

МИНИСТЕРСТВО ПРОСВЕЩЕНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ
УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ВОРОНЕЖСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ПЕДАГОГИЧЕСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ»

КАФЕДРА ОБЩЕЙ ФИЗИКИ

ТЕРМОХИМИЧЕСКАЯ ЭЛЕКТРООТРИЦАТЕЛЬНОСТЬ ЭЛЕМЕНТОВ

Рабочая тетрадь

*для студентов бакалавриата физико-математического
и естественно-географического факультетов, обучающихся
по направлению 44.03.05 Педагогическое образование
(с двумя профилями подготовки), профили «Естествознание», «Физика»,
«Химия», «Экология»*

ВОРОНЕЖ

Воронежский государственный педагогический университет
2023

УДК 539.14(07)
ББК 52.3
Т35

Издано по решению
учебно-методического совета ВГПУ.
Протокол № 7 от 13 апреля 2023 г.

Авторы:

А.С. Шатская, А.С. Макаров, Г.В. Афонин,
Р.А. Кончаков, В.А. Хоник

Рецензенты:

доктор физико-математических наук, заведующий кафедрой
экспериментальной физики ВГУ профессор *С.Н. Дрождин*;
кандидат педагогических наук, декан физико-математического факультета,
доцент *В.В. Малев*

Ответственный редактор:

доктор физико-математических наук, профессор *В.В. Свиридов*

Термохимическая электроотрицательность элементов : рабо-
Т35 чая тетрадь для студентов бакалавриата физико-математического и есте-
ственно-географического факультетов, обучающихся по направлению
44.03.05 Педагогическое образование (с двумя профилями подготовки),
профили «Естествознание», «Физика», «Химия», «Экология» / А.С. Шат-
ская [и др.]. – Воронеж : Воронежский государственный педагогический
университет, 2023. – 56 с.

Рабочая тетрадь содержит подробные теоретические материалы темы
«Термохимическая электроотрицательность элементов», детальный разбор ос-
новных задач и упражнений, три варианта по десять задач и упражнений для
самостоятельного решения, а также контрольные вопросы и актуальные спра-
вочные материалы, содержащие величины электроотрицательности по шкале
Оганова.

Предназначено для студентов бакалавриата физико-математического и есте-
ственно-географического факультетов, обучающихся по направлению 44.03.05 Пе-
дагогическое образование (с двумя профилями подготовки), профили «Естество-
знание», «Физика», «Химия», «Экология».

УДК 539.14(07)
ББК 52.3

© Шатская А.С., Макаров А.С., Афонин Г.В.,
Кончаков Р.А., Хоник В.А., 2023

© Воронежский государственный педагогический университет,
редакционно-издательская обработка, 2023

Оглавление

Введение	4
Глава 1. Теоретические сведения	5
1.1. Электроотрицательность. Исторические сведения	5
1.2. Шкала Оганова. Ее преимущества в сравнении с другими шкалами	8
Глава 2. Рабочая тетрадь по теме «Термохимическая электроотрицательность элементов»	18
2.1. Общие сведения.....	18
2.2. Работа с формулами.....	22
2.3. Задачи и упражнения	26
Вариант 1	26
Вариант 2	32
Вариант 3	38
2.4. Контрольные вопросы	44
2.5. Справочный материал.....	45
Таблица 1. Значения электроотрицательностей элементов для разных шкал	45
Таблица 2. Экспериментальные энергии диссоциации связей, используемые для расчета электроотрицательности	49
Список рекомендуемой литературы.....	54

Введение

Электроотрицательность является ключевым свойством элементов. На данный момент распространена термохимическая шкала Полинга, которая имеет целый ряд недостатков. В апреле 2021 г. российские ученые в авторитетном журнале *Nature Communications* [1] опубликовали работу, в которой предложили новый способ расчета шкалы электроотрицательности химических элементов. Предложенная шкала Оганова имеет целый ряд преимуществ по сравнению со шкалой Полинга, а именно: шкала Оганова разумно предсказывает степени ионности химических связей, улучшает разделение элементов на металлы и неметаллы и значительно улучшает описание термохимии молекул и химических реакций. Настоящая рабочая тетрадь ориентирована на самостоятельное изучение актуального состояния темы «Термохимическая электроотрицательность элементов».

Глава 1. Теоретические сведения

1.1 Электроотрицательность. Исторические сведения

В апреле 2021 г. российские ученые в авторитетном журнале Nature Communications опубликовали работу, в которой предложили новый способ расчета шкалы электроотрицательности химических элементов [1]. Предложенная шкала Оганова имеет целый ряд преимуществ по сравнению со шкалой Полинга, которая представлена практически в каждом школьном учебнике по химии. Электроотрицательность – это склонность атома к притягиванию электронной плотности, т.е. к поляризации химической связи.

Концепция электроотрицательности восходит к 1819 году, когда Йонс Якоб Берцелиус разделил элементы на электроположительные и электроотрицательные. Это уже было полезно, даже для качественной концепции, которая появилась задолго до открытия электрона в 1897 году. Затем, в 1916 году, Гилберт Ньютон Льюис сформулировал свою теорию химической связи, согласно которой химическая связь является результатом обмена валентными электронами. Развитие этой теории привело Лайнуса Полинга к формулированию в 1932 году количественной концепции электроотрицательности, основанной на термохимии.

Полинг вывел значения электроотрицательности из энергий связи, предполагая, что дополнительная стабилизация связи из-за ее поляризации является аддитивным эффектом.

Зная, что фтор является наиболее электроотрицательным элементом, и произвольно устанавливая его электроотрицательность равной 4, Полинг получил электроотрицательности многих элементов, используя формулу

$$D_{AB} = D_{AB}^{cov} + \Delta X_{AB}^2, \quad (1.1)$$

где D_{AB} – энергия диссоциации одной химической связи между двумя разными атомами А и В, D_{AB}^{cov} – среднее арифметическое энергий связей А-А и В-В, а величина стабилизации ΔX_{AB}^2 равна только квадрату разности электроотрицательностей атомов А и В.

Ковалентная часть энергии диссоциации:

$$D_{AB}^{cov} = \frac{D_{AA} + D_{BB}}{2}, \quad (1.2)$$

где D_{AA} – энергия диссоциации между одинаковыми атомами АА, D_{BB} – энергия диссоциации между одинаковыми атомами ВВ.

Эта термохимическая шкала была впоследствии уточнена Олредом, в распоряжении которого было больше значений энергий диссоциации и более точные значения, чем во время написания оригинальной статьи Полинга.

Полученная шкала электроотрицательности стала стандартом и пользовалась большим успехом, оставаясь самой популярной шкалой электроотрицательности. Традиционно любая новая шкала, чтобы ее воспринимали всерьез, должна была соответствовать шкале Полинга.

Аддитивная квадратичная форма позволила бы делать мощные прогнозы, например, для реакций обмена: реакция $AB + CD = AC + BD$ была бы энергетически выгодной, если бы

связь AC была более полярной, а связь BD наименее полярной (т.е. электроотрицательности равны $X_A < X_B < X_D < X_C$). Это связано с принципом твердых и мягких кислот и оснований. Однако известно, что часто предсказания, основанные на электроотрицательности, качественно не выполняются: известно, что формула (1.1) не работает при больших разностях электроотрицательности, т.е. там, где ожидается, что ее эффект будет наибольшим и наиболее важным.

Кроме того, табличные значения электроотрицательности Полинга для многих элементов странные: например, электроотрицательности таких металлов, как Ru, Rh, Pd, Os, Ir, Pt, Au, W, and Mo выше, чем значения для B и H, что подразумевает положительный заряд на Боре и отрицательный заряд на атомах этих металлов в их боридах или гидридах – это совершенно противоречит здравому смыслу. Можно также заметить странную размерность электроотрицательности Полинга, эВ^{-1/2}.

Спектроскопические шкалы электроотрицательности основаны на данных об изолированных атомах, среди которых Малликен, Аллен, Мартынов и Бацанов и многие другие шкалы. Электроотрицательность Малликена, определяется как среднее значение потенциала ионизации и родства к электрону. Это дает абсолютную шкалу, где электроотрицательности имеют значимую размерность (эВ) и имеют физический смысл минус химический потенциал электрона в атоме. Положение электроотрицательности Малликена было усилено в последние годы тем, что краеугольные камни

теории функционала плотности были соотнесены с химическим потенциалом второй теоремы Хоэнберга-Кона. Перенос заряда от менее электроотрицательного атома к более электроотрицательному можно рассматривать как следствие выравнивания их химических потенциалов. Красота этой шкалы уравнивается трудностями получения родства к электрону, которые для многих элементов все еще недостаточно известны.

Аллен предложил еще одну популярную спектроскопическую шкалу, где электроотрицательность равна средней энергии валентных электронов в свободном атоме. Этот подход страдает от двусмысленности в отношении того, какие электроны следует рассматривать в качестве валентности для d- и f-элементов. Мартынов и Бацанов использовали квадратный корень из средней энергии валентной ионизации в качестве меры электроотрицательности, и их электроотрицательности имеют ту же размерность, что и у Полинга, т.е. $\text{эВ}^{-1/2}$.

1.2 Шкала Оганова. Ее преимущества в сравнении с другими шкалами

Возвращаясь к формуле (1.1), можно ожидать, что результаты будут наиболее точными при больших ΔX_{AB}^2 , итак, начнем рассмотрение с щелочных и щелочноземельных фторидов. Исходя из экспериментальных энергий диссоциации связей, обнаруживается, что энергия ионной стабилизации

в LiF больше, чем в CsF или в любом щелочном фториде. В соответствии с формулой (1.1) это должно указывать на то, что Li является наиболее электроположительным щелочным металлом, и общая электроотрицательность увеличивается по группе периодической таблицы, что в точности противоречит химической интуиции и значениям, которые можно найти в Шкале Полинга. Странно, но электроотрицательность щелочных металлов Полинга (и, что не менее важно, щелочноземельных металлов) не может быть получена из их высоко ионных молекул с использованием формулы Полинга.

Проблема заключается в форме формулы (1.1): длина связи Li–F намного короче, чем Cs–F, и ионный член, конечно, должен быть сильнее в более короткой связи в Li⁺ F⁻, чем в Cs⁺ F⁻. То же самое верно и для ковалентной части энергии связи, которая также больше в LiF, чем в CsF. Ионные эффекты больше в LiF только в относительном (относительно ковалентных эффектов), но не в абсолютном смысле.

Это приводит к тому, что ионная стабилизация является не абсолютным аддитивным термином, а мультипликативным коэффициентом усиления, и простейшая формула имеет вид

$$D_{AB} = D_{AB}^{cov} \cdot (1 + \Delta X_{AB}^2). \quad (1.3)$$

Теперь электроотрицательности, определенные формулой (1.3), являются безразмерными (см. рис. 1.1). Формула (1.3) восстанавливает правильные тенденции для всей периодической таблицы и позволяет больше не сталкиваться с

патологиями, подобными упомянутым выше для щелочных и щелочноземельных металлов.

Все металлы обладают более низкой электроотрицательностью, чем бор и водород, что лучше согласуется с химической интуицией, чем значения Полинга. Применяя формулу (1.3) к молекулам ClF, BrF, IF, мы получили электроотрицательности Cl (3,56), Br (3,45), I (3,22). Затем пересчитывая электроотрицательности щелочных металлов, используя щелочные хлориды, бромиды и иодиды, находим те же значения в пределах $\sim 0,2$ (что можно рассматривать как неопределенность рассматриваемых значений): например, электроотрицательность Na, извлеченного из NaF составляет 2,15, от NaCl 2,28, от NaBr 2,13, от NaI 1,94. Электроотрицательности всех 118 известных элементов были рассчитаны с использованием экспериментальных энергий диссоциации и показаны на рис. 1.1.

1	1A																18	He	4.42	
2	Li	Be											B	C	N	O	F	Ne		
3	Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar		
4	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr		
5	Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe		
6	Cs	Ba			Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	
7	Fr	Ra			Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Nh	Fl	Mc	Lv	Ts	Og	
			La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu			
			Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr			

Рис. 1.1 – Периодическая таблица Менделеева со значениями электроотрицательностей Оганова

Электроотрицательности некоторых элементов, где недостаточно надежных данных об энергиях связей (благородные газы, Rm, Ra, Po, At и некоторые из самых тяжелых элементов), были получены косвенно, посредством линейной корреляции с их экспериментальными электроотрицательностями Малликена, поскольку шкала Малликена показывает наилучшую корреляцию с термодимической шкалой. Фактически, термодимическая шкала имеет разумную линейную корреляцию со всеми другими шкалами, коэффициент корреляции составляет 98% для шкал Малликена (рис. 1.3) и Аллена (рис. 1.4), 87% для Полинга (рис. 1.2) и 85% для Шкалы Мартынова–Бацанова (рис. 1.5)). Для короткоживущих 6d- и 7p-элементов Rf, Db, Sg, Bh, Hs, Mt, Ds, Rg, Cn, Nh, Fl, Mc, Lv, Ts, Og представлены из теоретических Малликена электроотрицательностей.

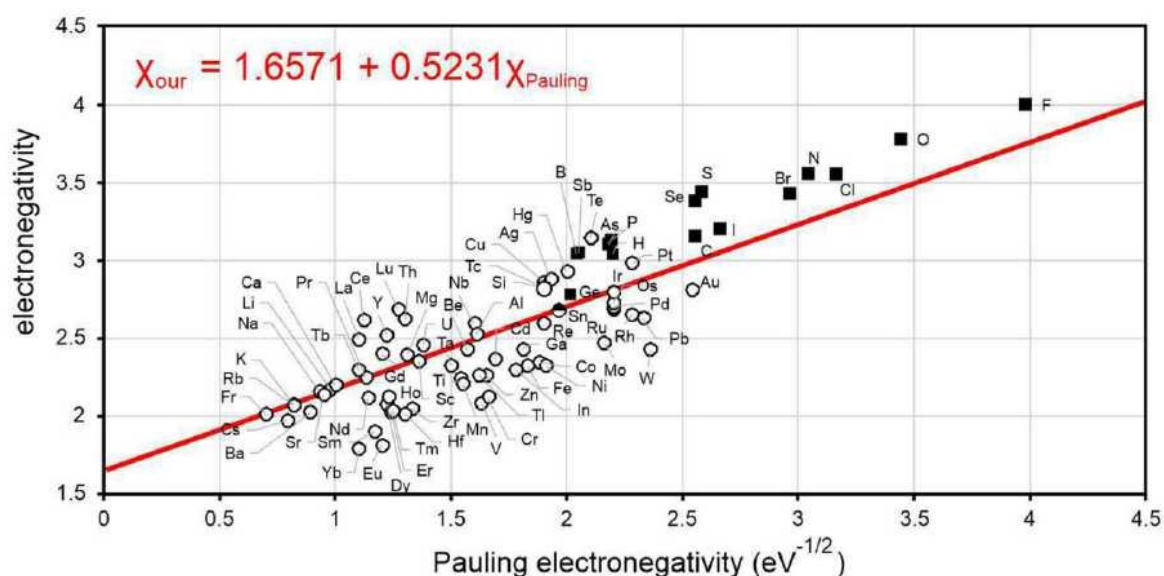


Рис. 1.2 – Корреляция между значениями электроотрицательностей Оганова и электроотрицательностей Полинга (в $eV^{-1/2}$)

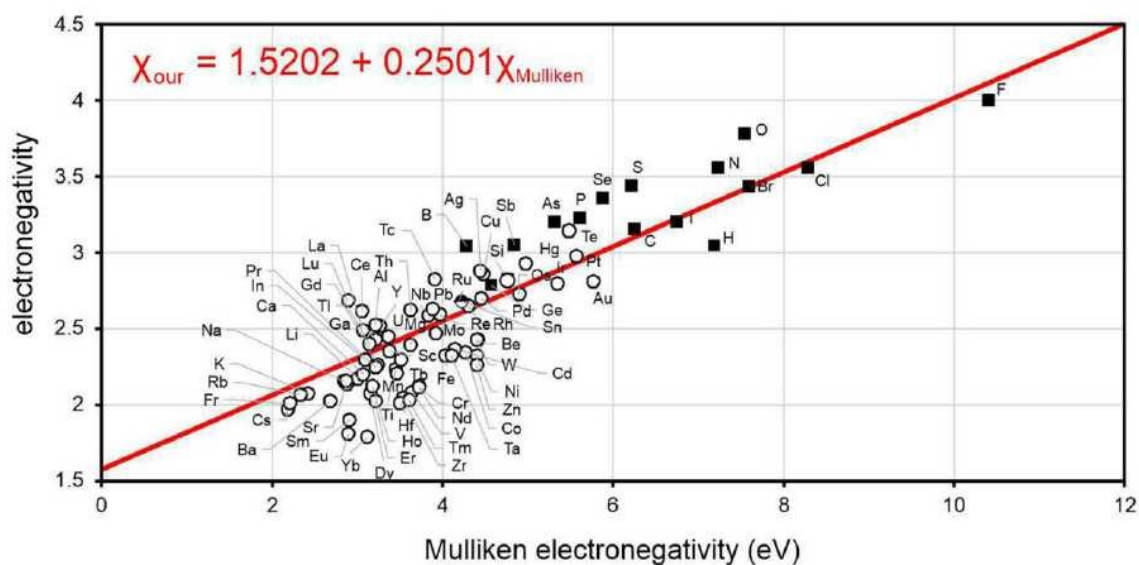


Рис. 1.3 – Корреляция между значениями электроотрицательностей Оганова и электроотрицательностей Малликена (в эВ)

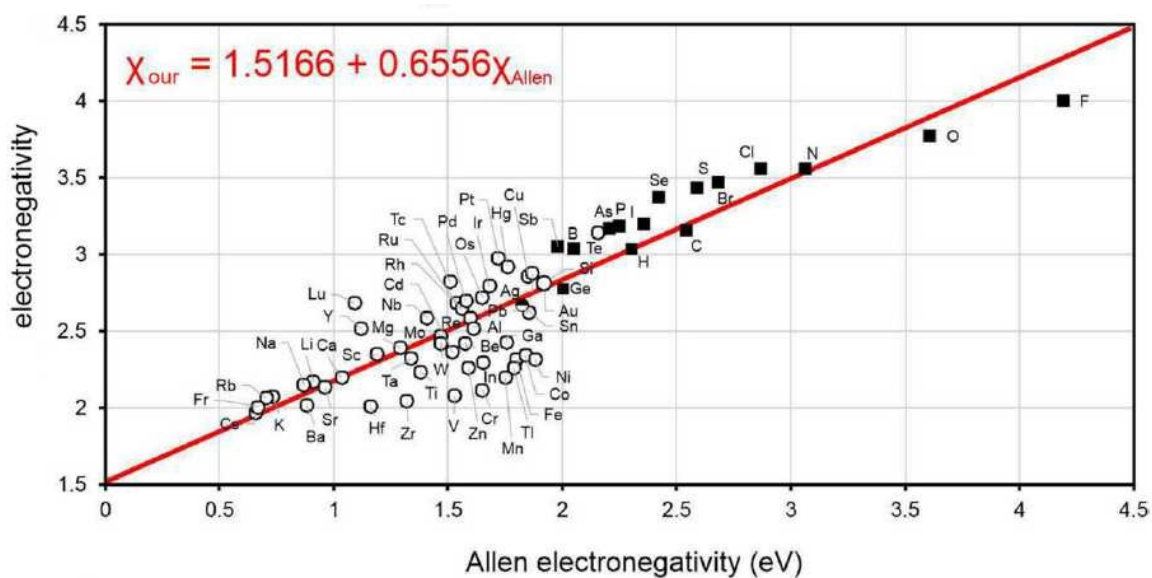


Рис. 1.4 – Корреляция между значениями электроотрицательностей Оганова и электроотрицательностей Аллена (в эВ)

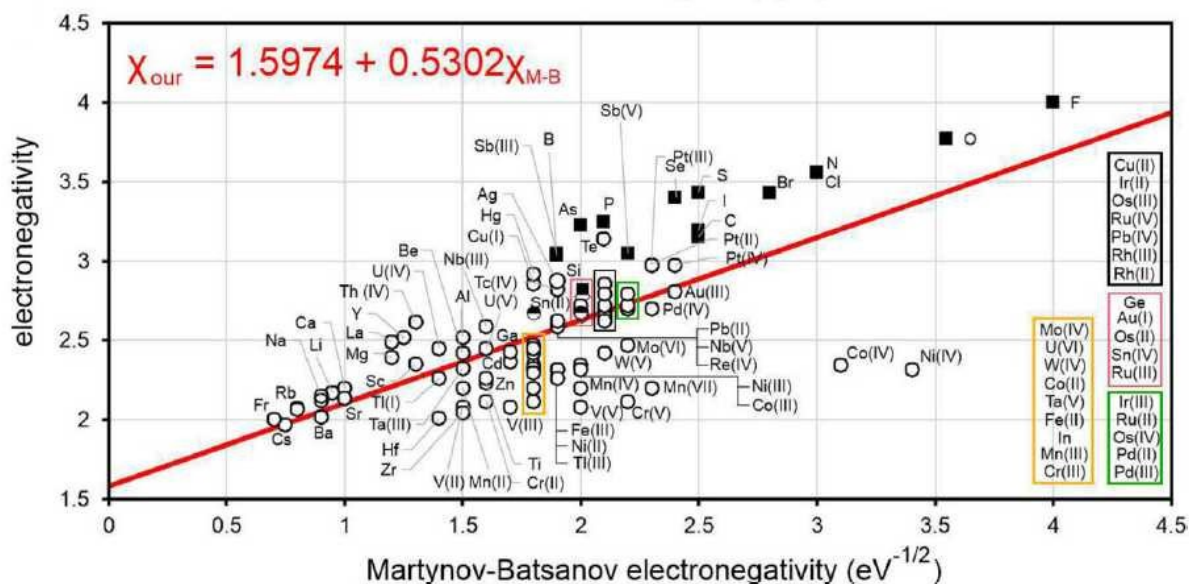


Рис. 1.5 – Корреляция между значениями электроотрицательностей Оганова и электроотрицательностей Мартынова-Бацанова (в $\text{эВ}^{-1/2}$)

На рис. 1.2–1.5 линии указывают на функцию линейной интерполяции. Условные обозначения: металлы, пустые круги; неметаллы, полный квадрат.

Электроотрицательность может использоваться в качестве критерия для различения металлов и неметаллов, но разные шкалы делают это с разной степенью успеха. Наилучшее разделение на металлы и неметаллы достигается с помощью шкал Оганова и Аллена. Например, все элементы с электроотрицательностью выше 3 являются неметаллами. Почти все элементы с электроотрицательностью ниже 3 являются металлами; немногими исключениями являются Si (2,82), Ge (2,79), Sn (2,68), но Sn известен при нормальных условиях в металлическом белом олове и полупроводниковых аллотропных модификациях серого олова. Шкалы Полинга, Малликена и Мартынова–Бацанова тоже

работают хорошо, но имеют трудности с определением благородных металлов и некоторых других элементов.

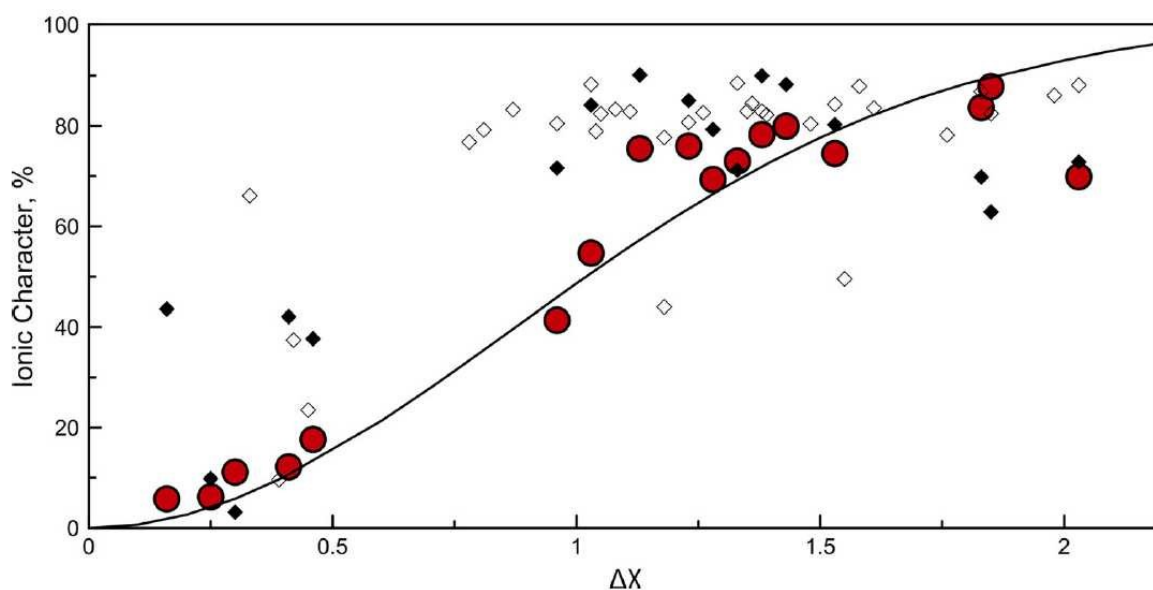


Рис. 1.6 – Ионный характер двухатомных молекул

На рис. 1.6. приведен график зависимости ионного характера двухатомных молекул от разности электроотрицательностей атомов ΔX . Ионный характер связи для различных соединений был рассчитан по дипольному моменту (красный круг) и зарядам Бадера для молекул (заполненный ромб) и кристаллов (открытый ромб).

Из-за релятивистских эффектов некоторые сверхтяжелые элементы проявляют неожиданное сходство с другими группами периодической таблицы.

Шкала электроотрицательности Оганова приводит к правильной полярности связи даже там, где шкала Полинга терпит неудачу. Например, электроотрицательности Полинга Ru, Rh, Pd, Os, Ir, Pt, Au, W и Mo выше, чем у H и B, и

можно было бы получить отрицательные заряды на атомах металлов в их боридах и гидридах. В шкале Оганова все наоборот, что согласуется с рассчитанными зарядами Бадера: например, $W^{+0,69}$ $B^{-0,69}$, $Mo^{+0,61}$ $B^{-0,61}$, $Au^{+0,14}$ $B_2^{-0,07}$, $Rt^{+0,24}$ $H_4^{-0,06}$.

Выведенная из термохимии, шкала электроотрицательности должна быть способна, по крайней мере, качественно правильно предсказывать результаты химических реакций, теплоты образования и энергии распыления молекул и твердых тел. Чтобы исправить недостатки формулы Полинга (1.1).

Термохимические электроотрицательности должны быть способны предсказывать направление, по крайней мере, простых химических реакций. Известно, что электроотрицательность Полинга часто приводит к неверным предсказаниям. Рассмотрим реакцию: $2NaF + CaCl_2 = 2NaCl + CaF_2$.

Игнорируя ионный член, можно было бы обнаружить, что энтальпия этой реакции равна нулю. Электроотрицательности Полинга и формула (1.1) дает положительное значение +0,23 эВ, неверно предсказывая, что эта реакция неблагоприятна. Подход Матча дает +0,11 эВ. Шкала электроотрицательности Оганова и формула (1.3) показывают, что эта молекулярная реакция благоприятна с энтальпией -0,45 эВ. Экспериментальное значение составляет -0,92 эВ.

На рисунке 1.7 показаны энергии очень разных обменных реакций, рассчитанные с использованием электроотрицательности и экспериментальных молекулярных энергий. Можно видеть, что практически во всех случаях термохимическая модель предсказывает правильный знак и разумную

величину энергии реакции, в отличие от предсказаний, основанных на подходе Полинга.

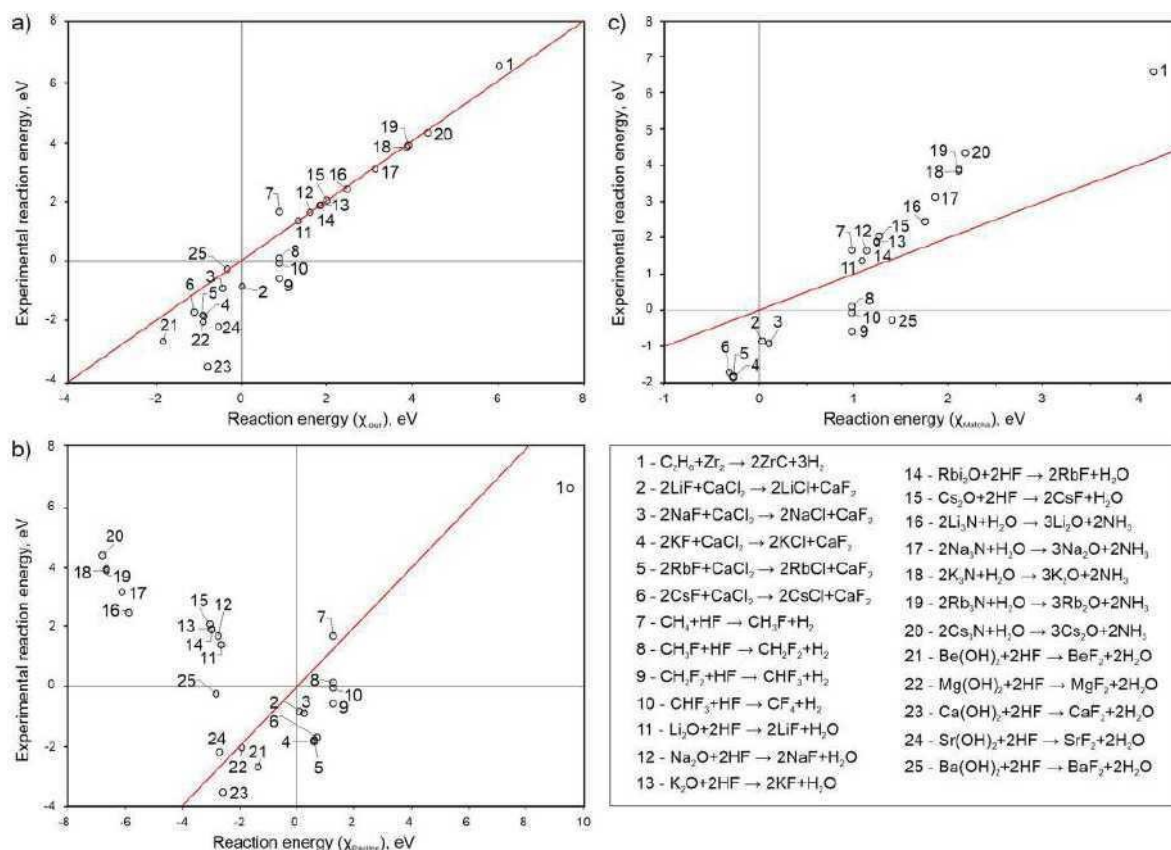


Рис. 1.7 – Сравнение между прогнозируемыми энергиями 25 обменных реакций по термохимическим электроотрицательностям (ось x) и экспериментальными энергиями по оси y. (a) Прогнозирование энергии по шкале Оганова; (b) Прогнозирование энергии по шкале Полинга; (c) Прогнозирование энергии по шкале Полинга, исправленной Матчем

На рис. 1.7. линии указывают на идеальный результат (среднеквадратичные отклонения равны 0,9 эВ для шкалы Оганова, 5,1 эВ для Полинга и 1,9 эВ для Матча).

Ожидается, что электроотрицательность будет коррелировать со многими физическими свойствами материалов –

от механических (таких как твердость) до электронных, оптических и т.д. Выше показано, насколько хорошо различаются металлы и неметаллы. Можно ожидать, что это будет соотноситься с рабочей функцией, которая (точно так же, как электроотрицательность Малликена для изолированного атома) равна химическому потенциалу электрона на поверхности. Эта связь была известна ранее, хотя корреляция не идеальна: наилучший коэффициент корреляции (91%) для шкалы Полинга, за которой следует шкала Малликена (83%), Мартынова–Бацанова (79%), Оганова (65%) и Аллена (63%) шкал, из-за эффектов кристаллической структуры (которые приводят к расширению уровней энергии валентных электронов) и поверхности (функция работы значительно различается между различными поверхностями одного и того же материала).

Подводя итог, можно сказать, что простая модификация определения термохимической электроотрицательности приводит к значительно улучшенной шкале электроотрицательности. Значения электроотрицательностей Оганова безразмерны (вместо необычных единиц $\text{эВ}^{-1/2}$ электроотрицательностей Полинга), отображают интуитивно правильные тенденции в периодической таблице, позволяют разумно предсказывать полярность связей и степень ионности, улучшают разделение элементов на металлы и неметаллы и, что наиболее важно, значительно улучшают описание термохимии молекул и химических реакций. Ожидается, что шкала электроотрицательностей Оганова найдет широкое применение в химии и физике.

Глава 2. Рабочая тетрадь по теме «Термохимическая электроотрицательность элементов»

2.1 Общие сведения

Электроотрицательность (ЭО) – это способность атома притягивать валентные электроны другого атома в соединении, которая выражается в количественном эквиваленте. В результате образуется химическая связь, обозначается греческой буквой χ (читается как «хи»).

Основоположник современной теории электроотрицательности в химии – американский химик Лайнус Полинг. В первой половине XX века он обнаружил закономерность: чем больше разница в электроотрицательности между вступающими в связь атомами, тем стабильнее связь. Эта термохимическая шкала была впоследствии уточнена Олредом, в распоряжении которого было больше значений энергий диссоциации и более точные значения, чем во время написания оригинальной статьи Полинга.

Полученная шкала электроотрицательности стала стандартом и пользовалась большим успехом, оставаясь самой популярной шкалой электроотрицательности. Традиционно любая новая шкала, чтобы ее воспринимали всерьез, должна была соответствовать шкале Полинга. Значения электроотрицательностей в ней были рассчитаны по формуле 1:

$$D_{AB} = D_{AB}^{cov} + \Delta X_{AB}^2, \quad (1)$$

где D_{AB} – энергия диссоциации одной химической связи между двумя разными атомами А и В, D_{AB}^{cov} – среднее арифметическое энергий связей А-А и В-В, а ΔX_{AB}^2 равна только квадрату разности электроотрицательностей атомов А и В.

Среднее арифметическое энергий связей А-А и В-В было рассчитано по формуле 2:

$$D_{AB}^{cov} = \frac{D_{AA} + D_{BB}}{2}, \quad (2)$$

где D_{AA} – энергия диссоциации между одинаковыми атомами АА, D_{BB} – энергия диссоциации между одинаковыми атомами ВВ.

В соответствии с электроотрицательностью элементов, их простые вещества можно условно разделить на две группы в соответствии с ролью в окислительно-восстановительных реакциях: восстановители и окислители.

Восстановитель – это вещество, которое отдает электроны в окислительно-восстановительной реакции.

Все простые вещества металлы являются восстановителями. Они отдают электроны и приобретают положительную степень окисления.

Окислитель – это вещество, которое принимает электроны в окислительно-восстановительной реакции.

Неметаллы могут быть как восстановителями, так и окислителями в зависимости от типа реакции, других веществ, вступающих в реакцию, и соотношения величин электроотрицательности их атомов.

У простого вещества тем сильнее выражены окислительные свойства, чем выше электроотрицательность атомов элемента, из которых оно состоит.

Считается, что на электроотрицательность влияет два основных фактора: радиус атома и расстояние между ядром атома и валентными электронами.

Самостоятельно вычислять электроотрицательность не нужно: существуют шкалы, в которых уже вычислена приблизительная ЭО разных элементов. Среди них:

- шкала Полинга;
- шкала Малликена;
- шкала Олреда-Рохова;
- шкала Оганова и др.

Все шкалы хорошо изучены и информации по ним достаточно много за исключением шкалы Оганова, но поскольку у нее есть множество преимуществ перед другими шкалами изучим ее подробно.

Артём Ромаевич Оганов и Кристиан Тантардини используя определение электроотрицательности Полинга ввели вместо аддитивной добавки мультипликативную добавку:

$$D_{AB} = D_{AB}^{cov} \cdot (1 + \Delta X_{AB}^2), \quad (3)$$

где величины в формуле (3) определены выше.

Предложенная шкала электроотрицательности Оганова характеризуется правильными тенденциями значений для всей периодической таблицы, а также делает электроотрицательность безразмерной величиной вместо «странной» размерности электроотрицательности Полинга $\text{эВ}^{-1/2}$. Также с помощью шкалы электроотрицательности Оганова можно разумно прогнозировать степень ионности химических связей. Помимо этого, шкала электроотрицательности Оганова эффективней реализует разделение элементов на металлы и

неметаллы и значительно улучшает описание термохимии молекул и химических реакций.

Значения электроотрицательностей Оганова представлены на рис. 1.

Появление коэффициента в формуле 3, теперь показывает не на сколько, а во сколько раз энергия связи становится больше.

1	1A	1	H	3.04	2	He	4.42	18	VIIIA																																														
2	2A	3	Li	2.17	4	Be	2.42	5	B	3.04	6	C	3.15	7	N	3.56	8	O	3.78	9	F	4.00	10	Ne	4.44																														
3	3A	4	Na	2.15	5	Mg	2.39	6	Al	2.52	7	Si	2.82	8	P	3.16	9	S	3.44	10	Cl	3.50	11	Ar	3.57																														
4	4A	5	K	2.07	6	Ca	2.20	7	Sc	2.35	8	Ti	2.23	9	V	2.08	10	Cr	2.12	11	Mn	2.20	12	Fe	2.32	13	Co	2.34	14	Ni	2.32	15	Cu	2.86	16	Zn	2.26	17	Ga	2.43	18	Ge	2.79	19	As	3.15	20	Se	3.37	21	Br	3.45	22	Kr	3.37
5	5A	6	Rb	2.07	7	Sr	2.13	8	Y	2.52	9	Zr	2.05	10	Nb	2.59	11	Mo	2.47	12	Tc	2.82	13	Ru	2.68	14	Rh	2.65	15	Pd	2.70	16	Ag	2.88	17	Cd	2.36	18	In	2.29	19	Sn	2.68	20	Sb	3.05	21	Te	3.14	22	I	3.20	23	Xe	3.12
6	6A	7	Cs	1.97	8	Ba	2.02	9	Hf	2.01	10	Ta	2.32	11	W	2.42	12	Re	2.59	13	Os	2.72	14	Ir	2.79	15	Pt	2.98	16	Au	2.81	17	Hg	2.92	18	Tl	2.26	19	Pb	2.62	20	Bi	2.69	21	Po	2.85	22	At	3.04	23	Rn	3.04			
7	7A	8	Fr	2.01	9	Ra	2.15	10	Rf	2.27	11	Db	2.38	12	Sg	2.51	13	Bh	2.48	14	Hs	2.52	15	Mt	2.66	16	Ds	2.73	17	Rg	2.83	18	Cn	3.03	19	Nh	2.49	20	Fl	2.57	21	Mc	2.21	22	Lv	2.42	23	Ts	2.61	24	Og	2.59			
		29	La	2.49	30	Ce	2.61	31	Pr	2.24	32	Nd	2.11	33	Pm	2.24	34	Sm	1.90	35	Eu	1.81	36	Gd	2.40	37	Tb	2.29	38	Dy	2.07	39	Ho	2.12	40	Er	2.02	41	Tm	2.03	42	Yb	1.78	43	Lu	2.68									
		44	Ac	2.22	45	Th	2.62	46	Pa	2.33	47	U	2.45	48	Np	2.35	49	Pu	2.22	50	Am	2.28	51	Cm	2.31	52	Bk	2.08	53	Cf	2.18	54	Es	2.29	55	Fm	2.38	56	Md	2.47	57	No	2.06	58	Lr	2.10									

Рис. 1 – Периодическая таблица со значениями электроотрицательностей Оганова

Электроотрицательность может использоваться в качестве критерия для различения металлов и неметаллов, но разные шкалы делают это с разной степенью успеха. Например, все элементы с электроотрицательностью выше 3 являются неметаллами. Почти все элементы с электроотрицательностью ниже 3 являются металлами; немногими исключениями являются кремний (Si), германий (Ge), олово (Sn). Шкалы Малликена и Мартынова–Бацанова тоже хорошо

градуируют элементы, но имеют трудности с определением благородных металлов и некоторых других элементов.

Существует корреляция значений из других шкал со шкалой Оганова. Корреляция – это взаимосвязь двух или нескольких случайных параметров. Когда одна величина растет или уменьшается, другая тоже изменяется. Например, рассмотрим формулу для нахождения значения электроотрицательности по шкале Оганова (X_{Og}) для любого химического элемента через значение по шкале Полинга ($X_{Pauling}$):

$$X_{Og} = 1,6571 + 0,5231 \cdot X_{Pauling}. \quad (4)$$

2.2 Работа с формулами

Разберем подробно примеры заданий для того, чтобы в дальнейшем правильно решить подобное.

Пример 1. Найти энергию диссоциации химической связи BeF, используя формулу Полинга.

$$D_{BeF} = D_{BeF}^{cov} + \Delta X_{BeF}^2.$$

1) Находим ковалентную часть энергии диссоциации:

$$D_{AB}^{cov} = \frac{D_{AA} + D_{BB}}{2},$$

где D_{AA} – энергия диссоциации между одинаковыми атомами AA, D_{BB} – энергия диссоциации между одинаковыми атомами BB. $D_{Be^2} = 2,156$ эВ, $D_{F^2} = 1,644$ эВ. (Значения диссоциации приведены в справочном материале в таблице 2).

Подставляем значения и получаем:

$$D_{BeF}^{cov} = \frac{2,156 \text{ эВ} + 1,644 \text{ эВ}}{2} = 1,9 \text{ эВ}.$$

2) Находим квадрат разницы электроотрицательностей:

$$\Delta X_{AB}^2 = (X_B - X_A)^2,$$

где X_A – значение электроотрицательности атома А, X_B – значение электроотрицательности атома В.

В нашем случае:

$$\Delta X_{BeF}^2 = (X_F - X_{Be})^2.$$

$X_{Be}=1,57 \text{ эВ}^{-1/2}$, $X_F= 3,98 \text{ эВ}^{-1/2}$. (Значения электроотрицательностей приведены в справочном материале в таблице 1).

Подставляем значения в формулу, получаем:

$$\Delta X_{BeF}^2 = (3,98 \text{ эВ}^{-1/2} - 1,57 \text{ эВ}^{-1/2})^2 = 5,81 \text{ эВ}.$$

3) Находим энергию диссоциации. Подставляем полученные значения:

$$D_{BeF} = 1,90 \text{ эВ} + 5,81 \text{ эВ} = 7,71 \text{ эВ}.$$

Ответ: $D_{BeF} = 7,71 \text{ эВ}$.

Пример 2. Найти энергию диссоциации химической связи BeF , используя формулу Оганова.

Воспользуемся формулой

$$D_{BeF} = D_{BeF}^{cov} \cdot (1 + \Delta X_{BeF}^2).$$

1) Находим ковалентную часть энергии диссоциации:

$$D_{AB}^{cov} = \frac{D_{Be^2} + D_{F^2}}{2}.$$

$D_{Be^2}= 2,156 \text{ эВ}$, $D_{F^2}= 1,644 \text{ эВ}$. (Значения диссоциации приведены в справочном материале в таблице 2).

Подставляем значения и получаем:

$$D_{BeF}^{cov} = \frac{2,156 \text{ эВ} + 1,644 \text{ эВ}}{2} = 1,9 \text{ эВ}.$$

2) Находим квадрат разницы электроотрицательностей:

$$\Delta X_{BeF}^2 = (X_F - X_{Be})^2.$$

$X_{Be} = 2,42$, $X_F = 4$. (Значения электроотрицательностей приведены в справочном материале в таблице 1).

Подставляем значения в формулу и получаем:

$$\Delta X_{BeF}^2 = (4 - 2,42)^2 = 2,49.$$

3) Находим энергию диссоциации. Подставляем получившиеся значения:

$$D_{BeF} = 1,90 \text{ эВ} \cdot (1 + 2,49) = 6,63 \text{ эВ}$$

Ответ: $D_{BeF} = 6,63 \text{ эВ}$.

Пример 3. Выполните расчёт термодинамической электроотрицательности Оганова по формуле $X_{Og} = 1,6571 + 0,5231 \cdot X_{Pauling}$ для кадмия (Cd).

а. Найдем значения электроотрицательности кадмия в таблице 1 в шкале Полинга:

$$X_{Pauling}(\text{Cd}) = 1,69 \text{ эВ}^{-1/2}.$$

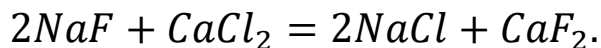
б. Подставим значение в формулу

$$X_{Og}(\text{Cd}) = 1,6571 + 0,5231 \cdot 1,69 \text{ эВ}^{-1/2} = 2,54.$$

В таблице указано значение $X_{Og}(\text{Cd}) = 2,36$. Мы видим, что значение достаточно близкое с тем, что получилось.

Ответ: $X_{Og}(\text{Cd}) = 2,54$.

Пример 4. Рассчитайте стандартную энтальпию реакции, используя значения шкалы Полинга



1) Найдем энергию диссоциации для каждого соединения по формуле

$$D_{AB} = D_{AB}^{cov} + \Delta X_{AB}^2 = \frac{D_{AA} + D_{BB}}{2} + (X_B - X_A)^2.$$

Энергия диссоциации для NaF

$$D_{NaF} = \frac{D_{Na^2} + D_{F^2}}{2} + (X_F - X_{Na})^2.$$

$$D_{NaF} = \frac{0,796 \text{ эВ} + 1,644 \text{ эВ}}{2} + (3,98 \text{ эВ}^{-1/2} - 0,93 \text{ эВ}^{-1/2})^2$$

$$= 10,52 \text{ эВ}.$$

Энергия диссоциации для CaCl

$$D_{CaCl} = \frac{D_{Ca^2} + D_{Cl^2}}{2} + (X_{Cl} - X_{Ca})^2.$$

$$D_{CaCl} = \frac{1,088 \text{ эВ} + 2,514 \text{ эВ}}{2} + (3,16 \text{ эВ}^{-1/2} - 1 \text{ эВ}^{-1/2})^2$$

$$= 6,47 \text{ эВ}.$$

Энергия диссоциации для NaCl

$$D_{NaCl} = \frac{D_{Na^2} + D_{Cl^2}}{2} + (X_{Cl} - X_{Na})^2.$$

$$D_{NaCl} = \frac{0,796 \text{ эВ} + 2,514 \text{ эВ}}{2} + (3,16 \text{ эВ}^{-1/2} - 0,93 \text{ эВ}^{-1/2})^2$$

$$= 6,63 \text{ эВ}.$$

Энергия диссоциации для CaF

$$D_{CaF} = \frac{D_{Ca^2} + D_{F^2}}{2} + (X_F - X_{Ca})^2.$$

$$D_{CaF} = \frac{1,088 \text{ эВ} + 1,644 \text{ эВ}}{2} + (3,98 \text{ эВ}^{-1/2} - 1 \text{ эВ}^{-1/2})^2$$

$$= 10,25 \text{ эВ}.$$

2) Считаем энтальпию, подставляя полученные значения в наше уравнение:

$$2 \cdot 10,52 \text{ эВ} + 2 \cdot 6,47 \text{ эВ} = 2 \cdot 6,63 \text{ эВ} + 2 \cdot 10,25 \text{ эВ}.$$

$$21,04 \text{ эВ} + 12,94 \text{ эВ} = 13,26 \text{ эВ} + 20,5 \text{ эВ}.$$

$$33,99 \text{ эВ} - 33,76 \text{ эВ} = 0,23 \text{ эВ}.$$

Ответ: + 0,23 эВ.

Перейдем к задачам и упражнениям. Распределение вариантов по усмотрению преподавателя.

2.3 Задачи и упражнения

Вариант 1

1. Вставьте пропущенные слова:

Электроотрицательность – это способность атома валентные электроны другого атома в химическом соединении.

2. Отметьте верные утверждения:

- все простые вещества металлы являются окислителями;
- чем больше разница в электроотрицательности между вступающими в связь атомами, тем стабильнее связь;
- окислитель – это вещество, которое отдает электроны в окислительно-восстановительной реакции;
- электроотрицательность – это склонность атома к притягиванию электронной плотности.

3. Выберите правильный ответ:

А) Какой из предложенных элементов более электроотрицателен по шкале Полинга:

- хлор
- алюминий
- медь
- свинец

Б) Какой из предложенных элементов менее электроотрицателен по шкале Оганова:

- бериллий
- натрий
- кремний
- никель

4. Выполните задание:

А) Впишите значение электроотрицательности по шкале Полинга:

для хлора –

для вольфрама –

для германия –

Б) Впишите значение электроотрицательности по шкале Оганова:

для хлора –

для вольфрама –

для германия –

В) Сделайте вывод на основе получившихся значений.

Ответ запишите:

.....

5. Ответьте на вопрос: В сложном веществе SiO_2 сдвиг связывающих элементы электронов происходит от какого элемента к какому? Объясните.

А) по шкале Полинга:

Б) по шкале Оганова:

В) по шкале Малликена:

Сделайте вывод на основе получившихся значений. Ответ запишите:

.....
.....
.....

6. Выполните задание.

Найдите квадрат разности электроотрицательностей из формулы нахождения электроотрицательности Полинга:

А) для соединения КСl

.....
.....
.....
.....
.....

Б) для соединения CuF

.....
.....
.....
.....
.....

7. Выполните задание.

Найдите квадрат разности электроотрицательностей из формулы нахождения электроотрицательности Оганова:

А) для соединения КСl

.....
.....

.....
.....
.....
.....
.....

В) Сравните полученные значения со значением из таблицы 2 и сделайте вывод:

.....
.....
.....

9. Выполните расчёт термодинамической электроотрицательности Оганова используя значения электроотрицательности Аллена по формуле $X_{Og} = 1,5166 + 0,6556 \cdot X_{Allen}$

А) для хлора

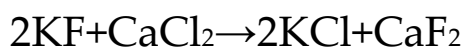
.....
.....
.....
.....

Б) для германия

.....
.....
.....
.....

10. Выполните задание.

Рассчитайте стандартную энтальпию реакции



А) По формуле Полинга

.....

.....

.....

.....

.....

.....

.....

.....

.....

.....

.....

.....

.....

.....

.....

.....

.....

.....

Б) По формуле Оганова

.....

.....

.....

.....

.....

.....

.....

.....

.....

.....

.....

.....

.....

.....

.....

.....

.....

.....

В) Сделайте вывод

.....
.....
.....
.....

Вариант 2

1. Вставьте пропущенное слово:

Атомы химического элемента с высокой электроотрицательностью способны смещать электроны.

2. Отметьте верные утверждения:

чем больше разница в электроотрицательности между вступающими в связь атомами, тем стабильнее связь;

на электроотрицательность влияют радиус атома и расстояние между ядром атома и валентными электронами;

основоположник теории электроотрицательности А. Р. Оганов;

все простые вещества металлы являются окислителями.

3. Выберите правильный ответ:

А) Какой из предложенных элементов менее электроотрицателен по шкале Полинга:

- медь
- германий
- полоний
- свинец

Б) Какой из предложенных элементов более электроотрицателен по шкале Оганова:

- теллур
- кремний
- азот
- кислород

4. Выполните задание:

А) Впишите значение электроотрицательности по шкале Полинга:

для калия –

для рутения –

для германия –

Б) Впишите значение электроотрицательности по шкале Оганова:

для ниобия –

для ртути –

для магния –

В) Сделайте вывод на основе получившихся значений.

Ответ запишите:

.....
.....
.....

5. Ответьте на вопрос: В сложном веществе NH_3 сдвиг связывающих электронов происходит от какого элемента к какому? Объясните.

А) по шкале Полинга:

Б) по шкале Оганова:

В) по шкале Малликена:

Сделайте вывод на основе получившихся значений. Ответ запишите:

.....
.....
.....

6. Выполните задание.

Найдите квадрат разности электроотрицательностей из формулы нахождения электроотрицательности Полинга:

А) для соединения NaBr

.....
.....
.....
.....
.....

Б) для соединения AuCl

.....
.....
.....
.....
.....

7. Выполните задание.

Найдите квадрат разности электроотрицательностей из формулы нахождения электроотрицательности Оганова:

А) для соединения NaBr

.....
.....
.....
.....
.....

Б) для соединения AuCl

.....
.....
.....
.....
.....

В) Сравните полученные значения со значениями из задания 6 и сделайте вывод

.....
.....
.....

8. Выполните задание.

Найдите энергию диссоциации соединения SbF

А) с помощью формулы Полинга:

.....
.....
.....
.....
.....
.....
.....
.....
.....

Б) с помощью формулы Оганова:

.....
.....
.....
.....
.....
.....
.....
.....
.....

В) Сравните полученные значения со значением из таблицы 2 и сделайте вывод:

.....
.....
.....

9. Выполните расчёт термодинамической электроотрицательности Оганова используя значения электроотрицательности Мартынова-Бацанова по формуле $X_{Og} = 1,5974 + 0,5302 \cdot$

X_{M-Vi}

А) для лития

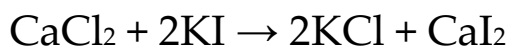
.....
.....
.....
.....

Б) для бария

.....
.....
.....

.....
.....
10. Выполните задание.

Рассчитайте стандартную энтальпию реакции



А) По формуле Полинга

.....
.....
.....
.....
.....
.....
.....
.....
.....
.....
.....
.....
.....
.....
.....
.....
.....
.....
.....
.....
.....
.....

Б) По формуле Оганова

.....
.....
.....
.....
.....
.....
.....
.....
.....
.....
.....
.....
.....
.....
.....
.....
.....
.....
.....
.....
.....

.....
.....
.....
.....
.....
.....

В) Сделайте вывод

.....
.....
.....
.....

Вариант 3

1. Вставьте пропущенные слова:

Все вещества металлы являются восстано-
вителями. Они отдают электроны и приобретают положи-
тельную степень окисления.

2. Отметьте верные утверждения:

- неметаллы могут быть только окислителями;
- на электроотрицательность влияют радиус атома и расстояние между ядром атома и валентными электронами;
- практически все химические реакции приводят к разрыву одних связей и образованию других;
- основоположник теории электроотрицательности Лайнус Полинг.

3. Выберите правильный ответ:

А) Какой из предложенных элементов более электроотрицателен по шкале Полинга:

- хром
- титан
- палладий
- цезий

Б) Какой из предложенных элементов менее электроотрицателен по шкале Оганова:

- водород
- сера
- вольфрам
- бор

4. Выполните задание:

А) Впишите значение электроотрицательности по шкале Полинга:

для серебра –

для ртути –

для урана –

Б) Впишите значение электроотрицательности по шкале Оганова:

для йода -

для самария -

для фосфора -

В) Сделайте вывод на основе получившихся значений.

Ответ запишите:

.....
.....
.....

5. Ответьте на вопрос: В сложном веществе P_2O_5 сдвиг связывающих элементы электронов происходит от какого элемента к какому? Объясните.

А) по шкале Полинга:

Б) по шкале Оганова:

В) по шкале Малликена:

Сделайте вывод на основе получившихся значений. Ответ запишите:

.....
.....
.....

6. Выполните задание.

Найдите квадрат разности электроотрицательностей из формулы нахождения электроотрицательности Полинга:

А) для соединения MgO

.....
.....
.....
.....
.....

Б) для соединения CsI

.....
.....

.....
.....
.....

7. Выполните задание.

Найдите квадрат разности электроотрицательностей из формулы нахождения электроотрицательности Оганова:

А) для соединения MgO

.....
.....
.....
.....
.....

Б) для соединения CsI

.....
.....
.....
.....
.....

В) Сравните полученные значения со значениями из задания 6 и сделайте вывод

.....
.....
.....

8. Выполните задание.

Найдите энергию диссоциации соединения LiI

А) с помощью формулы Полинга:

.....
.....
.....
.....
.....
.....
.....
.....
.....

Б) с помощью формулы Оганова:

.....
.....
.....
.....
.....
.....
.....
.....
.....

В) Сравните полученные значения со значением из таблицы 2 и сделайте вывод:

.....
.....
.....
.....

9. Выполните расчёт термодинамической электроотрицательности Оганова используя значения электроотрицательности Малликена по формуле $X_{Og} = 1,5202 + 0,2501 \cdot X_{Mulliken}$

А) для олова

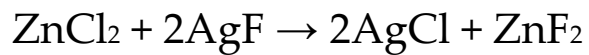
.....
.....
.....
.....

Б) для свинца

.....
.....
.....
.....
.....

10. Выполните задание.

Рассчитайте стандартную энтальпию реакции



А) По формуле Полинга

.....
.....
.....
.....
.....
.....
.....
.....
.....
.....
.....
.....
.....
.....
.....
.....
.....
.....
.....
.....
.....

Б) По формуле Оганова

.....

.....

.....

.....

.....

.....

.....

.....

.....

.....

.....

.....

.....

.....

.....

.....

.....

.....

.....

.....

.....

.....

.....

.....

В) Сделайте вывод

.....

.....

.....

.....

2.4. Контрольные вопросы

1. Что такое электроотрицательность?
2. Кто является основоположником теории электроотрицательности? «Главная» шкала.
3. На какие группы можно разделить простые вещества? Охарактеризуйте каждую.
4. Какие основные факторы влияют на электроотрицательность?

5. Назовите наиболее распространенные шкалы.
6. Объясните формулы нахождения электроотрицательности.
7. Объясните разделение на металлы и неметаллы с помощью значений электроотрицательностей. Приведите примеры.
8. Назовите определение корреляции.
9. В чем сложность предсказания направления химической реакции по шкале Полинга?
10. В чем преимущество термохимической шкалы электроотрицательности?

2.5 Справочный материал

Таблица 1 – Значения электроотрицательностей элементов для разных шкал

Элемент	Шкала Полинга (эВ ^{-1/2})	Шкала Малликена (эВ)	Шкала Аллена (эВ)	Шкала Мар- тынова-Баца- нова (эВ ^{-1/2})	Шкала Ога- нова
H	2.20	7.18	2.3	-	3.04
Li	0.98	3.00	0.912	0.95	2.17
Na	0.93	2.84	0.869	0.9	2.15
K	0.82	2.42	0.734	0.8	2.07
Rb	0.82	2.33	0.706	0.8	2.07
Cs	0.79	2.18	0.659	0.75	1.97
Fr	0.70	2.21	0.67	0.7	2.01
Be	1.57	4.41	1.576	1.5	2.42
Mg	1.31	3.62	1.293	1.2	2.39

Элемент	Шкала Полинга (эВ ^{-1/2})	Шкала Мал-ликена (эВ)	Шкала Аллена (эВ)	Шкала Мар-тынова-Баца-нова (эВ ^{-1/2})	Шкала Ога-нова
Ca	1.00	3.07	1.034	1	2.20
Sr	0.95	2.87	0.963	1	2.13
Ba	0.89	2.68	0.881	0.9	2.02
Ra	0.90	2.69	0.89	0.9	-
Sc	1.36	3.37	1.19	1.3	2.35
Ti	1.54	3.45	1.38	1.6	2.23
V	1.63	3.64	1.53	(II) 1.5 (III) 1.7 (V) 2.00	2.08
Cr	1.66	3.72	1.65	(II) 1.6 (III) 1.8 (V) 2.2	2.12
Mn	1.55	3.46	1.75	(II) 1.5 (III) 1.8 (IV) 2.0 (VII) 2.3	2.20
Fe	1.83	4.03	1.8	(II) 1.8 (III) 1.9	2.32
Co	1.88	4.27	1.84	(II) 1.8 (III) 2.0 (IV) 3.1	2.34
Ni	1.91	4.40	1.88	(II) 1.9 (III) 2.0 (IV) 3.4	2.32
Cu	1.90	4.48	1.85	(I) 1.8 (II) 2.1	2.86
Zn	1.65	4.40	1.59	1.6	2.26
Y	1.22	3.26	1.12	1.25	2.52
Zr	1.33	3.53	1.32	1.5	2.05
Nb	1.60	3.84	1.41	(III) 1.6 (V) 1.9	2.59
Mo	2.16	3.92	1.47	(IV) 1.8 (VI) 2.2	2.47
Tc	1.90	3.91	1.51	(IV) 1.9	2.82
Ru	2.20	4.20	1.54	(II) 2.0 (III) 2.0 (IV) 2.1	2.68

Элемент	Шкала Полинга (эВ ^{-1/2})	Шкала Мал-ликена (эВ)	Шкала Аллена (эВ)	Шкала Мар-тынова-Баца-нова (эВ ^{-1/2})	Шкала Ога-нова
Rh	2.28	4.30	1.56	(II) 2.1 (III) 2.1	2.65
Pd	2.20	4.45	1.58	(II) 2.2 (III) 2.2 (IV) 2.3	2.70
Ag	1.93	4.44	1.87	1.9	2.88
Cd	1.69	4.14	1.52	1.7	2.36
Hf	1.30	3.50	1.16	1.4	2.01
Ta	1.50	4.10	1.34	(III) 1.5 (V) 1.8	2.32
W	2.36	4.40	1.47	(IV) 1.8 (V) 2.1	2.42
Re	1.90	3.97	1.6	(IV) 1.9	2.59
Os	2.20	4.89	1.65	(II) 2.0 (III) 2.1 (IV) 2.2	2.72
Ir	2.20	5.34	1.68	(II) 2.1 (III) 2.2	2.79
Pt	2.28	5.57	1.72	(II) 2.3 (III) 2.3 (IV) 2.4	2.98
Au	2.54	5.77	1.92	(I) 2.0 (III) 2.4	2.81
Hg	2.00	4.97	1.76	1.8	2.92
B	2.04	4.29	2.05	1.9	3.04
Al	1.61	3.21	1.613	1.5	2.52
Ga	1.81	3.21	1.756	1.7	2.43
In	1.78	3.09	1.656	1.8	2.29
Tl	1.62	3.24	1.789	(I) 1.4 (III) 1.9	2.26
C	2.55	6.26	2.544	2.5	3.15
Si	1.90	4.77	1.916	1.9	2.82
Ge	2.01	4.57	1.994	2.0	2.79
Sn	1.96	4.23	1.824	(II) 1.8 (IV) 2.0	2.68
Pb	2.33	3.89	1.854	(II) 1.9 (IV) 2.1	2.62
N	3.04	7.23	3.066	3.0	3.56
P	2.19	5.62	2.253	2.1	3.16

Элемент	Шкала Полинга (эВ ^{-1/2})	Шкала Мал-ликена (эВ)	Шкала Аллена (эВ)	Шкала Мар-тынова-Баца-нова (эВ ^{-1/2})	Шкала Ога-нова
As	2.18	5.31	2.211	2.0	3.15
Sb	2.05	4.85	1.984	(III) 1.9 (V) 2.2	3.05
Bi	2.02	4.11	2.01	(III) 1.9 (V) 2.2	-
O	3.44	7.54	3.61	3.55	3.78
S	2.58	6.22	2.589	2.5	3.44
Se	2.55	5.89	2.424	2.4	3.37
Te	2.10	5.49	2.158	2.1	3.14
Po	2.00	4.91	2.19	2.0	-
F	3.98	10.41	4.193	4.0	4.00
Cl	3.16	8.29	2.869	3.0	3.56
Br	2.96	7.59	2.685	2.8	3.45
I	2.66	6.76	2.359	2.5	3.20
At	2.20	5.87	2.39	2.2	-
La	1.10	3.06	-	1.2	2.49
Ce	1.12	3.05	-	-	2.61
Pr	1.13	3.21	-	-	2.24
Nd	1.14	3.72	-	-	2.11
Pm	1.13	2.86	-	-	-
Sm	1.17	2.90	-	-	1.90
Eu	1.20	2.89	-	-	1.81
Gd	1.20	3.14	-	-	2.40
Tb	1.10	3.51	-	-	2.29
Dy	1.22	3.15	-	-	2.07
Ho	1.23	3.18	-	-	2.12
Er	1.24	3.21	-	-	2.02
Tm	1.25	3.61	-	-	2.03
Yb	1.10	3.12	-	-	1.78

Элемент	Шкала Полинга (эВ ^{-1/2})	Шкала Малликена (эВ)	Шкала Аллена (эВ)	Шкала Мартынова-Бацанова (эВ ^{-1/2})	Шкала Оганова
Lu	1.27	2.89	1.09	-	2.68
Th	1.30	3.63	-	(IV) 1.3	2.62
U	1.38	3.36	-	(IV) 1.4 (V) 1.6 (VI) 1.8	2.45
He	-	12.29	4.16	-	-
Ne	-	10.78	4.787	-	-
Ar	-	7.88	3.242	-	-
Kr	3.23	7.00	2.966	-	-
Xe	3.02	6.07	2.582	-	-
Rn	2.81	5.37	2.6	-	-

Таблица 2 – Экспериментальные энергии диссоциации связей, используемые для расчета электроотрицательности

Гомоядерные связи	Энергия диссоциации (эВ)	Гетероядерные связи	Энергия диссоциации (эВ)
H²	4.517	HF	5.904
Li²	1.116	LiF	6.001
Be²	2.156	BeF	6.622
B²	4.353	F²B-F	5.773
C²H⁶ (C-C)	3.911	H³C-F	4.770
N²H⁴ (N-N)	2.871	H²N-H	4.665
H²O² (O-O)	2.183	H-OH	5.152
F²	1.644	RbI	3.304
Na²	0.796	NaF	5.379

Гомоядерные связи	Энергия диссоциации (эВ)	Гетероядерные связи	Энергия диссоциации (эВ)
Mg²	1.337	MgF	5.343
Al²	2.739	AlF	6.996
H³Si-SiH³ (Si-Si)	3.327	SiF	5.974
H²P-PH² (P-P)	2.654	H²P-H	3.638
FS-SF (S-S)	3.755	SF	3.560
Cl²	2.514	HCl	4.471
K²	0.528	KF	5.127
Ca²	1.088	CaF	5.807
Sc²	1.689	ScF	6.209
Ti²	1.219	TiF	5.897
V²	0.961	VF	6.115
Cr²	0.742	CrF	5.421
Mn²	0.532	MnF	4.614
Fe₂	0.778	FeF	4.633
Co²	0.740	CoF	4.467
Ni²	0.741	NiF	4.557
Cu²	2.083	CuF	4.291
Zn²	0.230	ZnF	3.773
Ga²	1.197	GaF	4.941
Ge²	2.740	GeF	5.421
As²	3.999	AsF	4.249
Se²	1.769	SeF	3.513

Гомоядерные связи	Энергия диссоциации (эВ)	Гетероядерные связи	Энергия диссоциации (эВ)
Br²	2.056	FBr	2.637
Rb²	0.503	RbF	5.091
Sr²	0.871	SrF	5.638
Y²	2.798	YF	7.103
Zr²	1.052	ZrF	6.500
Nb²	1.349	NbF	4.480
Mo²	1.227	MoF	4.809
Tc²	0.050	TcF	2.020
Ru²	1.125	RuF	3.781
Rh²	0.963	RhF	3.686
Pd²	0.644	PdF	3.088
Ag²	1.631	AgF	3.699
Cd²	0.076	CdF	3.161
In²	1.036	InF	5.244
Sn²	1.939	SnF	4.933
Sb²	3.127	SbF	4.550
Te²	2.860	CsI	3.508
I²	1.681	FI	2.730
Cs²	0.433	CsF	5.327
Ba²	0.698	BaF	5.767
Hf²	1.070	HfF	6.737
Ta²	1.469	TaF	5.939
W²	1.594	WF	5.638

Гомоядерные связи	Энергия диссоциации (эВ)	Гетероядерные связи	Энергия диссоциации (эВ)
Re²	1.340	ReF	4.458
Os²	1.364	OsF	3.955
Ir²	1.149	IrF	3.430
Pt²	0.980	PtF	2.684
Au²	2.294	AuCl	3.555
Hg²	0.084	HgF	1.866
Tl²	0.616	TlF	4.550
Pb²	0.898	PbF	3.679
Fr²	0.430	FrF	5.160
La²	2.520	LaF	6.830
Ce²	2.470	CeF	6.032
Pr²	1.310	PrF	6.032
Nd²	0.830	NdF	5.651
Sm²	0.520	SmF	5.856
Eu²	0.300	EuF	5.638
Gd²	1.780	GdF	6.115
Tb²	1.320	TbF	5.814
Dy²	0.690	DyF	5.503
Ho²	0.820	HoF	5.597
Er²	0.740	ErF	5.856
Tm²	0.520	TmF	5.286
Yb²	0.170	YbF	5.365
Lu²	1.430	LuF	4.198

Гомоядерные связи	Энергия диссоциации (эВ)	Гетероядерные связи	Энергия диссоциации (эВ)
Th²	2.995	ThF	6.758
U²	2.301	UF	6.716
-	-	LiCl	4.710
-	-	NaCl	4.384
-	-	KCl	4.405
-	-	RbCl	4.474
-	-	CsCl	4.619
-	-	LiBr	4.195
-	-	NaBr	3.900
-	-	KBr	3.929
-	-	RbBr	3.946
-	-	CsBr	4.033
-	-	LiI	3.534
-	-	NaI	3.196
-	-	KI	3.343

Список литературы

1. Tantardini C., Oganov A.R. Thermochemical electronegativities of the elements / C. Tantardini, A.R. Oganov // Nature communication. – 2021. – Vol. 12. – P. 2087.
2. Бацанов С.С. Диэлектрические методы изучения химической связи и концепция электроотрицательности / С.С. Бацанов // Русская химия. — 1982. — Вып. 51. — с. 684-697.
3. Ю, М. и Тринкл, Д.Р. Точный и эффективный алгоритм интеграции заряда Бадера. / М.Ю., Д.Р. Тринкл // Химия. Физ. – 2011. – 134 с.
4. Анфиногенова, И.В. Химия: учебник и практикум для среднего профессионального образования / И.В. Анфиногенова, А.В. Бабков, В.А. Попков. — 2-е изд., испр. и доп. — Москва : Издательство Юрайт, 2022. — 291 с.
5. Льюис, Г.Н. Атом и молекула. / Г.Н. Льюис // Ам. Химия. Соц. — 1916. — Вып. 38. — с. 762–785.
6. Химия : учебник для вузов / Ю.А. Лебедев, Г.Н. Фадеев, А.М. Голубев, В.Н. Шаповал ; под общей редакцией Г.Н. Фадеева. — 2-е изд., перераб. и доп. — Москва : Издательство Юрайт, 2022. — 431 с.
7. Рабочая тетрадь для самостоятельной работы студентов по курсу «Общая и неорганическая химия» / сост. Н.П. Савинова. — Чебоксары : Чуваш. гос. пед. ун-т, 2021. — 62 с.
8. Постников, А. Ю. К изучению термохимии в школьном курсе химии / А. Ю. Постников // Химия в школе. — М., 2012. — № 2. — С. 50–54.

Для заметок

Учебное издание

ШАТСКАЯ Анна Сергеевна, МАКАРОВ Андрей Сергеевич,
АФОНИН Геннадий Витальевич, КОНЧАКОВ Роман Анатольевич,
ХОНИК Виталий Александрович

**ТЕРМОХИМИЧЕСКАЯ ЭЛЕКТРООТРИЦАТЕЛЬНОСТЬ
ЭЛЕМЕНТОВ**

Рабочая тетрадь

*для студентов бакалавриата физико-математического
и естественно-географического факультетов, обучающихся
по направлению 44.03.05 Педагогическое образование (с двумя профилями подготовки),
профили «Естествознание», «Физика», «Химия», «Экология»*

В авторской редакции

Изготовление оригинала-макета: *Д.Н. Астахова*

Подписано в печать 25.05.2023. Формат 60×84 ¹/₁₆. Бумага офсетная.

Печать трафаретная. Гарнитура «Таймс». Усл. печ. 3,5. Уч.-изд. л. 3,25.

Заказ 151. Тираж 30 экз.

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«Воронежский государственный педагогический университет».

Отпечатано в издательско-полиграфическом центре ВГПУ.

394043, г. Воронеж, ул. Ленина, 86. Тел. (473) 255-58-32, 255-61-83.