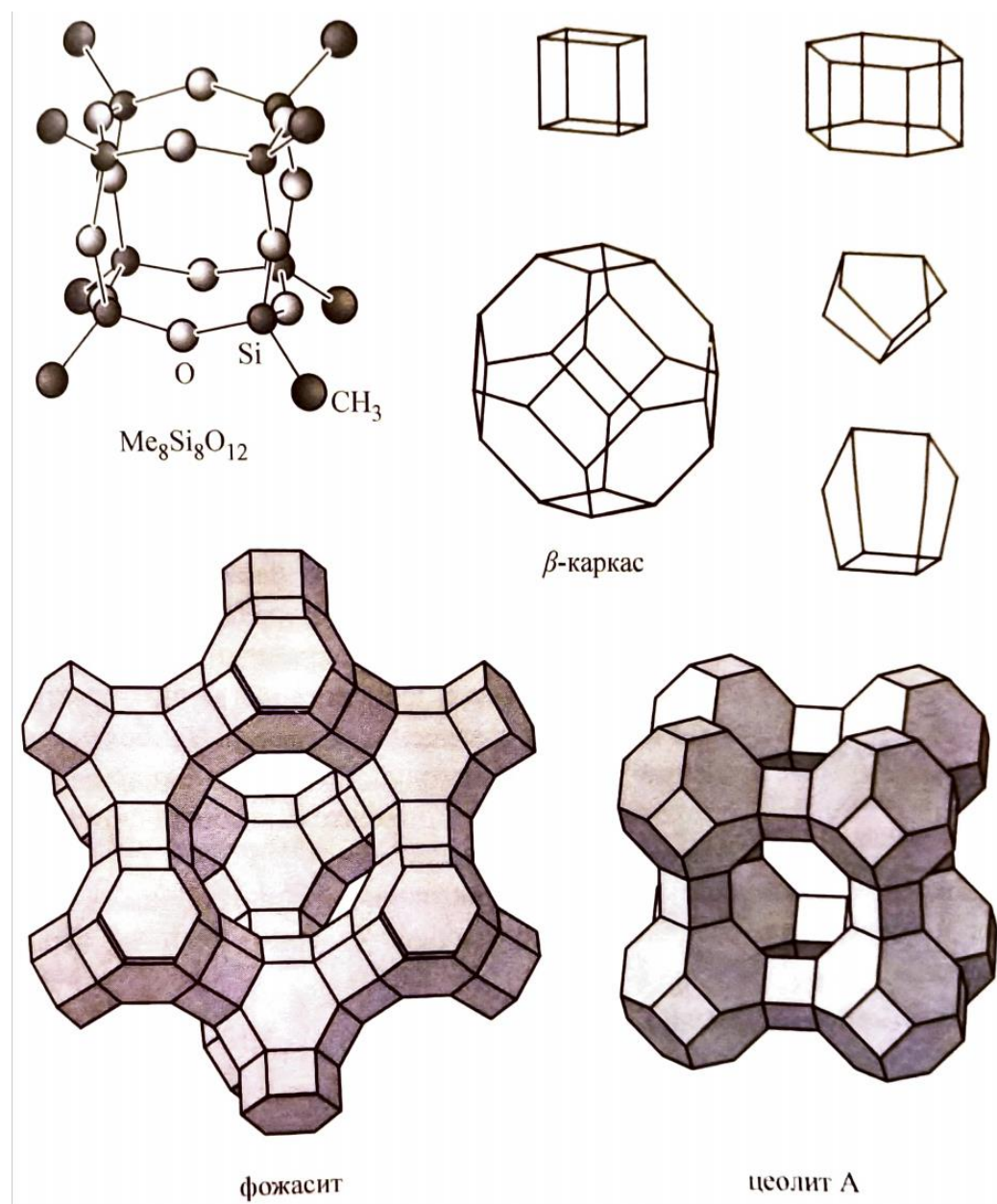


Рис. 2.3. Примеры соединения многогранников (полиэдров): а) молекула Cl_2O_7 — два тетраэдра имеют общую вершину; б) молекула Al_2Cl_6 — два тетраэдра имеют общее ребро; в) ион $[\text{Sb}_2\text{F}_{11}]^-$ — два октаэдра имеют общую вершину; г) ион $[\text{W}_2\text{Cl}_9]^{3-}$ — два октаэдра имеют общую грань. Два октаэдра, имеющих общее ребро, изображены на рис. 2.1

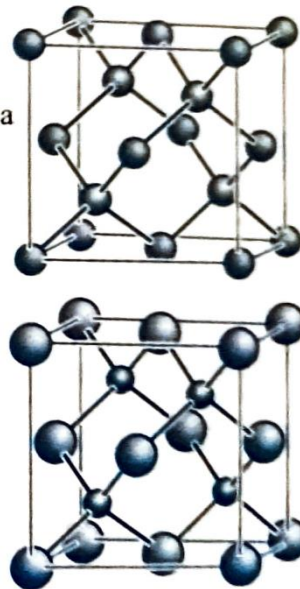
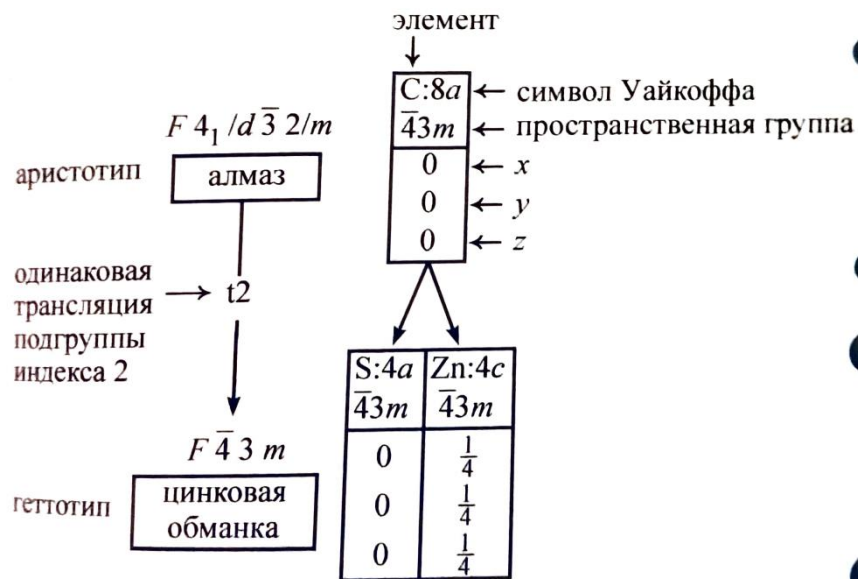
Иерархическое описание сложных структур: от полиэдров к secondary building units

- Часто используется для цеолитов.
- Каждый $(\text{Al}, \text{Si})\text{O}_4$ -тетраэдр заменяем на точку.
- Соединяем точки.
- Полученную конструкцию можно разбить на фрагменты («детали лего») – secondary building units. А из них – собирать новые структуры!

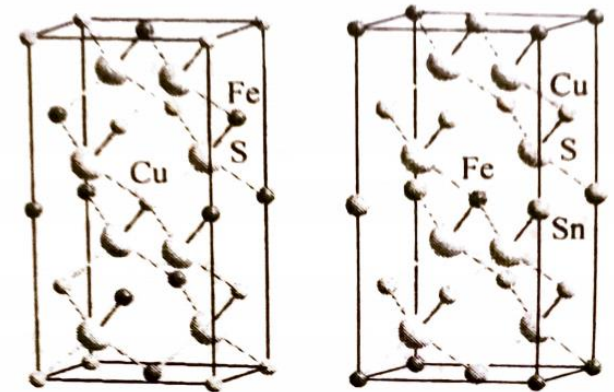


Производные структуры и деревья Бернигхаузена (Bärnighausen trees).

- Упорядоченные замещения/внедрения/вычитания атомов и искажения структур приводят к производным структурам с более низкой симметрией.
- Соотношения между такими структурами называются деревьями Бернигхаузена.
- Сверхструктура – производная структура с кратно увеличенной элементарной ячейкой.

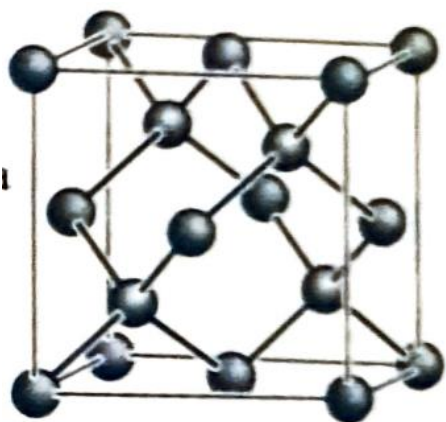
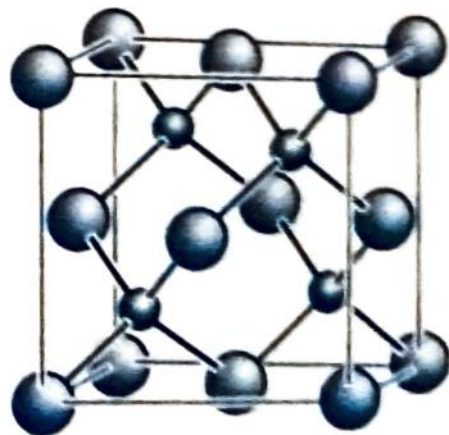


Структуры алмаза C и сфалерита ZnS

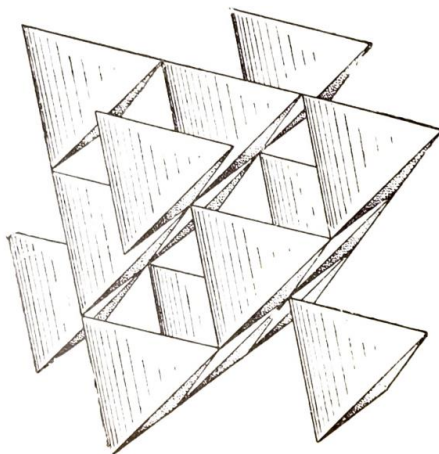


Структуры халькопирита CuFeS_2 и станнина $\text{Cu}_2\text{FeSnS}_4$

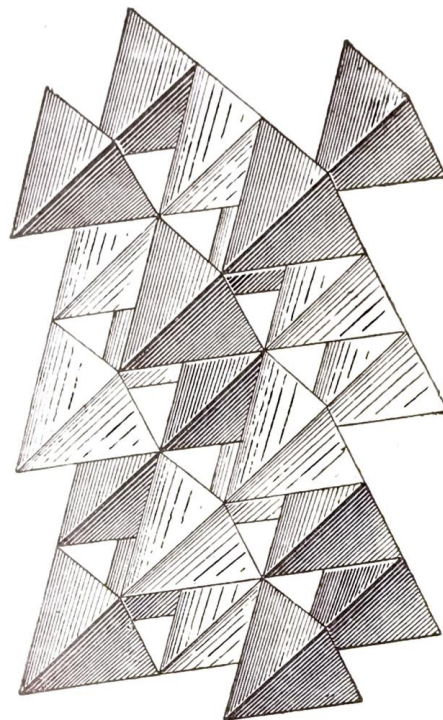
Пример структур, производных от алмаза



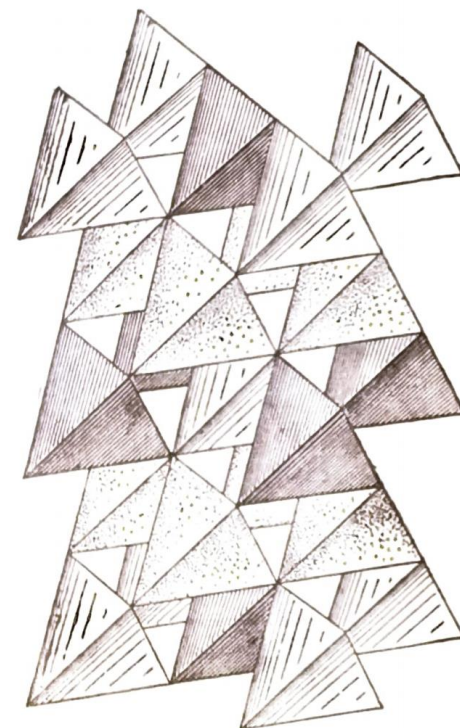
Алмаз C



Сфалерит ZnS



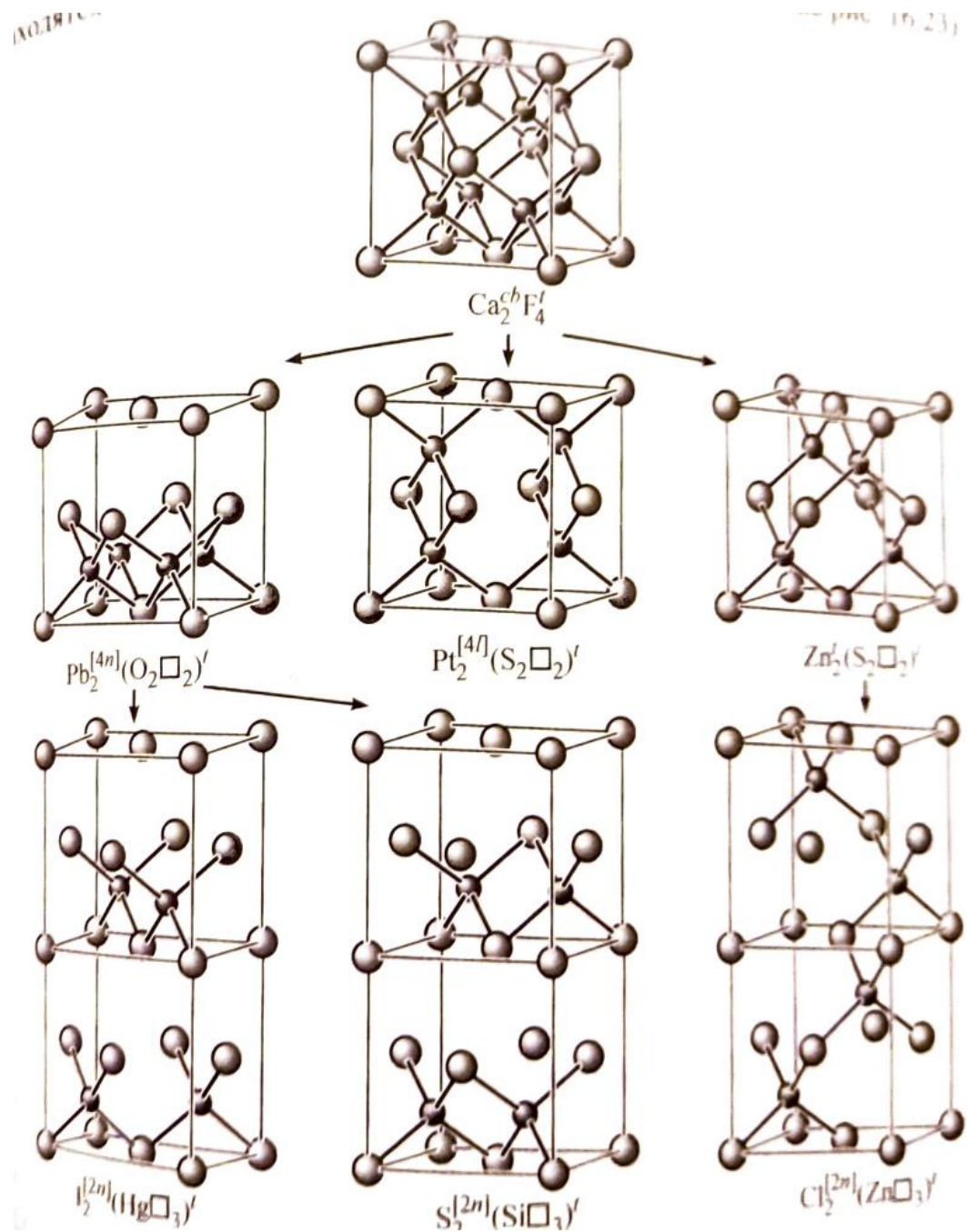
Халькопирит CuFeS_2



Станнин $\text{Cu}_2\text{FeSnS}_4$

Ромбические/моноклинные ветки дерева Бернигхаузена для
сверхструктур семейства AlB_2

Еще пример: дерево CaF_2
 (PbO , PtS , ZnS , HgI_2 , SiS_2 , $\alpha\text{-ZnCl}_2$).



Правила строения ионных кристаллов (правила Полинга)

справедливы также для ионно-ковалентных кристаллов

Правила Полинга для ионных кристаллов (1929)

1. ‘Вокруг каждого катиона образуется координационный многогранник анионов, расстояние между катионами и анионами определяется суммой радиусов, а координационное число катиона - отношением радиусов’.

Расстояние между катионом A и анионом X определяется суммой их радиусов:
 $A-X = r_A + r_X$, а координационное число катиона – отношением их радиусов r_A/r_X .

2. ‘В стабильной координированной структуре общая сила валентных связей, которые достигают аниона от всех соседних катионов, равна заряду аниона’.

Валентность связи s (в единицах валентности, v.u.) равна валентности катиона Z , деленной на его координационное число n : $s = Z/n$

Флюорит, $Ca^{[8]}F^{[4]}_2$:

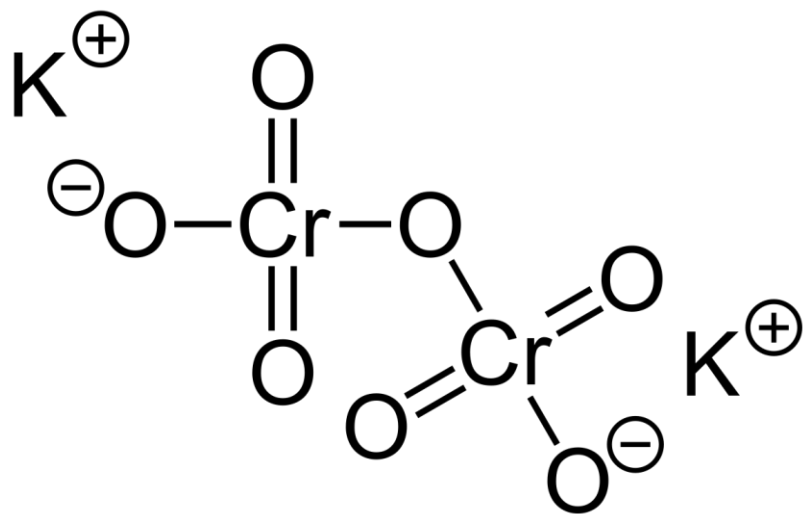
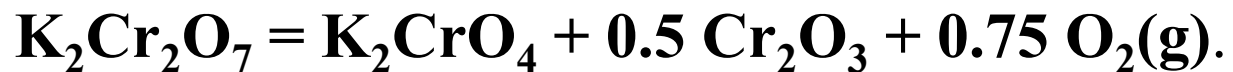
Ca^{2+} : $s(Ca-F) = |+2|/[8] = 1/4 \text{ v.u.}$
 F^- : $s(Ca-F) = |-1|/[4] = 1/4 \text{ v.u.}$

$Na^{[6]}Cl^{[6]}$:

Na^+ : $s(Na-Cl) = |+1|/[6] = 1/6 \text{ v.u.}$
 Cl^- : $s(Na-Cl) = |-1|/[6] = 1/6 \text{ v.u.}$

Валентность связи более точно моделируется формулой $s = \exp [(R_0-R)/b]$, где R_0 - (табличное) расстояние в одинарной связи, а b - константа ($\sim 0,37 \text{ \AA}$ для всех связей).

2^e правило и классическая химия: разложение бихромата калия



$\text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7$ нарушает 2^e правило
Полинга, а K_2CrO_4 - нет



2^{ое} правило и биохимия: АТФ как энергетическая валюта для всех форм жизни

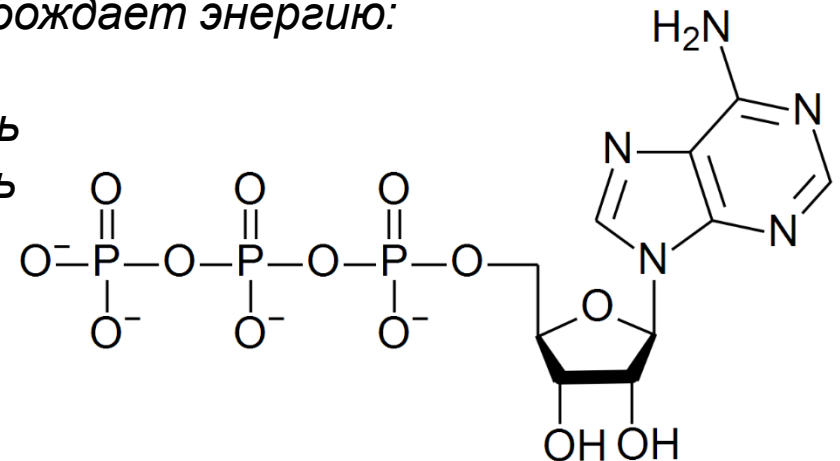
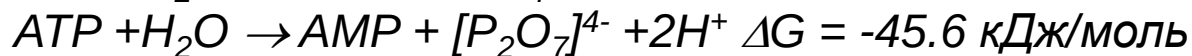
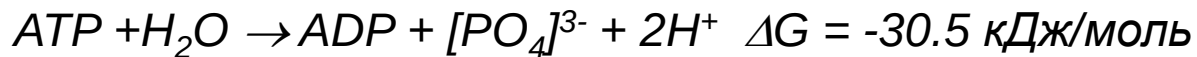
В PO_4 -тетраэдре четыре связи P-O с валентностью = 5/4

*Если два тетраэдра делят вершину, то сумма валентностей связей на ней = $2 \cdot 5/4 = 2.5$
>> 2 (валентность O)*

Полимеризация PO_4 - тетраэдра ведет к повышению энергии, что невыгодно!

В аденозинтрифосфате (АТФ) содержится трифосфат-группа, которая имеет высокую энергию!

Последовательное отщипление PO_4 -группы высвобождает энергию:



Прямо сейчас ваше тело содержит 250 грамм АТФ, и в течение 24 часов вырабатает 40 килограмм АТФ!

Расширенное 2е правило: правило сумм валентностей связи

Валентность связи лучше описывается формулой

$$s = \exp [(R_0 - R)/b],$$

где R_0 - (табличное) расстояние между одиночными связями, а b - константа ($\sim 0,37 \text{ \AA}$ для всех связей).

$$\sum s_{ij} = V_j$$

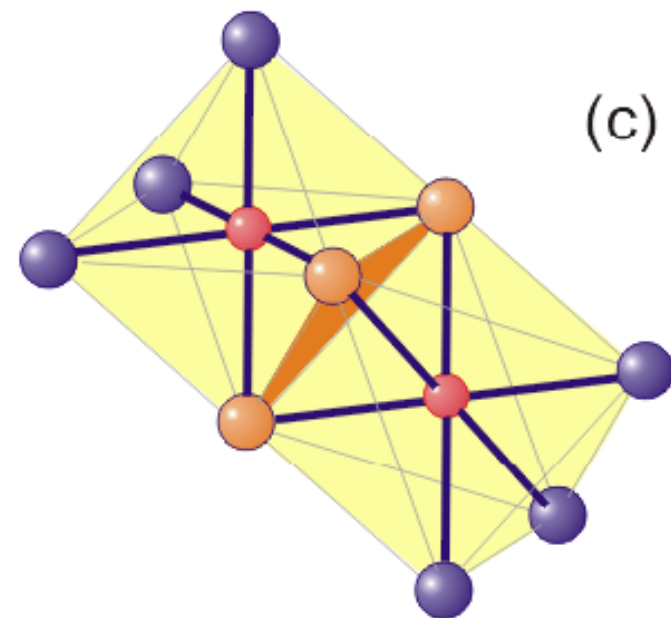
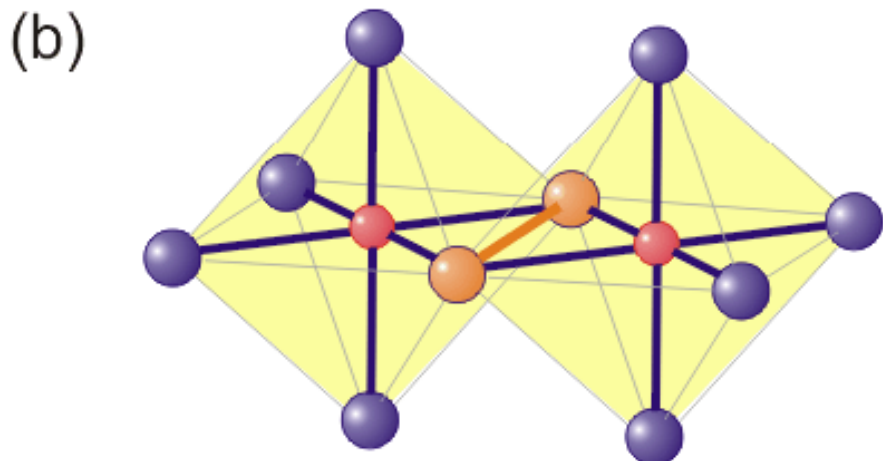
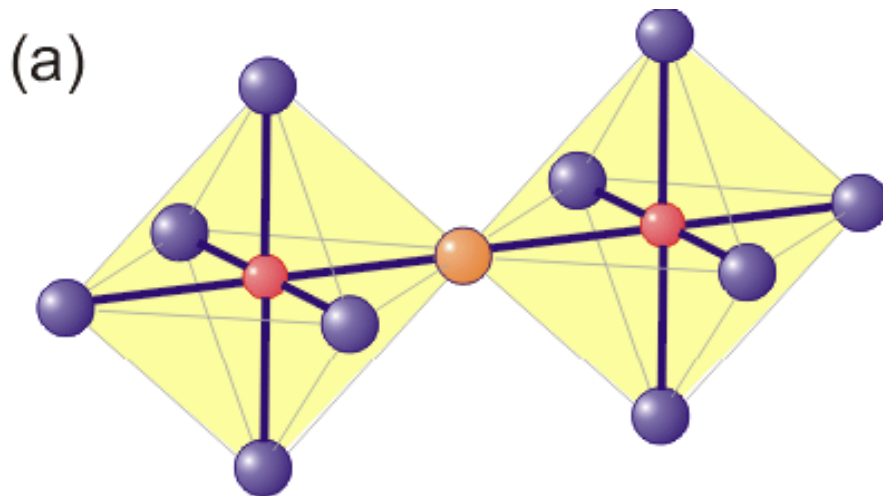
Это правило универсально!

R_0 values for some bonds

Ag 1	O -2	1.842	Mo 6	O -2	
Al 3	O -2	1.651	N 3	O -2	1.907
As 3	O -2	1.789	N 5	O -2	1.361
As 5	O -2	1.767	Na 1	O -2	1.432
B 3	O -2	1.371	Nb 5	O -2	1.803
Ba 2	O -2	2.285	Ni 2	O -2	1.911
Be 2	O -2	1.381	P 5	O -2	1.654
Bi 3	O -2	2.094	Pb 2	O -2	1.617
C 4	N -3	1.442	Pb 4	O -2	2.112
C 4	O -2	1.390	Pt 4	O -2	2.042
Ca 2	O -2	1.967	Rb 1	O -2	1.879
Cd 2	O -2	1.904	S 4	O -2	2.263
Co 2	O -2	1.692	S 6	O -2	1.644
Cr 3	O -2	1.724	Sb 3	O -2	1.624
Cr 6	O -2	1.794	Sb 5	O -2	1.973
Cs 1	O -2	2.417	Sc 3	O -2	1.942
Cu 2	O -2	1.679	Si 4	O -2	1.849
Fe 3	O -2	1.759	Sn 4	O -2	1.624
Ga 3	O -2	1.730	Sr 2	O -2	1.905
Ge 4	O -2	1.748	Ta 5	O -2	2.118
H 1	N -3	0.885	Te 4	O -2	1.920
H 1	O -2	0.882	Te 6	O -2	1.977
Hg 2	O -2	1.972	Ti 4	O -2	1.917
In 3	O -2	1.902	U 6	O -2	1.815
K 1	O -2	2.132	V 3	O -2	2.075
La 3	O -2	2.172	V 4	O -2	1.743
Li 1	O -2	1.466	V 5	O -2	1.784
Mg 2	O -2	1.693	W 6	O -2	1.803
Mn 2	O -2	1.790	Y 3	O -2	1.917
Mn 3	O -2	1.760	Zn 2	O -2	2.019
Mn 4	O -2	1.753	Zr 4	O -2	1.704
					1.928

Правила Полинга для ионных кристаллов (1929)

3. ‘Существование ребер и, в особенности, граней, общих для двух анионных многогранников в координированной структуре, снижает ее стабильность; этот эффект велик для катионов с высокой валентностью и малым координационным числом и особенно велик, когда отношение радиусов приближается к нижнему пределу стабильности многогранников’.



Правила Полинга для ионных кристаллов (1929)

4. ‘В кристалле, содержащем различные катионы, катионы с высокой валентностью и малым координационным числом, как правило, не разделяют элементы многогранников друг с другом’.

Например, SiO_4 -тетраэдр ($Z=+4$, $\text{CN}=4$) делят вершину (очень редко ребра и никогда – грани).

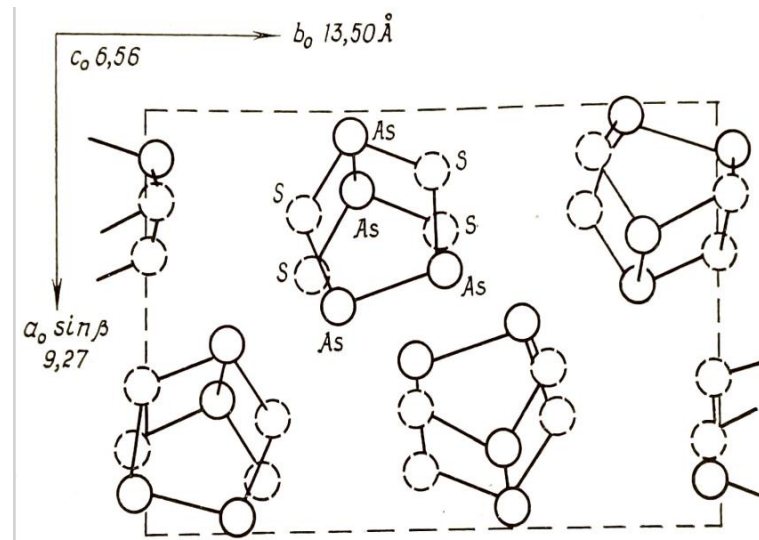
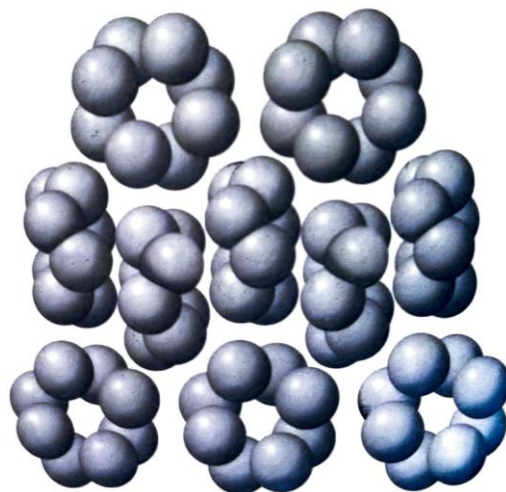
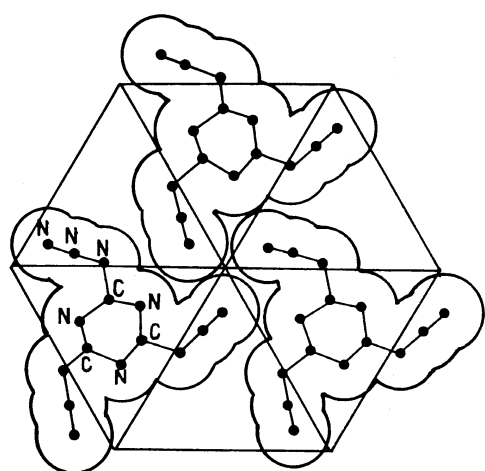
NaO_{10} -многогранник ($Z=+1$, $\text{CN}=10$) может делить даже грани.

5. ‘Количество существенно различных типов составляющих в кристалле, как правило, невелико’.

Правила строения молекулярных кристаллов (правила Китайгородского)

Принцип плотнейшей упаковки молекул – главный принцип строения молекулярных кристаллов (органических и неорганических)

1. Плотнейшая упаковка молекул по принципу «выступ к впадине».
2. Вокруг каждой молекулы 12 или 14 (реже 10 или 16) молекул.
3. Плотность упаковки 0.6-0.8.
4. Предпочтительны пространственные группы с винтовыми осями и плоскостями скользящего отражения.



Упаковка молекул в кристаллах триазида циануровой кислоты C_3N_{12} (слева), серы S_8 (посередине) и реальгара As_4S_4 (справа)

Сокристаллы (+гидраты, сольваты) – кристаллы двух или более типов молекул

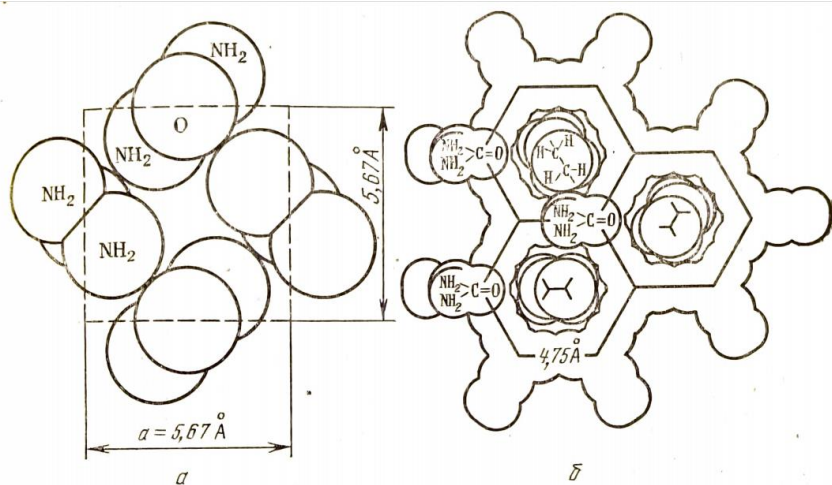
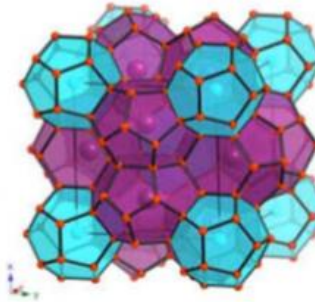


Рис. 4. Мочевина:

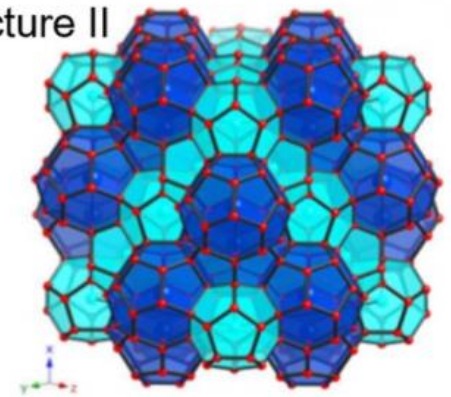
а — структура кристаллов; б — ее соединение включения с *n*-парафином (поперечный разрез)

Мочевина (NH₂)₂CO образует сокристалл с линейными углеводородами (что используется для разделения углеводородов!)

structure I

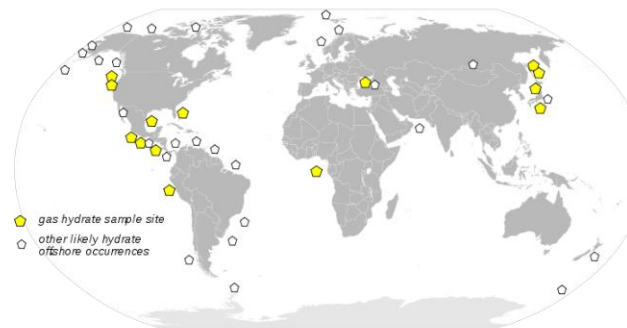


structure II

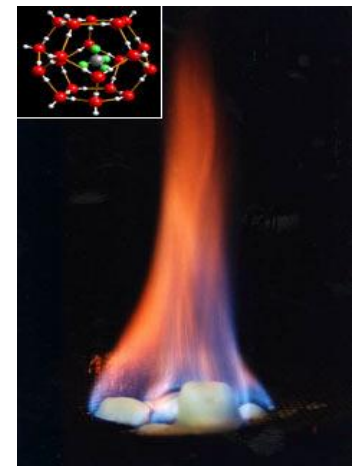


CH₄, CO₂, Cl₂, Xe образуют газовые гидраты

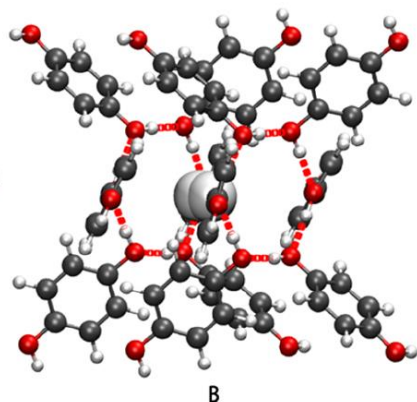
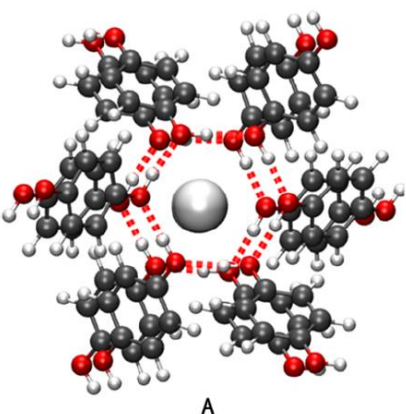
8CO₂·46H₂O, стабильный в холодной воде (>350 м глубина), тяжелее воды.



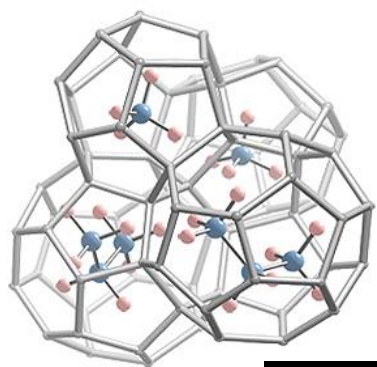
8CH₄·46H₂O, «горючий лед» и его месторождения



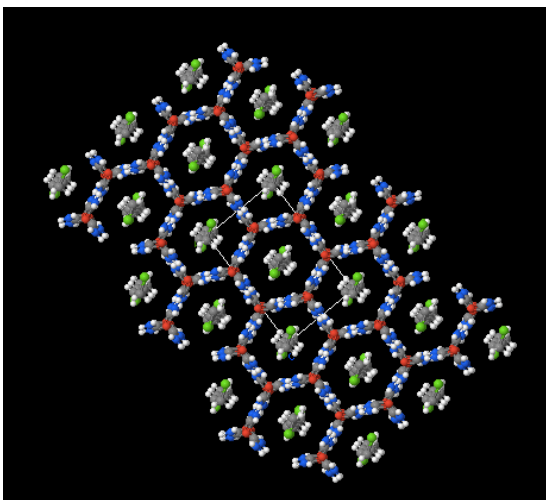
Еще о сокристаллах



- Гидрохинон образует клатраты с SO_2 , H_2S , HCN , HCl , HBr , CH_3OH , Ar , Kr , Xe .
- Хороший способ разделить Ne , Ar , Kr , Xe .
- Клатрат с ^{85}Kr является удобным источником β -излучения. Если смешать с ZnS , то может быть источником света.



- Гидраты $\text{CCl}_4 + \text{Kr}$ и $\text{CCl}_4 + \text{Xe}$ плавятся при 11.3 и 13.7 °C. Простой способ опреснения соленой воды: просто выделите и разложите клатрат!
- Образующиеся в мозге гидраты Xe : объяснение анестезии Полингом.



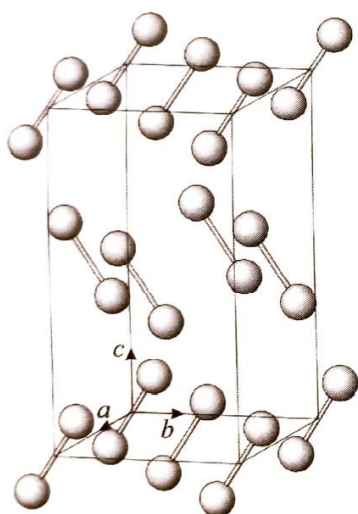
- Мочевина образует клатраты с линейными углеводородами. Это дает широко используемый метод отделения линейных углеводородов от разветвленных.

Правила строения ковалентных кристаллов

Правило Юм-Розери («правило 8-N»)

- Координационное число простых веществ равно $8-N$, где N – номер группы элемента в короткой форме таблицы Менделеева.
- Работает только для ковалентных структур. Исключения – бор и кристаллы с кратными связями (O_2 , N_2 , графит).

$N=7$. Координационное число = 1.



Структурный тип йода. I_2 , F_2 , Cl_2 , Br_2 .

периоды	ряды	группы															
		A I	B	A II	B	A III	B	A IV	B	A V	B	A VI	B	A VII	B	A VIII	B
1	1	H 1.0079 Водород												H 1.00260 Гелий			
2	2	Li 6.941 Литий		Be 9.01218 Бериллий		B 10.81 Бор		C 12.011 Углерод		N 14.0067 Азот		O 15.9994 Кислород		F 18.9984 Фтор		Ne 20.179 Неон	
3	3	Na 22.9898 Натрий		Mg 24.305 Магний		Al 26.9815 Алюминий		Si 28.0855 Кремний		P 30.9738 Фосфор		S 32.06 Сера		Cl 35.453 Хлор		Ar 39.948 Аргон	
4	4	K 39.0983 Калий		Ca 40.08 Кальций		Sc 44.9559 Скандий		Ti 47.88 Титан		V 50.9415 Ванадий		Cr 51.996 Хром		Mn 54.938 Марганец		Fe 55.847 Железо	
5	5	Rb 85.4678 Рубидий		Sr 87.62 Стронций		Y 88.9059 Иттрий		Zr 91.22 Цирконий		Nb 92.9064 Ниобий		Mo 95.94 Молибден		Tc 98 Технеций		Ru 101.07 Рутений	
6	6	Cs 132.905 Цезий		Ba 137.33 Барий		La 138.905 Лантан		Hf 178.49 Гафний		Ta 180.9479 Тантал		W 183.85 Вольфрам		Re 186.207 Рений		Os 190.2 Осий	
7	7	Fr 223 Франций		Ra 226.025 Радий		Ac 227.028 Актиний		Rf 261 Резерфордий		Db 262 Дубний		Sg 266 Сибгорий		Bh 264 Борий		Hs 277 Гассий	
8	8																
9	9																
10	10																
11	11																

*Лантаниды (лантаноиды)

58 Ce 140.12 Церий	59 Pr 140.908 Прометий	60 Nd 144.24 Неодим	61 Pm 144.912 Прометий	62 Sm 150.36 Самарий	63 Eu 151.96 Европий	64 Gd 157.25 Гадолиний	65 Tb 158.925 Тербий	66 Dy 162.50 Диспрозий	67 Ho 164.930 Гольмий	68 Er 167.259 Эрбий	69 Tm 168.933 Тулий	70 Yb 173.054 Иттербий	71 Lu 174.967 Лютеций
-----------------------	---------------------------	------------------------	---------------------------	-------------------------	-------------------------	---------------------------	-------------------------	---------------------------	--------------------------	------------------------	------------------------	---------------------------	--------------------------

**Актиниды (актиноиды)

90 Th 232.038 Торий	91 Pa 231.036 Пакетий	92 U 238.029 Уран	93 Np 237.048 Нептуний	94 Pu 244.064 Плутоний	95 Am 243.061 Америций	96 Cm 247.070 Курций	97 Bk 247.070 Берклий	98 Cf 251.083 Калифорний	99 Es 252.083 Эйнштейний	100 Fm 257.103 Фермий	101 Md 258.103 Менделеев	102 No 259.108 Нобелий	103 Lr 262.105 Лоренций
------------------------	--------------------------	----------------------	---------------------------	---------------------------	---------------------------	-------------------------	--------------------------	-----------------------------	-----------------------------	--------------------------	-----------------------------	---------------------------	----------------------------

Правило Юм-Розери («правило 8-N»)

- Координационное число простых веществ равно $8-N$, где N – номер группы элемента в короткой форме таблицы Менделеева.
- Работает только для ковалентных структур. Исключения – бор и кристаллы с кратными связями (O_2 , N_2 , графит).

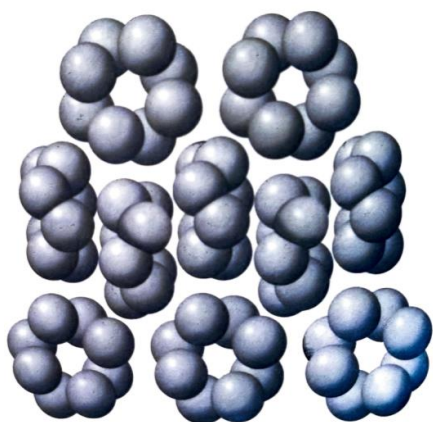
периоды		ряды	группы															
			A I	B II	A III	B IV	A V	B VI	A VII	B VIII	A VIII	B						
1	1	H 1.0079 1a Водород															He 4.00260 2a Гелий	
2	2	Li 6.941 2a Литий	Be 9.01218 2a Бериллий	B 10.81 2a Бор	C 12.011 2a Углерод	N 14.0067 2a Азот	O 15.9994 2a Кислород	F 18.9984 2a Фтор	Ne 20.179 2a Неон									
3	3	Na 22.9898 3a Натрий	Mg 24.305 3a Магний	Al 26.9815 3a Алюминий	Si 28.0855 3a Кремний	P 30.9738 3a Фосфор	S 32.06 3a Сера	Cl 35.453 3a Хлор	Ar 39.948 3a Аргон									
4	4	K 39.0983 4a Калий	Ca 40.08 4a Кальций	Sc 44.9559 4a Скандий	Ti 47.88 4a Титан	V 50.9415 4a Ванадий	Cr 51.996 4a Хром	Mn 54.938 4a Марганец	Fe 55.847 4a Железо	Co 58.9332 4a Кобальт	Ni 58.69 4a Никель							
	5	Cu 63.546 5a Медь	Zn 65.38 5a Цинк	Ga 69.72 5a Галлий	Ge 72.59 5a Германий	As 74.9216 5a Мышьяк	Se 78.96 5a Селен	Br 79.904 5a Бром	Kr 83.80 5a Криптон									
5	6	Rb 85.4678 5a Рубидий	Sr 87.62 5a Стронций	Y 88.9059 5a Иттрий	Zr 91.22 5a Цирконий	Nb 92.9064 5a Ниобий	Mo 95.94 5a Молибден	Tc 98 5a Технеций	Ru 101.07 5a Рутений	Rh 106.42 5a Родий	Pd 106.42 5a Палладий							
	7	Ag 107.8682 5a Серебро	Cd 112.41 5a Кадмий	In 114.82 5a Индий	Sn 118.69 5a Олово	Sb 121.75 5a Сурьма	Te 127.60 5a Теллур	I 126.904 5a Йод	Xe 131.29 5a Ксенон									
6	8	Cs 132.905 6a Цезий	Ba 137.33 6a Барий	La 138.905 6a Лантан	Hf 178.49 6a Гафний	Ta 180.9479 6a Тантал	W 183.85 6a Вольфрам	Re 186.207 6a Рений	Os 190.2 6a Осий	Ir 192.22 6a Иридий	Pt 195.08 6a Платина							
	9	Au 196.967 6a Золото	Hg 200.59 6a Ртуть	Tl 204.385 6a Таллий	Pb 207.2 6a Свинец	Bi 208.98 6a Висмут	Po 209 6a Полоний	At 210 6a Астат	Rn 222 6a Радон									
7	10	Fr 223 7a Франций	Ra 226.025 7a Радий	Ac 227.028 7a Актиний	Rf 261 7a Резерфордий	Db 262 7a Дубний	Sg 266 7a Сибгорий	Bh 264 7a Борий	Hs 265 7a Гассий	Mt 268 7a Мейтнерий								
	11	La 138.905 7a Лантан	Ce 140.12 7a Церий	Pr 140.9076 7a Прометий	Sm 150.36 7a Самарий	Eu 151.964 7a Европий	Gd 157.25 7a Гадолиний	Tb 158.925 7a Тербий	Dy 162.50 7a Диспрозий	Ho 164.9303 7a Гольмий	Er 167.259 7a Эрбий	Tm 168.9328 7a Тулий	Yb 173.0546 7a Иттербий	Lu 174.967 7a Лютеций				

*Лантаниды (лантаноиды)

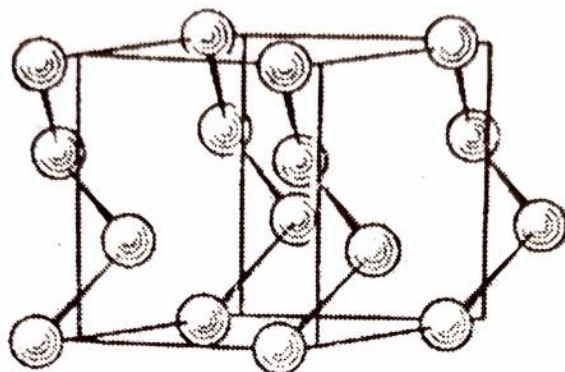
58 Ce 140.12 Церий	59 Pr 140.9076 Прометий	60 Nd 144.24 Неодим	61 Pm 144.9126 Прометий	62 Sm 150.36 Самарий	63 Eu 151.964 Европий	64 Gd 157.25 Гадолиний	65 Tb 158.925 Тербий	66 Dy 162.50 Диспрозий	67 Ho 164.9303 Гольмий	68 Er 167.259 Эрбий	69 Tm 168.9328 Тулий	70 Yb 173.0546 Иттербий	71 Lu 174.967 Лютеций
-----------------------	----------------------------	------------------------	----------------------------	-------------------------	--------------------------	---------------------------	-------------------------	---------------------------	---------------------------	------------------------	-------------------------	----------------------------	--------------------------

**Актиниды (актиноиды)

90 Th 232.0377 Торий	91 Pa 231.036 Протактиний	92 U 238.02891 Уран	93 Np 237.04817 Нептуний	94 Pu 244.0642 Плутоний	95 Am 243.06138 Америций	96 Cm 247.07035 Курций	97 Bk 247.07035 Берклий	98 Cf 251.07887 Калифорний	99 Es 252.0833 Эйнштейний	100 Fm 257.10371 Фермий	101 Md 258.10528 Менделеев	102 No 259.10888 Нобелий	103 Lr 260.10534 Лавриенций
-------------------------	------------------------------	------------------------	-----------------------------	----------------------------	-----------------------------	---------------------------	----------------------------	-------------------------------	------------------------------	----------------------------	-------------------------------	-----------------------------	--------------------------------



Структурный тип α -S₈

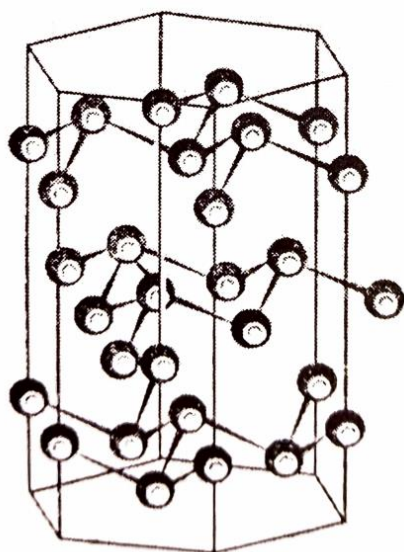


Структурный тип селена
(сера и кислород под давлением, теллур).

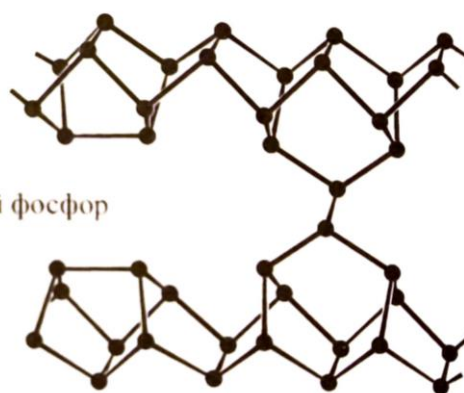
Правило Юм-Розери («правило 8-N»)

- Координационное число простых веществ равно $8-N$, где N – номер группы элемента в короткой форме таблицы Менделеева.
- Работает только для ковалентных структур. Исключения – бор и кристаллы с кратными связями (O_2 , N_2 , графит).

$N=5$. Координационное число = 3.



Структурный тип As.
Sb, Bi.



Волокнистый фосфор

Все аллотропы фосфора.
Фазы азота под давлением.

Периоды	Ряды	Группы															
		A I	B II	A III	B IV	A V	B VI	A VII	B VIII	A	B	A	B	A	B	A	B
1	1	H 1.0079 Водород								He 4.00260 Гелий							
2	2	Li 6.941 Литий	Be 9.01218 Бериллий	B 10.81 Бор	C 12.011 Углерод	N 14.0067 Азот	O 15.9994 Кислород	F 18.9984 Фтор	Ne 20.179 Неон								
3	3	Na 22.9898 Натрий	Mg 24.305 Магний	Al 26.9815 Алюминий	Si 28.0855 Кремний	P 30.9738 Фосфор	S 32.06 Сера	Cl 35.453 Хлор	Ar 39.948 Аргон								
4	4	K 39.0983 Калий	Ca 40.08 Кальций	Sc 44.9559 Скандий	Ti 47.88 Титан	V 50.9415 Ванадий	Cr 51.996 Хром	Mn 54.938 Марганец	Fe 55.847 Железо	Co 58.9332 Кобальт	Ni 58.69 Никель						
5	5	Rb 85.4678 Рубидий	Sr 87.62 Стронций	Y 88.9059 Иттрий	Zr 91.224 Цирконий	Nb 92.9064 Ниобий	Mo 95.94 Молибден	Tc 98 Технеций	Ru 101.07 Рутений	Rh 102.905 Родий	Pd 106.42 Палладий						
6	6	Cs 132.905 Цезий	Ba 137.33 Барий	La 138.905 Лантан	Hf 178.49 Гафний	Ta 180.9479 Тантал	W 183.85 Вольфрам	Re 186.207 Рений	Os 190.2 Осий	Ir 192.22 Иридий	Pt 195.08 Платина						
7	7	Fr 223 Франций	Ra 226.025 Радий	Ac 227.028 Актиний	Rf 261 Резерфордий	Db 262 Дубний	Sg 266 Сибгорий	Bh 264 Борий	Hs 277 Гассий	Mt 268 Мейтнерий							

*Лантаниды (лантаноиды)

58 Ce 140.12 Церий	59 Pr 140.908 Прометий	60 Nd 144.24 Неодим	61 Pm 144.9126 Прометий	62 Sm 150.36 Самарий	63 Eu 151.964 Европий	64 Gd 157.25 Гадолиний	65 Tb 158.925 Тербий	66 Dy 162.50 Диспрозий	67 Ho 164.930 Гольмий	68 Er 167.259 Эрбий	69 Tm 168.930 Тулий	70 Yb 173.054 Иттербий	71 Lu 174.967 Лютеций
-----------------------	---------------------------	------------------------	----------------------------	-------------------------	--------------------------	---------------------------	-------------------------	---------------------------	--------------------------	------------------------	------------------------	---------------------------	--------------------------

**Актиниды (актиноиды)

90 Th 232.0377 Торий	91 Pa 231.036 Пакорий	92 U 238.0289 Уран	93 Np 237.0481 Нептуний	94 Pu 244.0642 Плутоний	95 Am 243.0613 Америций	96 Cm 247.0743 Курций	97 Bk 247.0703 Берклий	98 Cf 251.0795 Калифорний	99 Es 252.0833 Эйнштейний	100 Fm 257.1036 Фермий	101 Md 258.1039 Менделеев	102 No 259.1087 Нобелий	103 Lr 260.1054 Лоренций
-------------------------	--------------------------	-----------------------	----------------------------	----------------------------	----------------------------	--------------------------	---------------------------	------------------------------	------------------------------	---------------------------	------------------------------	----------------------------	-----------------------------

Правило Юм-Розери («правило 8-N»)

- Координационное число простых веществ равно $8-N$, где N – номер группы элемента в короткой форме таблицы Менделеева.
- Работает только для ковалентных структур. Исключения – бор и кристаллы с кратными связями (O_2 , N_2 , графит).

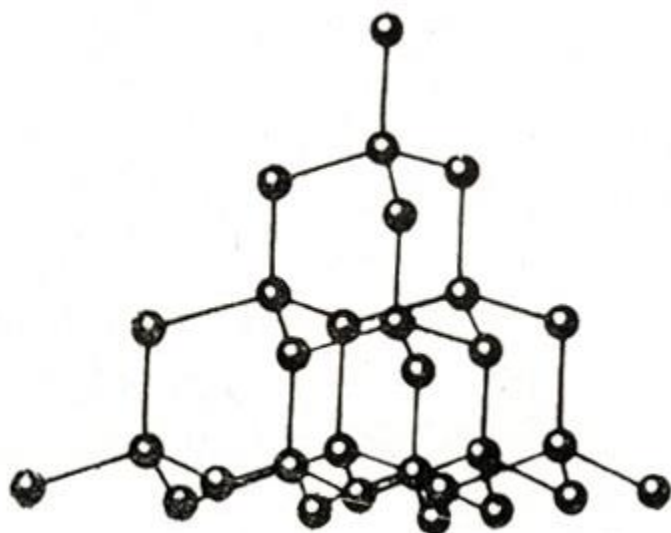
периоды	ряды	группы																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																										
		A I В	A II В	A III В	A IV В	A V В	A VI В	A VII В	A VIII В	A IX В	A X В	A XI В	A XII В	A XIII В	A XIV В	A XV В	A XVI В	A XVII В	A XVIII В	A XIX В	A XX В	A XXI В	A XXII В	A XXIII В	A XXIV В	A XXV В	A XXVI В	A XXVII В	A XXVIII В	A XXIX В	A XXX В																																																																																																																																																																																																																																																																																																																													
1	1	Н 1,0079 1s¹ Водород																			Н	He 2,0160 1s² Гелий																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																						
2	2	Li 6,941 2s¹ Литий	Be 9,01218 2s² Бериллий	B 10,81 2s²2p¹ Бор	C 12,011 2s²2p² Углерод	N 14,0067 2s²2p³ Азот	O 15,9994 2s²2p⁴ Кислород	F 18,9984 2s²2p⁵ Фтор	Ne 20,179 2s²2p⁶ Неон											Na 22,9898 3s¹ Натрий	Mg 24,305 3s² Магний	Al 26,9815 3s²3p¹ Алюминий	Si 28,0855 3s²3p² Кремний	P 30,9738 3s²3p³ Фосфор	S 32,06 3s²3p⁴ Сера	Cl 35,453 3s²3p⁵ Хлор	Ar 39,948 3s²3p⁶ Аргон																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																	
3	3	K 39,0983 4s¹ Калий	Ca 40,08 4s² Кальций	Sc 44,956 3d¹4s² Скандий	Ti 47,88 3d²4s² Титан	V 50,9415 3d³4s² Ванадий	Cr 51,996 3d⁵4s¹ Хром	Mn 54,938 3d⁵4s² Марганец	Fe 55,847 3d⁶4s² Железо	Co 58,9332 3d⁷4s² Кобальт	Ni 58,69 3d⁸4s² Никель											Zn 65,38 4s² Цинк	Ga 69,72 4s²4p¹ Галлий	Ge 72,59 4s²4p² Германий	As 74,9216 4s²4p³ Мышьяк	Se 78,96 4d⁶4p⁴ Селен	Br 79,904 4d⁶4p⁵ Бром	Kr 83,80 4d⁶4p⁶ Криpton																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																
4	4	Rb 85,4678 5s¹ Рубидий	Sr 87,62 5s² Стронций	Y 88,9059 4d¹5s² Иттрий	Zr 91,224 4d²5s² Цирконий	Nb 92,906 4d⁴5s¹ Нобий	Mo 95,94 4d⁵5s¹ Молибден	Tc 98 4d⁵5s² Технеций	Ru 101,07 4d⁷5s¹ Рутений	Rh 102,905 4d⁸5s¹ Родий	Pd 106,42 4d⁹5s¹ Палладий											Cd 112,41 5s²5d¹⁰ Кадмий	In 114,82 5s²5d¹⁰ Индий	Sn 118,69 5s²5d¹⁰ Олово	Sb 121,75 5s²5d¹⁰ Сурьма	Te 127,60 5s²5d¹⁰ Теллур	I 126,905 5s²5d¹⁰ Йод	Xe 131,29 5s²5d¹⁰ Ксенон																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																
5	5	Cs 132,905 6s¹ Цезий	Ba 137,33 6s² Барий	La 138,905 5d¹6s² Лантан	Hf 178,49 5d²6s² Гафний	Ta 180,947 5d³6s² Тантал	W 183,85 5d⁴6s² Вольфрам	Re 186,207 5d⁵6s¹ Рений	Os 190,23 5d⁶6s¹ Осий	Ir 192,22 5d⁷6s¹ Иридий	Pt 195,08 5d⁹6s¹ Платина											Hg 200,59 6s²6d¹⁰ Ртуть	Tl 204,38 6s²6d¹⁰ Таллий	Pb 207,2 6s²6d¹⁰ Свинец	Bi 208,98 6s²6d¹⁰ Висмут	Po 209 6s²6d¹⁰ Полоний	At 210 6s²6d¹⁰ Астат	Rn 222 6s²6d¹⁰ Радон																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																
6	6	Fr [223] 7s¹ Франций	Ra 226,025 7s² Радий	Ac 227,028 6d¹7s² Актиний	Th 232,038 6d²7s² Торий	Pa 231,036 5f²7s² Пакорий	U 238,029 5f³7s² Уран	Np 237,048 5f⁴7s² Нептуний	Pu 244,064 5f⁶7s² Плутоний	Am 243,061 5f⁷7s² Америций	Cm 247,070 5f⁷7s² Курций	Bk 247,070 5f⁹7s² Беркелий	Cf 251,083 5f¹⁰7s² Калифорний	Es 252,083 5f¹¹7s² Эйнштейний	Fm 257,105 5f¹²7s² Фермий	Md 258,10 5f¹³7s² Мейтнерий	Nv 259,10 5f¹⁴7s² Нобелий	Lr 260,10 5f¹⁴7s² Лантанид																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																										
7	7	111 [272] 7s¹ Рохтерий	112 [277] 7s² Копернит	113 [284] 7s²7p¹ Теннесс	114 [289] 7s²7p² Флеретт	115 [290] 7s²7p³ Дубний	116 [293] 7s²7p⁴ Сибургий	117 [294] 7s²7p⁵ Борий	118 [294] 7s²7p⁶ Теннесси	119 [295] 7s²7p⁶ Мейтнерий	120 [295] 7s²7p⁶ Дарвин																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																	
8	8	119 [295] 7s²7p⁶ Угнет	120 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	121 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	122 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	123 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	124 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	125 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	126 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	127 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	128 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	129 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	130 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	131 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	132 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	133 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	134 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	135 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	136 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	137 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	138 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	139 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	140 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	141 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	142 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	143 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	144 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	145 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	146 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	147 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	148 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	149 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	150 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	151 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	152 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	153 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	154 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	155 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	156 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	157 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	158 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	159 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	160 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	161 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	162 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	163 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	164 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	165 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	166 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	167 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	168 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	169 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	170 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	171 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	172 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	173 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	174 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	175 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	176 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	177 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	178 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	179 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	180 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	181 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	182 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	183 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	184 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	185 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	186 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	187 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	188 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	189 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	190 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	191 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	192 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	193 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	194 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	195 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	196 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	197 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	198 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	199 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	200 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	201 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	202 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	203 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	204 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	205 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	206 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	207 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	208 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	209 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	210 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	211 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	212 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	213 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	214 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	215 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	216 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	217 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	218 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	219 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	220 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	221 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	222 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	223 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	224 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	225 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	226 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	227 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	228 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	229 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	230 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	231 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	232 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	233 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	234 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	235 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	236 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	237 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	238 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	239 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	240 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	241 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	242 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	243 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	244 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	245 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	246 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	247 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	248 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	249 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	250 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	251 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	252 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	253 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	254 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	255 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	256 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	257 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	258 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	259 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	260 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	261 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	262 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	263 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	264 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	265 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	266 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	267 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	268 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	269 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	270 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	271 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	272 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	273 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	274 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	275 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	276 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	277 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	278 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	279 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	280 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	281 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	282 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	283 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	284 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	285 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	286 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	287 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	288 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	289 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	290 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	291 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	292 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	293 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	294 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	295 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	296 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	297 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	298 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	299 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	300 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	301 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	302 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	303 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	304 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	305 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	306 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	307 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	308 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	309 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	310 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	311 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	312 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	313 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	314 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	315 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	316 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	317 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	318 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	319 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	320 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	321 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	322 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	323 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	324 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	325 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	326 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	327 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	328 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	329 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	330 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	331 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	332 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	333 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	334 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	335 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	336 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	337 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	338 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	339 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	340 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	341 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	342 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	343 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	344 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	345 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	346 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	347 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	348 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	349 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	350 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	351 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	352 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	353 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	354 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	355 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	356 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	357 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	358 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	359 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	360 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	361 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	362 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	363 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	364 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	365 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	366 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	367 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	368 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	369 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	370 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	371 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	372 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	373 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	374 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	375 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	376 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	377 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	378 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	379 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	380 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	381 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	382 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	383 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	384 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	385 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	386 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	387 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	388 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	389 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	390 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	391 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	392 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	393 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	394 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	395 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	396 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	397 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	398 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	399 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	400 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	401 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	402 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	403 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	404 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	405 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	406 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	407 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	408 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	409 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	410 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	411 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	412 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	413 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	414 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	415 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	416 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	417 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	418 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	419 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	420 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	421 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	422 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	423 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	424 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	425 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	426 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	427 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	428 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	429 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	430 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	431 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	432 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	433 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	434 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	435 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	436 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	437 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	438 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	439 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	440 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	441 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	442 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	443 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	444 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	445 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	446 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	447 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	448 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	449 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	450 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	451 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	452 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	453 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	454 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	455 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	456 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	457 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	458 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	459 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	460 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	461 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	462 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	463 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	464 [295] 7s²7p⁶ Дарвин	465 [295] 7s²7p⁶

*Лантаниды (лантаноиды)

58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu
140.12	140.90	144.24	144.91	150.36	151.96	157.25	158.93	162.50	164.93	167.26	168.93	173.05	174.97
Церий	Прометий	Неодим	Прометий	Самарий	Европий	Гадолиний	Тербий	Диспрозий	Гольмий	Эрбий	Тулий	Иттербий	Лютеций

**Актиниды (актиноиды)

90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr
232.0377	231.0362	238.0289	237.0481	244.0642	243.0613	247.0713	247.0713	251.1088	252.0833	257.1037	289.1010	289.1010	260.1077
Торий	Пакетий	Уран	Нептуний	Плутоний	Америций	Кюрий	Берклий	Калифорний	Эйнштейний	Фермий	Менделеев	Нобелий	Лавриенс



Структурный тип алмаза.
Si, Ge, серое олово.

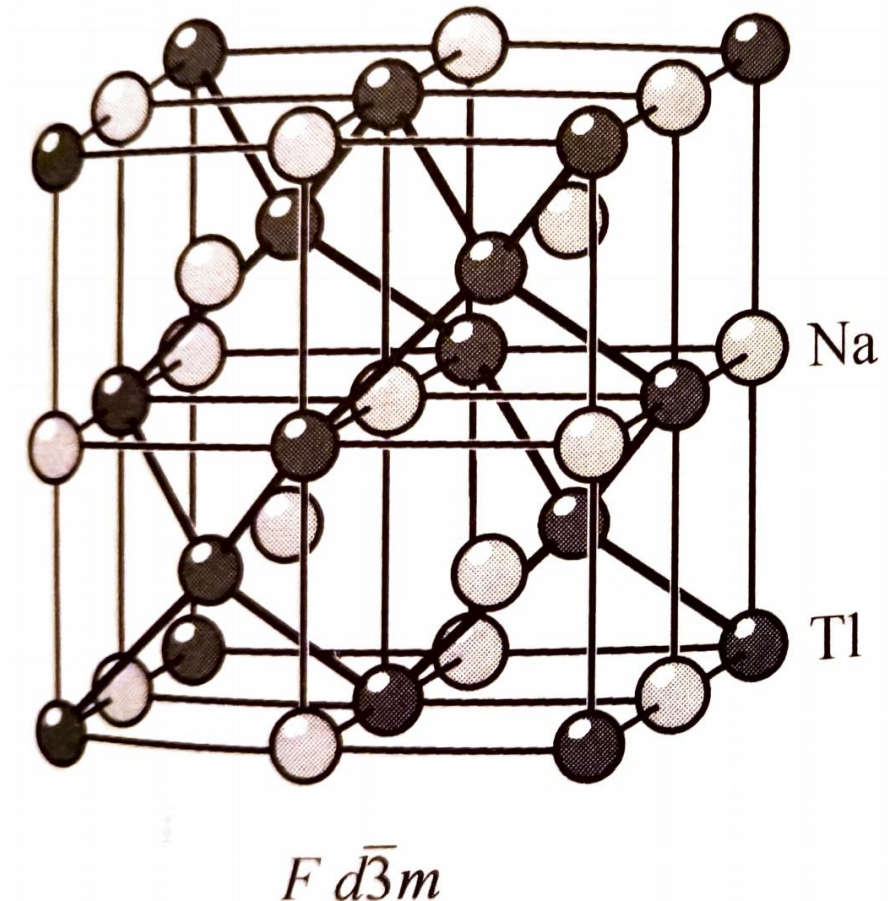
Правило Цинтля-Клемма: расширенное правило 8-N

Получив электрон, элемент ведет себя как элемент следующей группы, а потеряв электрон – как элемент предыдущей группы.

«Электронная алхимия»: как из таллия (N=3) сделать углерод (N = 4)?

В NaTl атом Na отдает 1 электрон атому Tl: $N=3 \rightarrow N=4$!

Атомы Tl образуют алмазную подрешетку.



Правило Цинтля-Клемма: расширенное правило 8-N

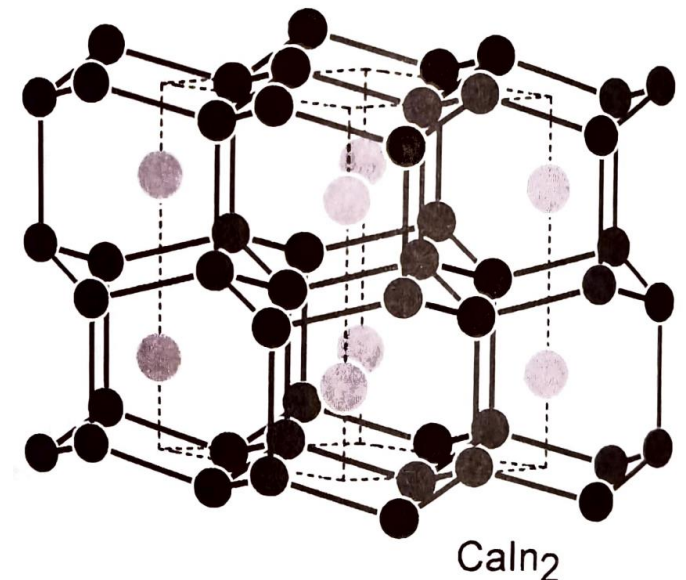
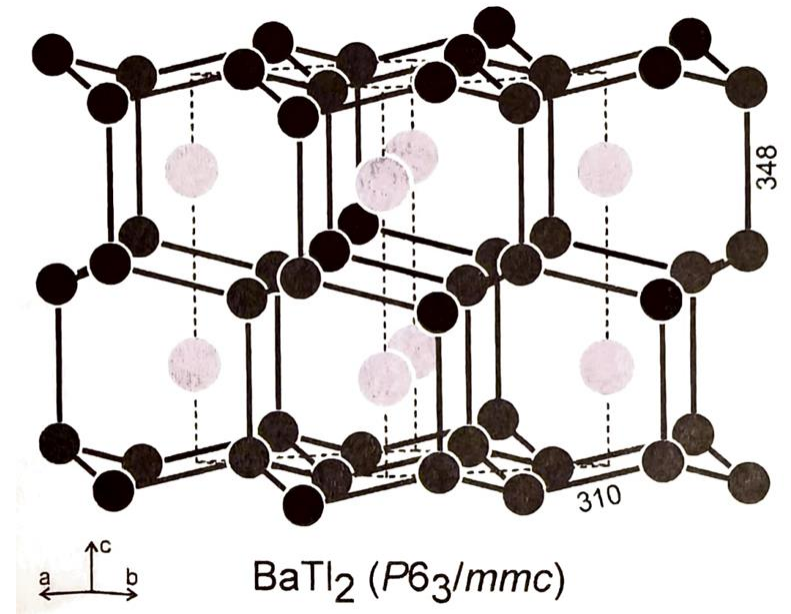
Получив электрон, элемент ведет себя как элемент следующей группы, а потеряв электрон – как элемент предыдущей группы.

«Электронная алхимия»: как из таллия и галлия ($N=3$) сделать углерод ($N=4$)?

В BaTl_2 (и CaIn_2) атом Ba (и атом Ca) отдает 2 электрона двум атомам Tl – то есть 1 электрона на 1 атом Tl:

$N=3 \rightarrow N=4$!

Атомы Tl образуют алмазную (или лонсдейлитовую) подрешетку.



Правило Цинтля-Клемма: расширенное правило 8-N

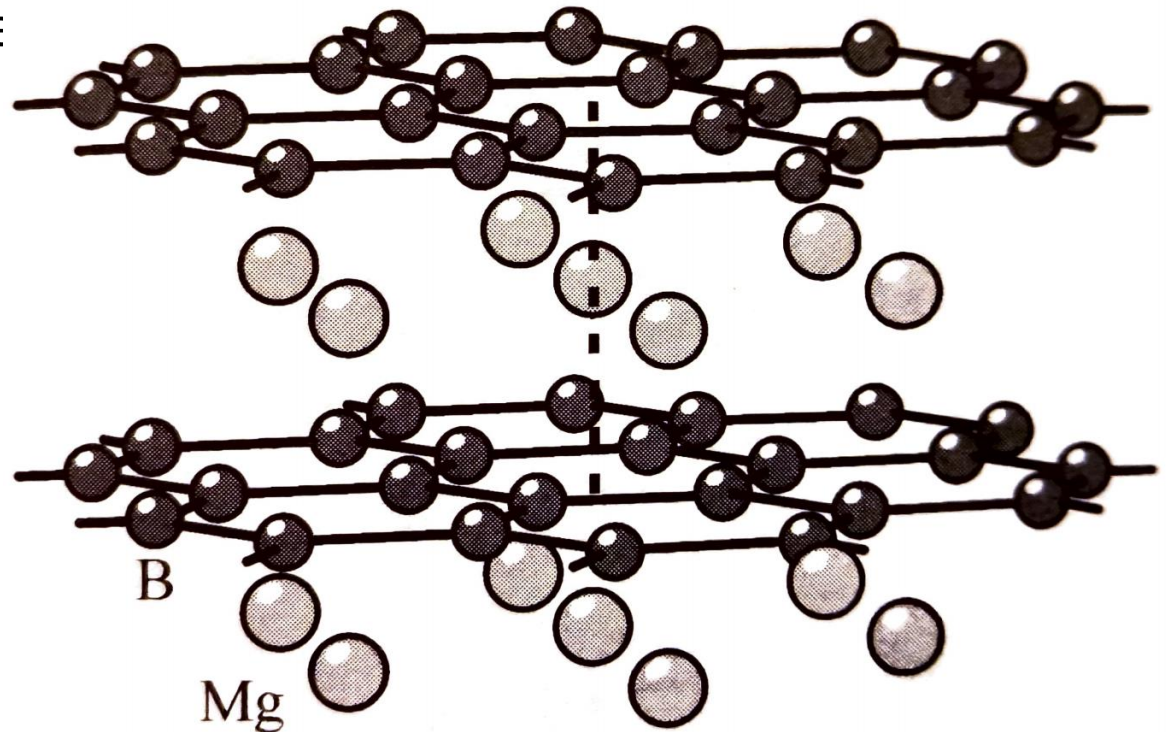
Получив электрон, элемент ведет себя как элемент следующей группы, а потеряв электрон – как элемент предыдущей группы.

«Электронная алхимия»: как из бора и галлия ($N=3$) сделать углерод ($N=4$)?

В MgB_2 (и BaGa_2) атом Mg (и атом Ba) отдает 2 электрона двум атомам B – то есть 1 электрона на 1 атом B: $N=3 \rightarrow N=4$!

Атомы B образуют графеновые

MgB_2 – очень интересный
сверхпроводник ($T_c = 39 \text{ K}$).



Правило Цинтля-Клемма: расширенное правило 8-N

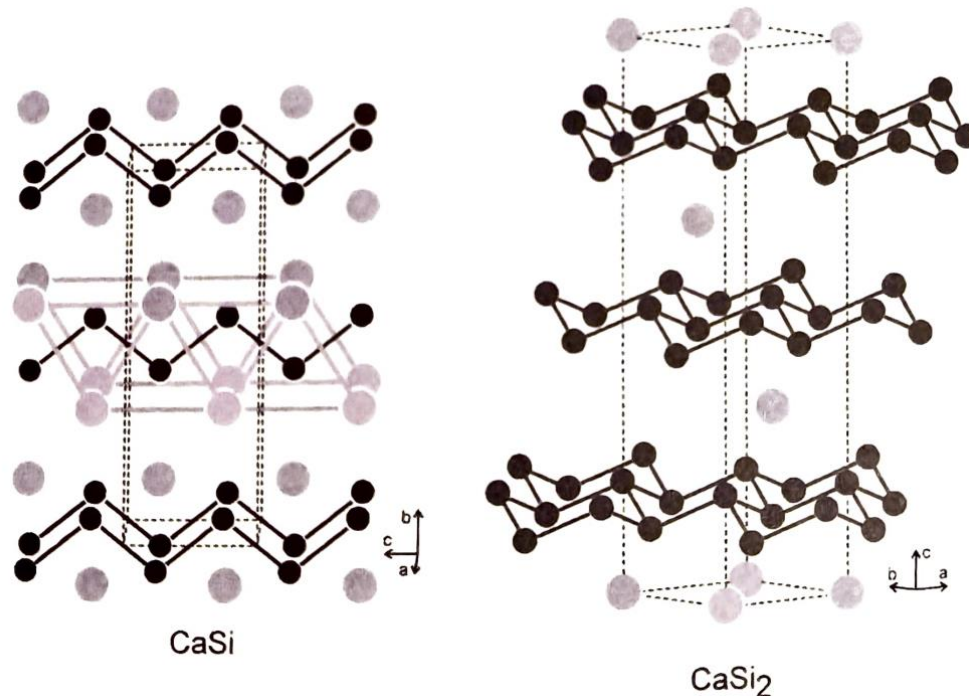
Получив электрон, элемент ведет себя как элемент следующей группы, а потеряв электрон – как элемент предыдущей группы.

«Электронная алхимия»: как из кремния ($N=4$) сделать фосфор ($N=5$) и серу ($N=6$)?

В CaSi и CaSi_2 атом Ca отдает 2 электрона.

В CaSi каждый атом Si получает 2 электрона: $N=4 \rightarrow N=6$! Цепочки атомов Si !

В CaSi_2 каждый атом Si получает 1 электрон: $N=4 \rightarrow N=5$! Слои атомов Si с КЧ=3!



Модель отталкивания электронных пар валентной оболочки (ОЭПВО).

- Стерическое число (СЧ) = координационное число + число неподеленных электронных пар.
- Для каждого СЧ отталкивание электронных пар приводит к определенным конфигурациям: например, треугольной для СЧ=3, тетраэдрической для СЧ=4 и октаэдрической для СЧ=6.
- Объем неподеленной пары больше, чем связывающей → валентные углы в молекулах NH_3 и H_2O $< 109.5^\circ$.

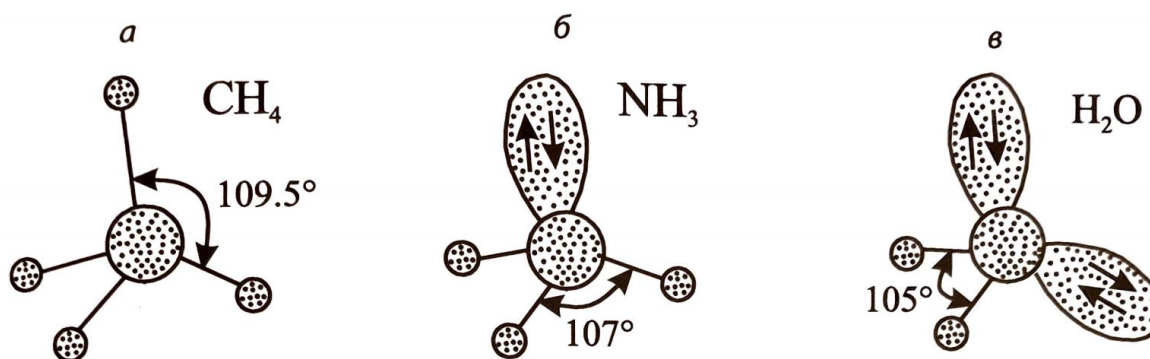


Рис. 3.6. Влияние неподеленных электронных пар E на тетраэдрическую sp^3 -гибридизацию:

a — E отсутствуют (молекула метана CH_4); $б$ — одна E (молекула аммиака NH_3);
 $в$ — две E (молекула воды H_2O)

Основные идеи

- Физические свойства кристаллов анизотропны и описываются тензорами различных рангов.
- Полезны понятия координационного числа и координационного полиэдра. Полиэдрическое представление позволяет лучше понять сложные структуры.
- Искажения и упорядоченные замещения понижают симметрию структуры, порождая производные структурные типы. «Деревья Бернигхаузена» показывают взаимоотношения такого рода.
- Правила Полинга работают не только для ионных, но и для ионно-ковалентных кристаллов. Правило баланса валентных усилий связей – универсально!
- Для ковалентных кристаллов существует правило “8-N” и его расширения, а модель отталкивания электронных пар валентной оболочки позволяет объяснять валентные углы.
- Для молекулярных кристаллов центральным является принцип плотнейшей упаковки молекул.

Домашние задания

- Посмотреть 15-минутную видеолекцию

<https://www.youtube.com/watch?v=90UbEgUovBA>

- Повторить весь пройденный материал.