压力下元素周期率和元素化学性质变化趋势被揭示

作者：writer 来源：爱科学

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/17673.html

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

压力下元素周期率和元素化学性质变化趋势被揭示。1869年元素周期表的发现是近现代化学理论诞生的标志，被誉为现代化学的图腾，其深刻地反映了量子力学基本规律与化学原理间的关系。几乎全世界所有的化学教科书后都附有元素周期表，被奉为金科玉律。

然而近年来研究人员发现，在压力下，元素性质和电子行为会产生明显的改变，进而诱发了丰富的物理化学现象，这是了解非常规材料合成和行星内部物质循环等科学问题的重要途径。尽管研究人员得到了大量新奇的高压物理和化学个例，但目前尚缺乏完整且有效的理论模型来解释这些现象。

多个迹象表明，元素周期律在高压环境中会发生一定变化，而这将成为探索高压物理和化学规律的突破口。

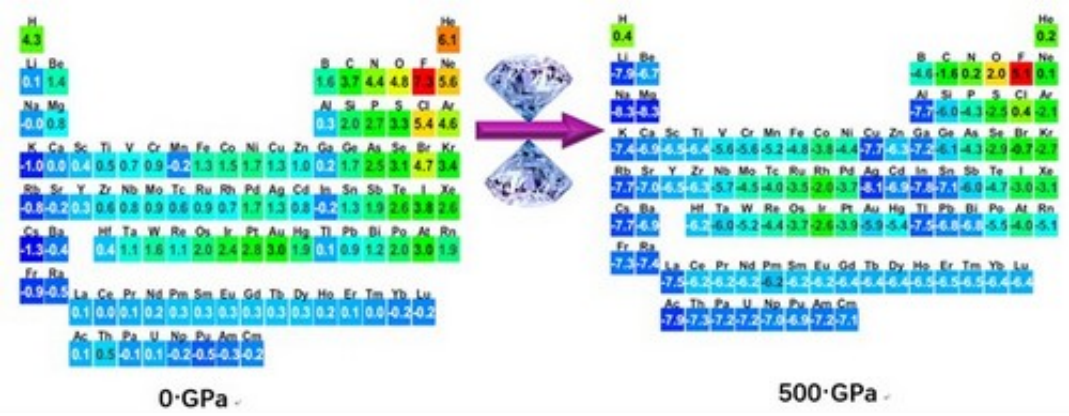
为此，南开大学物理科学学院副教授董校课题组和国外科研人员合作，近十年研究相关问题，探索元素化学性质在压力下的变化规律，相关工作近期发表在美国《国家科学院院刊》上。

1934年，美国化学家罗伯特·密立根创建了描述元素化学性质的数学模型，其中存在两个重要的参数：电负性和化学硬度，这两项分别对应化学势关于电荷数的第一阶和第二阶展开系数。前者描述原子吸引电子的能力，后者描述电子状态的稳定性。电负性和化学硬度表现出明显的元素周期律，被视为元素周期律的主要表现形式。

数十年来，人们一直认为电负性和化学硬度是元素的固有性质，不随外界条件的改变而改变。董校及科研团队在前人工作的基础上，利用第一性原理计算结合组内开发的带电氦矩阵方法，揭示了氢到铜之前的96种元素在500 GPa以内的电负性和化学硬度随压力的变化趋势。

其研究表明，压力会显著地改变元素的电负性和化学硬度。与前人理解的不同，压力会改变元素化学势和电荷间的函数关系，从而改变元素的化学性质。

同时，随着压力增加，各元素间的电负性和化学硬度排序会出现显著改变，进而导致了各元素间化学性质的重新排列，如在常压下，还原性最强的元素为铯（Cs），但因压力导致的轨道重组变成了钠（Na）。



各个元素电负性从0 GPa到500 GPa的变化 南开大学供图

元素性质的变化具体表现三方面：一是压力会普遍降低各个元素的化学硬度，从而导致高压下整个元素周期表向金属性偏移，使得更多的元素表现金属特性，如金属化现象，聚合现象等。而常压下的典型非金属（如碳、氮、氧等）会出现性质移动；二是在100GPa以上，压力可以模糊长周期间的界限；三是电子轨道发生重排，高角动量电子因其具有更少的节点而在高压下焓值显著降低，进而改变了原有的轨道交错规律。具体表现为p或d轨道能量降低，电子更倾向于占据p或d轨道，从而进一步引起其性质改变。

研究人员表示，这些计算结果可以解释大量已发表的理论预测和实验现象，并预测高压下的化合物形成规律，为设计高压下新型化合物构筑了理论基础。（来源：中国科学报 乔仁铭 陈彬）

相关论文信息：https://doi.org/10.1073/pnas.2117416119

版权声明：凡本网注明来源：中国科学报、科学网、科学新闻杂志的所有作品，网站转载，请在正文上方注明来源和作者，且不得对内容作实质性改动；微信公众号、头条号等新媒体平台，转载请联系授权。邮箱：shouquan@stimes.cn。
作者：董校等 来源：《国家科学院院刊》

更多 科学进展 请访问 https://www.iikx.com/news/progress/

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，爱科学iikx.com转发