

# 第6章 固体における結合

6.1 結合エネルギー

6.2 共有結合

6.3 イオン結合

6.4 金属結合

6.5 ファン・デル・ワールス結合

6.6 結合の概念図

# ファン・デル・ワールス結合①

H <sup>1</sup>	4K
hcp	
3.75	
6.12	

Li	78K	Be
bcc		hcp
3.491		2.27
		3.59

Na	5K	Mg
bcc		hcp
4.225		3.21
		5.21

K	5K	Ca
bcc		fcc
5.225		5.58
		3.31

Rb	5K	Sr
bcc		fcc
5.585		6.08
		3.65

Cs	5K	Ba
bcc		bcc
6.045		5.02
		3.77

表 3 元素の結晶構造。室温か絶対温度で示された温度における最も一般的な構造のデータが示されている。無機結晶構造データベース (ICSD) がインターネット上に発表されている。

He <sup>4</sup>	2K
hcp	
3.57	
5.83	

B	rhomb.	C	diamond	N	20K	O	complex	F
				cubic		(O <sub>2</sub> )		
				3.567		5.66		
				(N <sub>2</sub> )				

Al	fcc	Si	diamond	P	complex	S	complex	Cl	Ar	4K
										fcc
				4.05	5.430			(Cl <sub>2</sub> )		5.31

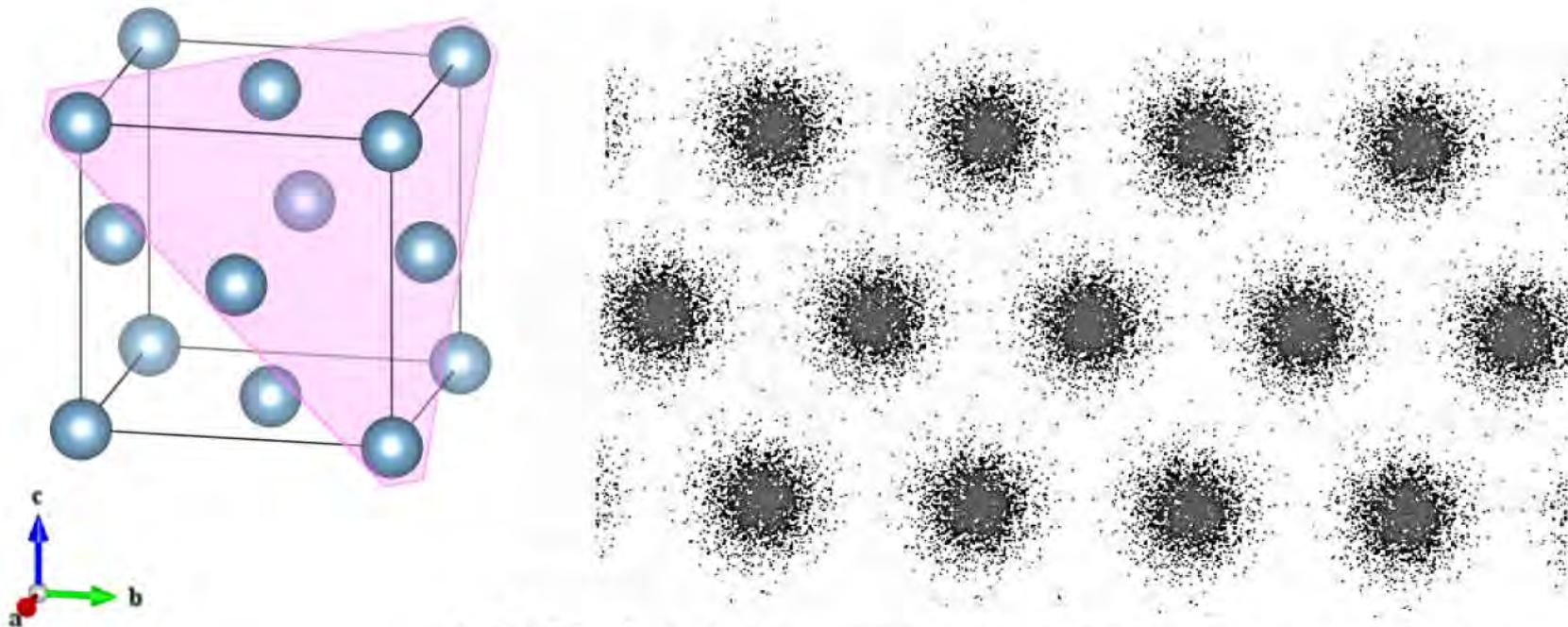
Ge	diamond	As	rhomb.	Se	hex.	Br	complex	Kr	4K
									fcc
				5.658		(Br <sub>2</sub> )			5.64

Sb	diamond	Te	rhomb.	I	hex.	Xe	complex	Xe	4K
									fcc
				6.49		(I <sub>2</sub> )			6.13

Pb	fcc	Bi	rhomb.	Po	sc	At		Rn
				3.34	—	—	—	

# ファン・デル・ワールス結合②

## Ne結晶 (111) 断面における電子密度分布



3-16 図 Ne 結晶 (fcc,  $a = 4.52 \text{ \AA}$ ) の (111) 断面における外殻電子 ( $2s^2(2p)^6$ ) の密度分布。動径分布極大位置  $0.354 \text{ \AA}$ , 原子間距離  $3.20 \text{ \AA}$  にとってある。

希ガス (Ne, Ar, Krなど) : 閉殻構造をもち、電子密度分布は球対称

# ファン・デル・ワールス結合③

Li 453.7	Be 1562
-------------	------------

Na 371.0	Mg 922
-------------	-----------

K 336.3	Ca 1113	Sc 1814	Ti 1946	V 2202	Cr 2133	Mn 1520	Fe 1811	Co 1770	Ni 1728	Cu 1358	Zn 692.7	Ga 302.9	Ge 1211	As 1089	Se 494	Br 265.9	Kr 115.8
------------	------------	------------	------------	-----------	------------	------------	------------	------------	------------	------------	-------------	-------------	------------	------------	-----------	-------------	-------------

Rb 312.6	Sr 1042	Y 1801	Zr 2128	Nb 2750	Mo 2895	Tc 2477	Ru 2527	Rh 2236	Pd 1827	Ag 1235	Cd 594.3	In 429.8	Sn 505.1	Sb 903.9	Te 722.7	I 386.7	Xe 161.4
-------------	------------	-----------	------------	------------	------------	------------	------------	------------	------------	------------	-------------	-------------	-------------	-------------	-------------	------------	-------------

Cs 301.6	Ba 1002	La 1194	Hf 2504	Ta 3293	W 3695	Re 3459	Os 3306	Ir 2720	Pt 2045	Au 1338	Hg 234.3	Tl 577	Pb 600.7	Bi 544.6	Po 527	At —	Rn —
-------------	------------	------------	------------	------------	-----------	------------	------------	------------	------------	------------	-------------	-----------	-------------	-------------	-----------	---------	---------

Fr 973	Ra 1324	Ac —	Ce 1072	Pr 1205	Nd 1290	Pm —	Sm 1346	Eu 1091	Gd 1587	Tb 1632	Dy 1684	Ho 1745	Er 1797	Tm 1820	Yb 1098	Lu 1938
-----------	------------	---------	------------	------------	------------	---------	------------	------------	------------	------------	------------	------------	------------	------------	------------	------------

表 2 絶対温度で表した融点. (R. H. Lamoreaux による.)

## 元素の融点 (K)

B 2365	C —	N 63.15	O 54.36	F 53.48	Ne 24.56
-----------	--------	------------	------------	------------	-------------

Al 933.5	Si 1687	P w 317 r 863	S 388.4	Cl 172.2	Ar 83.81
-------------	------------	---------------------	------------	-------------	-------------

Ge 1211	As 1089	Se 494	Br 265.9	Kr 115.8	—
------------	------------	-----------	-------------	-------------	---

Sn 505.1	Sb 903.9	Te 722.7	I 386.7	Xe 161.4	—
-------------	-------------	-------------	------------	-------------	---

Pb 600.7	Bi 544.6	Po 527	At —	Rn —	—
-------------	-------------	-----------	---------	---------	---

Th 2031	Pa 1848	U 1406	Np 910	Pu 913	Am 1449	Cm 1613	Bk 1562	Cf —	Es —	Fm —	Md —	No —	Lw —
------------	------------	-----------	-----------	-----------	------------	------------	------------	---------	---------	---------	---------	---------	---------

# ファン・デル・ワールス結合④

Li	Be
158.	320.
1.63	3.32
37.7	76.5

表 1 元素の凝集エネルギー。0K, 1気圧の固体を基底状態にあるばらばらの中性原子にするのに要するエネルギー。データは Leo Brewer 教授による。

B	C	N	O	F	Ne
561	711.	474.	251.	81.0	1.92
5.81	7.37	4.92	2.60	0.84	0.020
134	170.	113.4	60.03	19.37	0.46

Na	Mg
107.	145.
1.113	1.51
25.67	34.7

## 元素の凝集エネルギー

	kJ/mol	
	eV/atom	
	keal/mol	

K	Ca
90.1	178
0.934	1.84
21.54	42.5

Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
376	468.	512.	395.	282.	413.	424.	428.	336.	130.	271.	372.	285.3	237	118.	11.2
4.85	5.31	4.10	2.92	4.28	4.39	4.44	3.49	1.35	2.81	3.85	2.96	2.46	1.22	0.116	
111.8	122.4	94.5	67.4	98.7	101.3	102.4	80.4	31.04	64.8	88.8	68.2	56.7	28.18	2.68	

Rb	Sr
82.2	166.
0.852	1.72
19.64	39.7

Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
422.	603.	730.	658	661.	650.	554.	376.	284.	112.	243.	303.	265.	211	107.	15.9
6.25	7.75	6.82	6.85	6.74	5.75	3.89	2.95	1.16	2.52	3.14	2.75	2.19	1.11	0.16	
100.8	144.2	174.5	157.2	158.	155.4	132.5	89.8	68.0	26.73	58.1	72.4	63.4	50.34	25.62	3.80

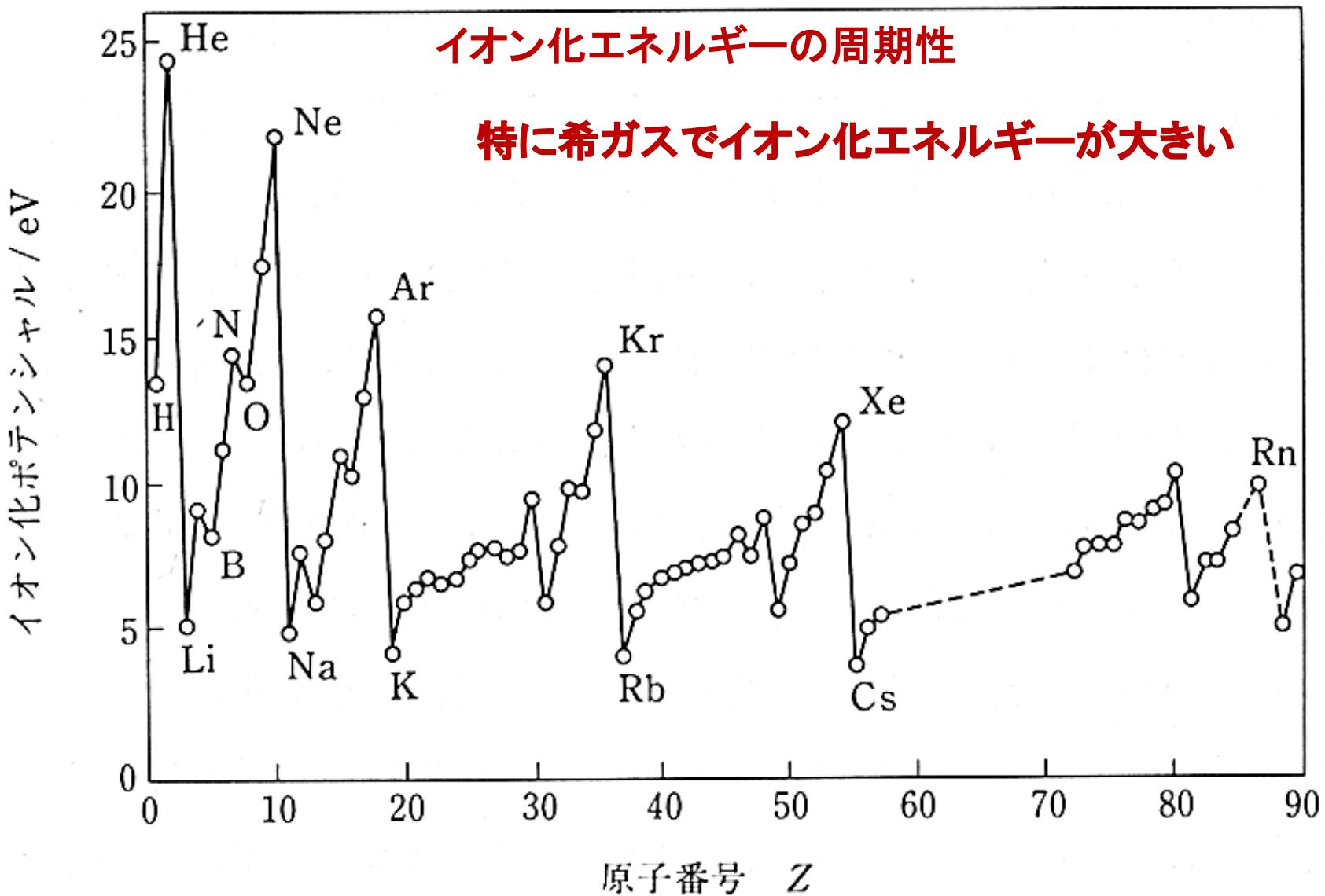
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn
77.6	183.	431.	621.	782.	859.	775.	788.	670.	564.	368.	65.	182.	196.	210.	144.	19.5	
0.804	1.90	4.47	6.44	8.10	8.90	8.03	8.17	6.94	5.84	3.81	0.67	1.88	2.03	2.18	1.50	0.202	
43.7	103.1	148.4	186.9	205.2	185.2	188.4	160.1	134.7	87.96	15.5	43.4	46.78	50.2	34.5		4.66	

Fr	Ra	Ac
160.	410.	
1.66	4.25	
38.2	98.	

Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
417.	357.	328.		206.	179.	400.	391.	294.	302.	317.	233.	154.	428.
4.32	3.70	3.40		2.14	1.86	4.14	4.05	3.04	3.14	3.29	2.42	1.60	4.43
99.7	85.3	78.5		49.3	42.8	95.5	93.4	70.2	72.3	75.8	55.8	37.1	102.2

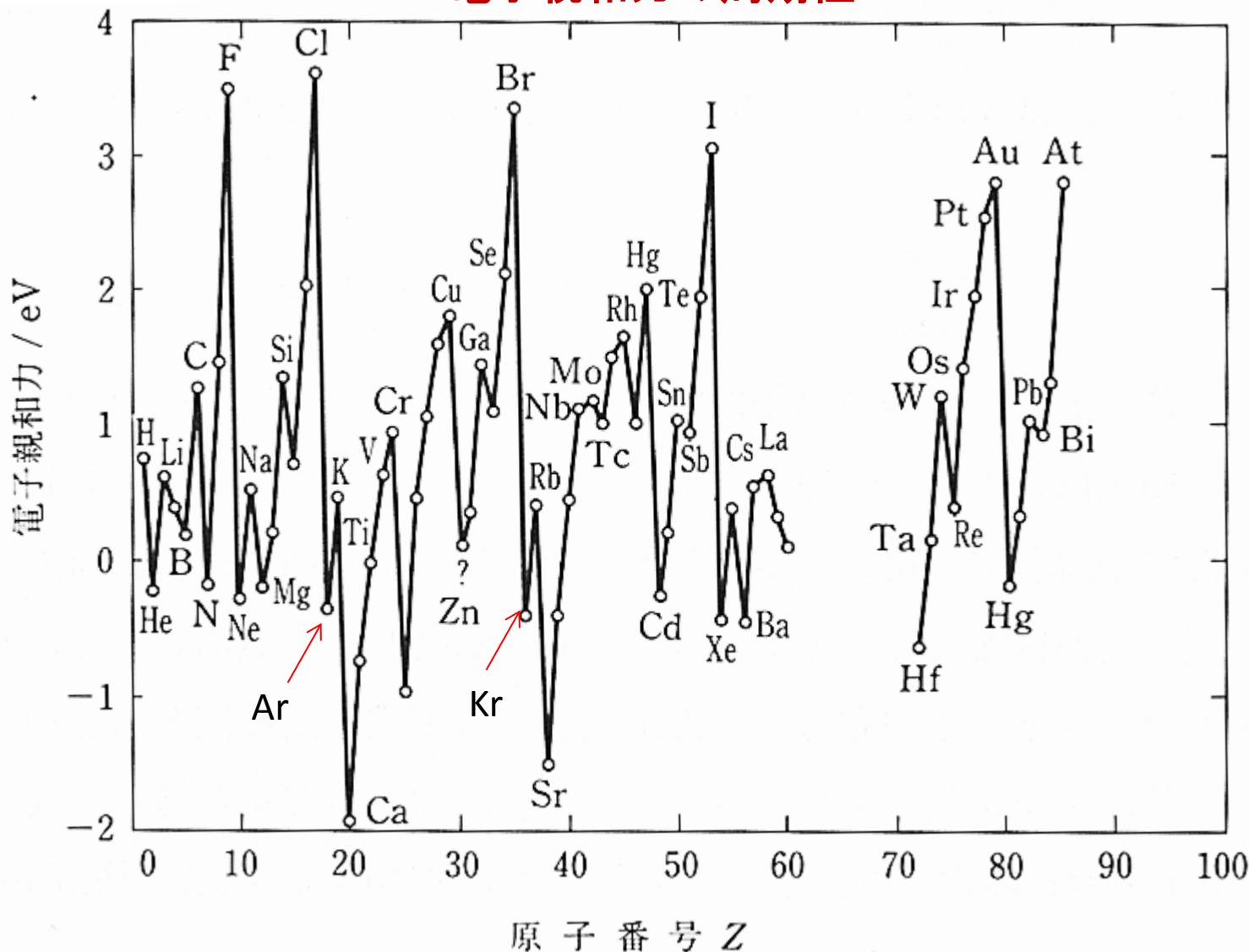
Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr
598.	536.	456	347.	264.	385								
6.20	5.55	4.73	3.60	2.73	3.99								
142.9		128.	109.	83.0	63.	92.1							

# ファン・デル・ワールス結合⑤



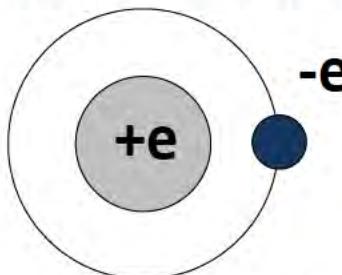
# ファン・デル・ワールス結合⑥

電子親和力の周期性

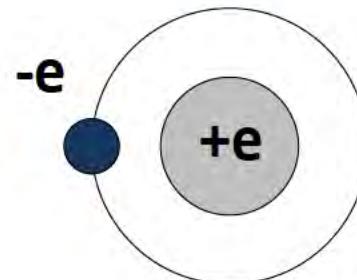
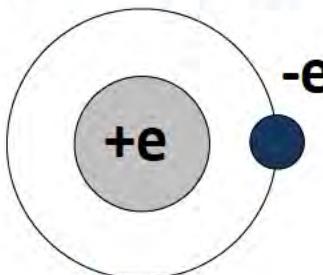


# ファン・デル・ワールス結合⑦

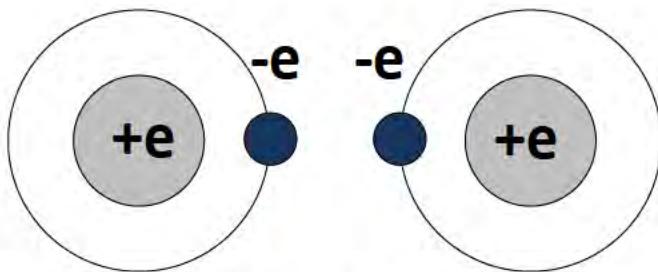
水素原子における、ある時々での電子位置



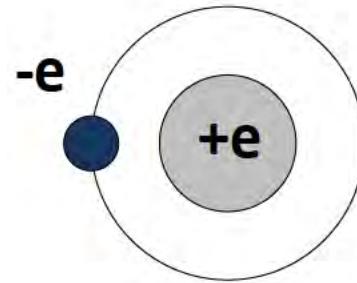
クーロンエネルギー: 負



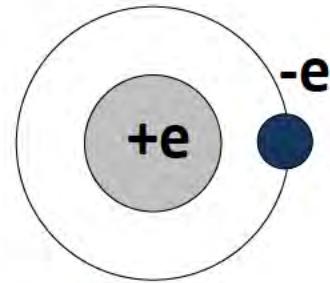
クーロンエネルギー: 負



クーロンエネルギー: 正



クーロンエネルギー: 正



- 2つの原子が離れている: クーロンエネルギーの時間平均はゼロ

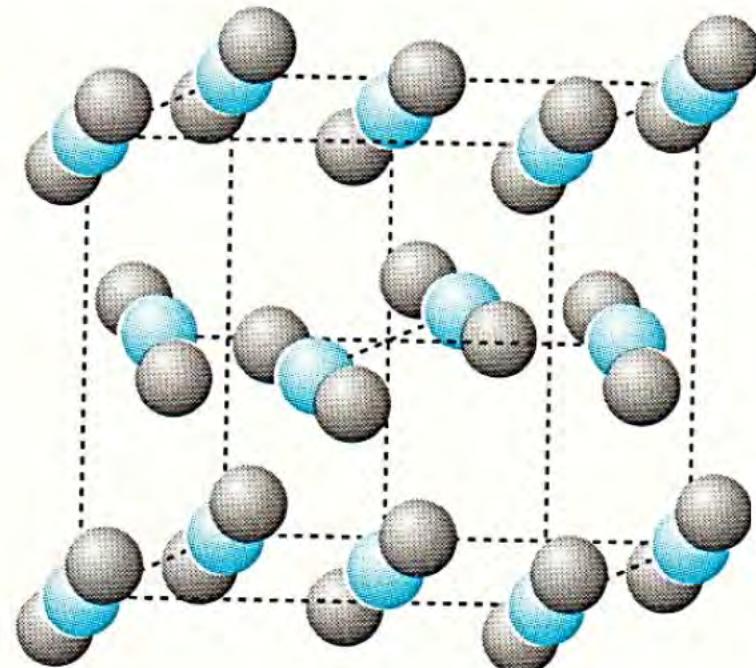
- 2つの原子が接近: 系のエネルギーを下げるよう、クーロンエネルギーが負の時間が相対的に増加

→ 電子分布に偏りが発生し分極 →

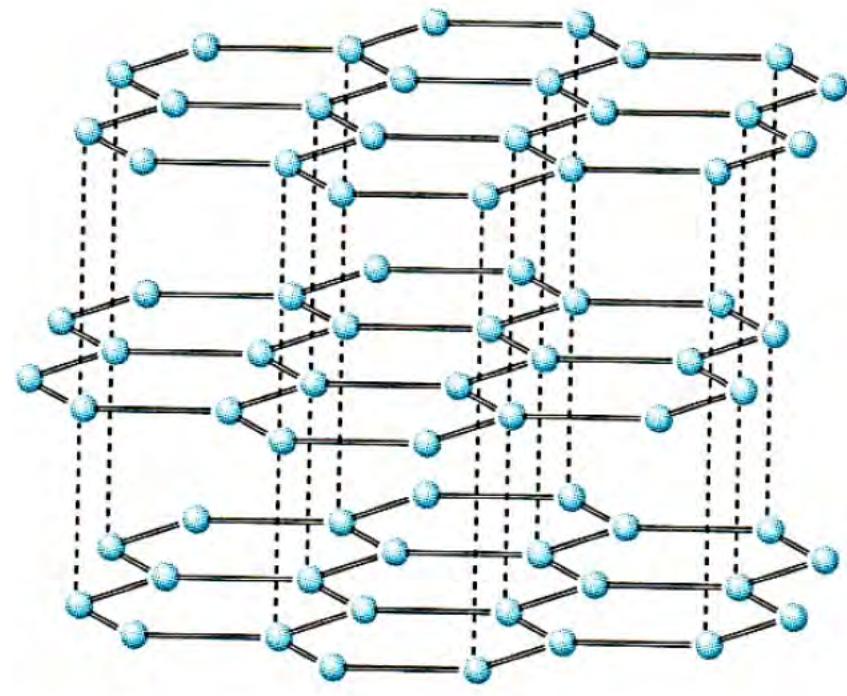
誘起した双極子間の引力により結合  
(ファン・デル・ワールス力)

# ファン・デル・ワールス結合⑧

ドライアイスの結晶構造



グラファイトの結晶構造



# 第6章 固体における結合

6.1 結合エネルギー

6.2 共有結合

6.3 イオン結合

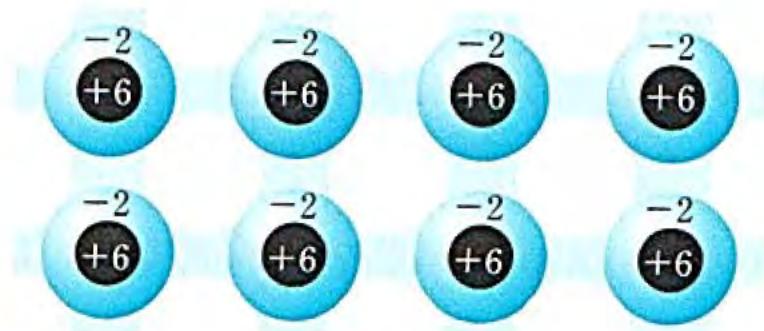
6.4 金属結合

6.5 ファン・デル・ワールス結合

6.6 結合の概念図

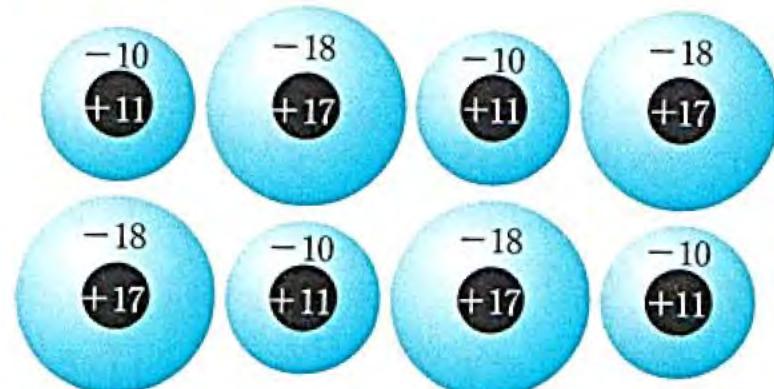
# 原子を凝集させる結合力

## 共有結合



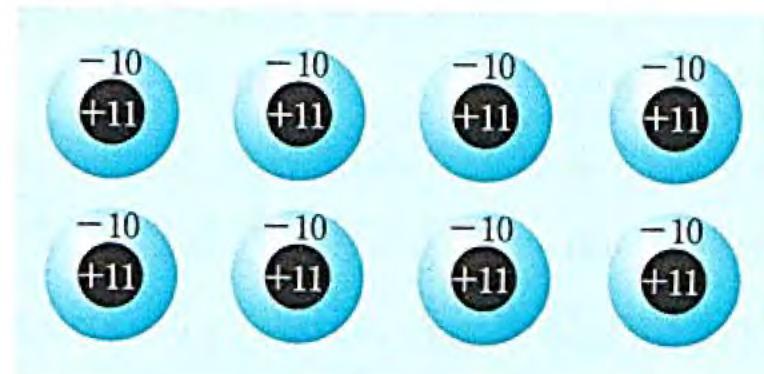
(a) ダイヤモンド

## イオン結合



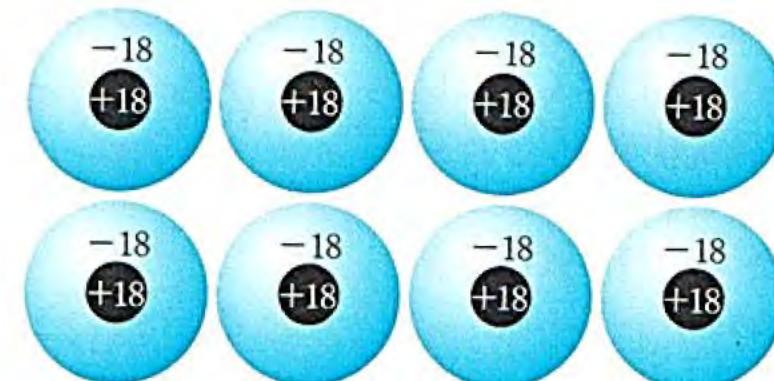
(b) 塩化ナトリウム

## 金属結合



(c) ナトリウム

## ファン・デル・ワールス結合



(d) アルゴン

# 演習問題

## ❖ 演習問題

---

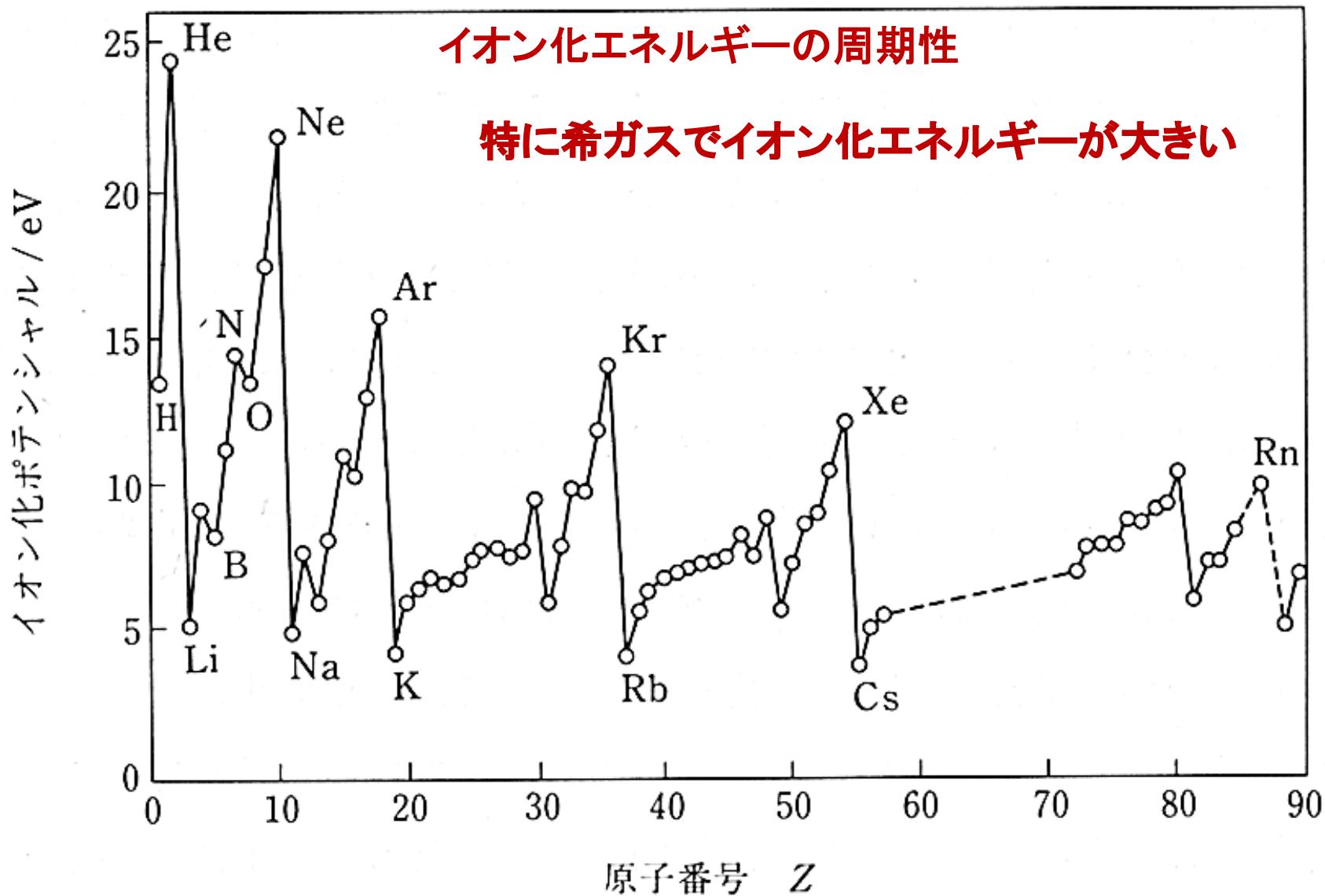
---

- 6.1 陽イオンと陰イオンが交互に等間隔で並んでいる1次元結晶のマーデルング定数を求めなさい。
- 6.2 周期表でどのような位置にある元素が、共有結合、イオン結合、金属結合のいずれの結合で結晶となる傾向にあるのかを調べなさい。
- 6.3 ここでは説明しなかった水素結合について、結合の機構と、どのような物質で見られるかを調べなさい。

# 周期表

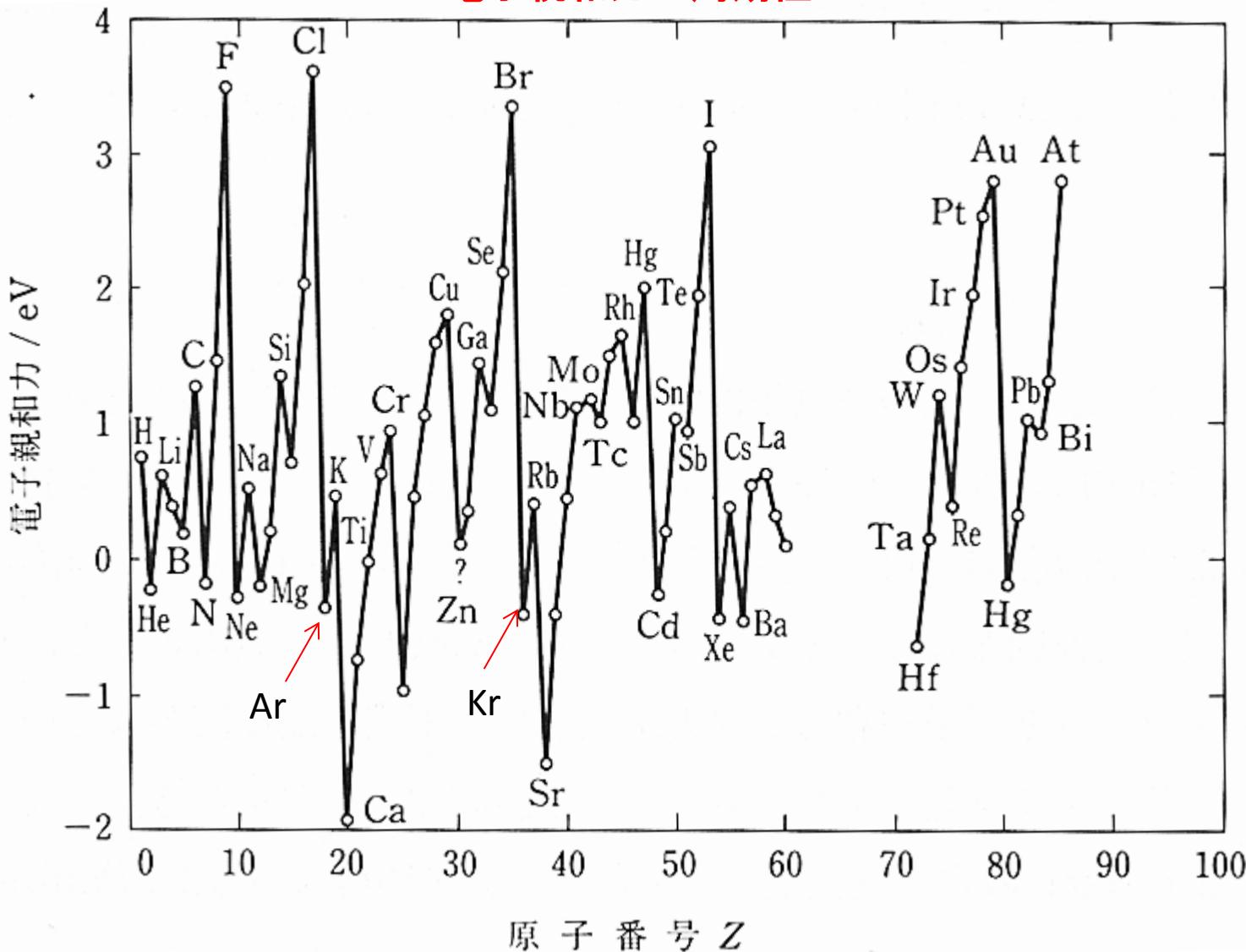
周期\族	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
1	1 <b>H</b> 水素 Hydrogen 1.00798																2 <b>He</b> ヘリウム Helium 4.0026	
2	3 <b>Li</b> リチウム Lithium 6.968	4 <b>Be</b> ベリリウム Beryllium 9.01218											5 <b>B</b> 硼(ホウ)素 Boron 10.814	6 <b>C</b> 炭素 Carbon 12.0106	7 <b>N</b> 窒素 Nitrogen 14.0069	8 <b>O</b> 酸素 Oxygen 15.9994	9 <b>F</b> 弗(フッ)素 Fluorine 18.9984	10 <b>Ne</b> ネオン Neon 20.1797
3	11 <b>Na</b> ナトリウム Sodium 22.9898	12 <b>Mg</b> マグネシウム Magnesium 24.306											13 <b>Al</b> アルミニウム Aluminum 26.9815	14 <b>Si</b> 珪(ケイ)素 Silicon 28.085	15 <b>P</b> 磷(リン) Phosphorus 30.9738	16 <b>S</b> 硫黄 Sulfur 32.068	17 <b>Cl</b> 塩素 Chlorine 35.452	18 <b>Ar</b> アルゴン Argon 39.948
4	19 <b>K</b> カリウム Potassium 39.0983	20 <b>Ca</b> カルシウム Calcium 40.078	21 <b>Sc</b> スカンジウム Scandium 44.9559	22 <b>Ti</b> チタン Titanium 47.867	23 <b>V</b> バナジウム Vanadium 50.9415	24 <b>Cr</b> クロム Chromium 51.9961	25 <b>Mn</b> マンガン Manganese 54.938	26 <b>Fe</b> 鉄 Iron 55.845	27 <b>Co</b> コバルト Cobalt 58.9332	28 <b>Ni</b> ニッケル Nickel 58.6934	29 <b>Cu</b> 銅 Copper 63.546	30 <b>Zn</b> 亜鉛 Zinc 65.38	31 <b>Ga</b> ガリウム Gallium 69.723	32 <b>Ge</b> ゲルマニウム Germanium 72.630	33 <b>As</b> 砒(ヒ)素 Arsenic 74.9216	34 <b>Se</b> セレン Selenium 78.971	35 <b>Br</b> 臭素 Bromine 79.904	36 <b>Kr</b> クリプトン Krypton 83.798
5	37 <b>Rb</b> ルビジウム Rubidium 85.4678	38 <b>Sr</b> ストロンチウム Strontium 87.62	39 <b>Y</b> イットリウム Yttrium 88.9058	40 <b>Zr</b> ジルコニウム Zirconium 91.224	41 <b>Nb</b> ニオブ Niobium 92.9064	42 <b>Mo</b> モリブデン Molybdenum 95.95	43 <b>Tc</b> テクネチウム Technetium [99]	44 <b>Ru</b> ルテニウム Ruthenium 101.07	45 <b>Rh</b> ロジウム Rhodium 102.906	46 <b>Pd</b> パラジウム Palladium 106.42	47 <b>Ag</b> 銀 Silver 107.868	48 <b>Cd</b> カドミウム Cadmium 112.414	49 <b>In</b> インジウム Indium 114.818	50 <b>Sn</b> 錫(ズ)素 Tin 118.710	51 <b>Sb</b> アンチモン Antimony 121.760	52 <b>Te</b> テルル Tellurium 127.60	53 <b>I</b> 沃(ヨウ)素 Iodine 126.904	54 <b>Xe</b> キセノン Xenon 131.293
6	55 <b>Cs</b> セシウム Cesium 132.905	56 <b>Ba</b> バリウム Barium 137.327	※1	72 <b>Hf</b> ハフニウム Hafnium 178.49	73 <b>Ta</b> タンタル Tantalum 180.948	74 <b>W</b> タンゲステン Tungsten 183.84	75 <b>Re</b> レニウム Rhenium 186.207	76 <b>Os</b> オスミウム Osmium 190.23	77 <b>Ir</b> イリジウム Iridium 192.217	78 <b>Pt</b> 白金(プラチナ) Platinum 195.084	79 <b>Au</b> 金 Gold 196.967	80 <b>Hg</b> 水銀 Mercury 200.592	81 <b>Tl</b> タリウム Thallium 204.384	82 <b>Pb</b> 鉛 Lead 207.2	83 <b>Bi</b> ビスマス Bismuth 208.980	84 <b>Po</b> ポロニウム Polonium [210]	85 <b>At</b> アスタチン Astatine [210]	86 <b>Rn</b> ラドン Radon [222]
7	87 <b>Fr</b> フランシウム Francium [223]	88 <b>Ra</b> ラジウム Radium [226]	※2	104 <b>Rf</b> ラザボーリジウム Rutherfordium [267]	105 <b>Db</b> ドブニウム Dubnium [268]	106 <b>Sg</b> シーボーゲウム Seaborgium [271]	107 <b>Bh</b> ボーリウム Bohrium [272]	108 <b>Hs</b> ハッシウム Hassium [277]	109 <b>Mt</b> マイタネリウム Meitnerium [276]	110 <b>Ds</b> ダームスタチウム Darmstadtium [281]	111 <b>Rg</b> レントゲニウム Roentgenium [280]	112 <b>Cn</b> コベルニシウム Copernicium [285]	113 <b>Nh</b> ニホニウム Nihonium [278]	114 <b>Fl</b> フレロビウム Flerovium [289]	115 <b>Mc</b> モスコビウム Moscovium [289]	116 <b>Lv</b> リバモリウム Livermorium [293]	117 <b>Ts</b> テネシン Tennessine [293]	118 <b>Og</b> オガネソン Oganesson [294]
※1 ランタノイド系	57 <b>La</b> ランタン Lanthanum 138.905	58 <b>Ce</b> セリウム Cerium 140.116	59 <b>Pr</b> プラセオジム Praseodymium 140.908	60 <b>Nd</b> ネオジム Neodymium 144.242	61 <b>Pm</b> プロメチウム Promethium [145]	62 <b>Sm</b> サマリウム Samarium 150.36	63 <b>Eu</b> ユウロビウム Europium 151.964	64 <b>Gd</b> ガドリニウム Gadolinium 157.25	65 <b>Tb</b> テルビウム Terbium 158.925	66 <b>Dy</b> ジスプロシウム Dysprosium 162.500	67 <b>Ho</b> ホルミウム Holmium 164.930	68 <b>Er</b> エルビウム Erbium 167.259	69 <b>Tm</b> ツリウム Thulium 168.934	70 <b>Yb</b> イッテルビウム Ytterbium 173.045	71 <b>Lu</b> ルテチウム Lutetium 174.967			
※2 アクチノイド系	89 <b>Ac</b> アクチニウム Actinium [227]	90 <b>Th</b> トリウム Thorium 232.038	91 <b>Pa</b> プロトアクチニウム Protactinium 231.036	92 <b>U</b> ウラン Uranium 238.029	93 <b>Np</b> ネプツニウム Neptunium [237]	94 <b>Pu</b> ブルトニウム Plutonium [239]	95 <b>Am</b> アメリシウム Americium [243]	96 <b>Cm</b> キュリウム Curium [247]	97 <b>Bk</b> バークリウム Berkelium [247]	98 <b>Cf</b> カリホルニウム Californium [252]	99 <b>Es</b> アイヌティニアム Einsteinium [252]	100 <b>Fm</b> フェルミウム Fermium [257]	101 <b>Md</b> メンデレビウム Mendelevium [258]	102 <b>No</b> ノーベリウム Nobelium [259]	103 <b>Lr</b> ローレンシウム Lawrencium [262]			

# イオン化工エネルギー



# 電子親和力

電子親和力の周期性



NaCl構造を持つ  
結晶例

- LiF
- LiCl
- LiBr
- LiI
- NaF
- NaCl
- NaBr
- NaI
- KF
- KCl
- KBr
- KI
- RbF
- RbCl
- RbBr
- RbI