# Лекция 8

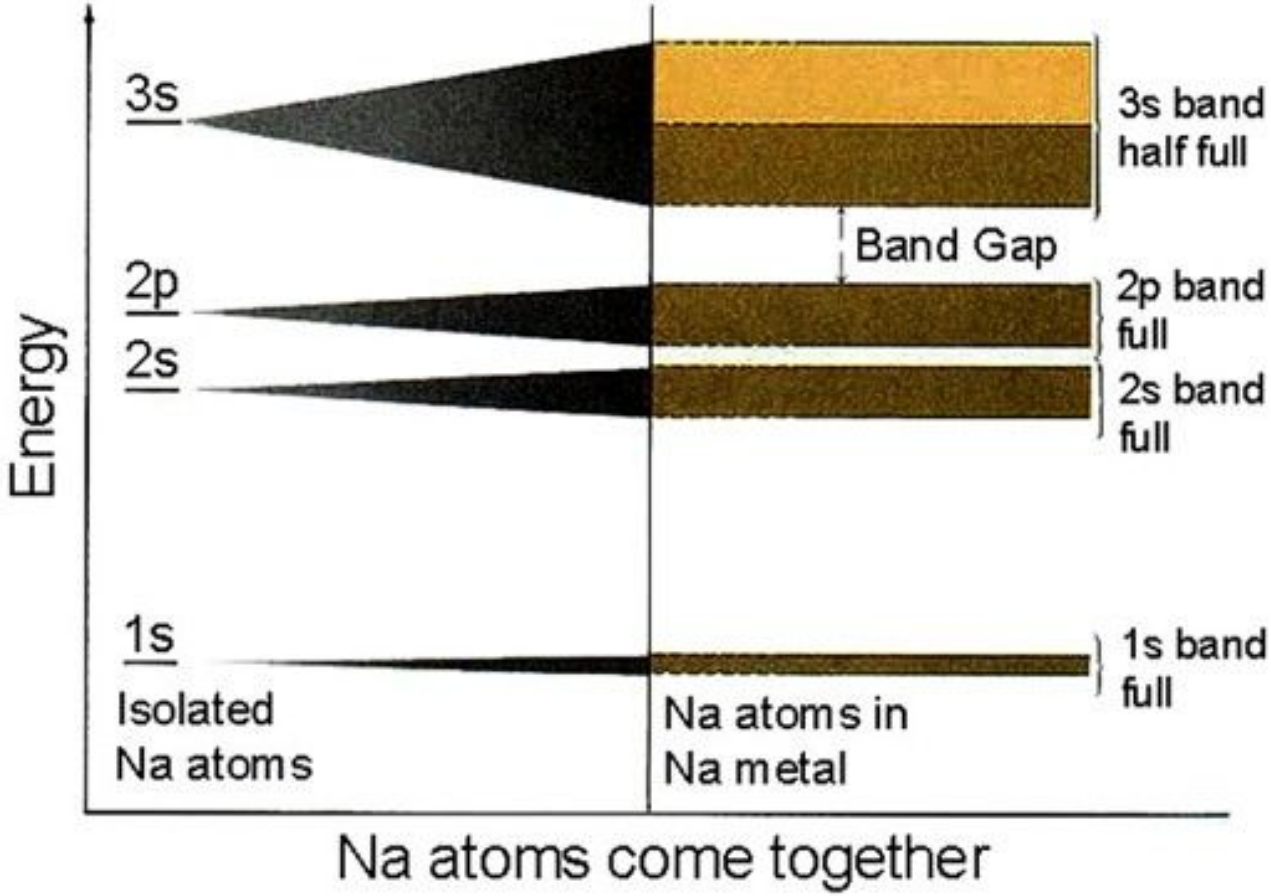
## Влияние химической связи на свойства материалов.

Алексей Янилкин

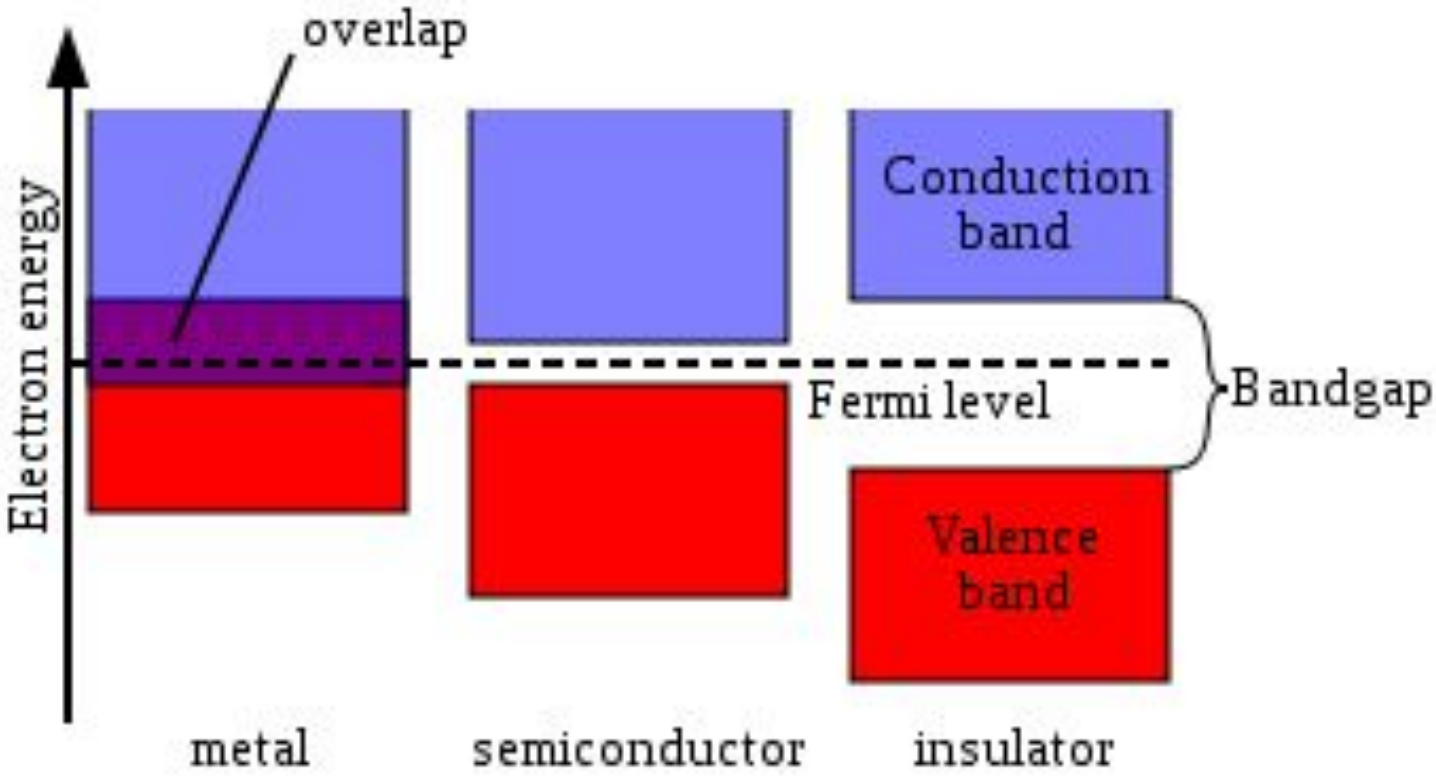
# План лекции

- Электрические свойства
  - Ширина запрещенной зоны
  - Влияние дефектов
- Упругие свойства
- Температура плавления и кипения
- Вопросы
- Список литературы

# Электрические свойства: зонная теория

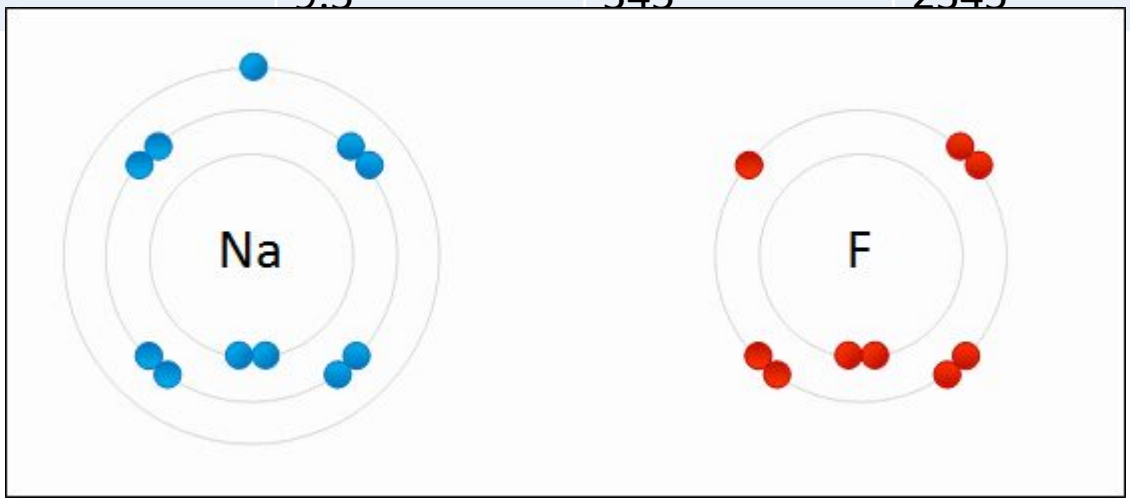


# Электрические свойства



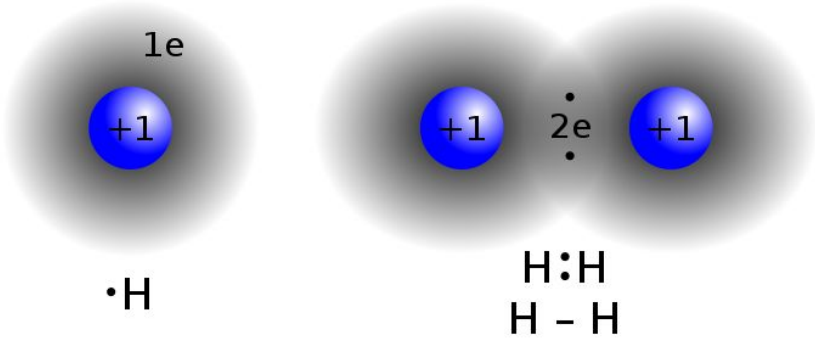
# Ионная связь

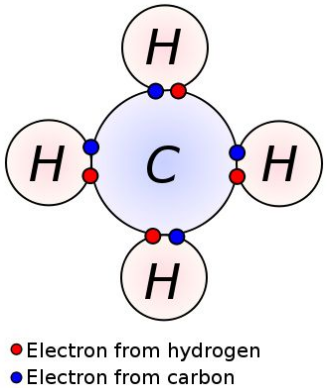
| Соединение | Энергия связи, эВ | Ширина запрещенной зоны, эВ | Модуль упругости, ГПа | Температура плавления, К | Температура кипения, К |
|---|---|---|---|---|---|
| LiCl | 8.8 (2.57 A) | 9.5 | 30 | 878 | 1655 |
| NaCl | 7.9 (2.82 A) | 8.5 | 24 | 1073 | 1738 |
| KCl | 7.4 (3.14 A) | 9.5 | 17 | 1043 | 1693 |
| Al2O3 | | 9.5 | 345 | 2345 | 3250 |



# Ковалентная связь:

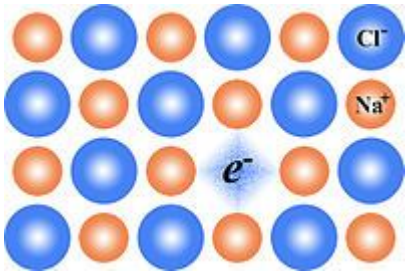
| Соединение | Энергия когезии, эВ | Ширина запрещенной зоны, эВ | Объемный модуль упругости, ГПа | Температура плавления, К | Температура кипения, К |
|---|---|---|---|---|---|
| C | 7 (1.54 A) | 5.5 | 440 | 3700-4000 (при 11 ГПа) | |
| Si | 3.6 (2.35 A) | 1.21 | 97,6 | 1414,85 | 2349,85 |
| Ge | 3.2 (2.45 A) | 0.75 | 75 | 1210 | 3103 |
| SiC | | 2.36-3.03 | | | |
| BN | | 4.5-6.4 | 400 | 2973 | |



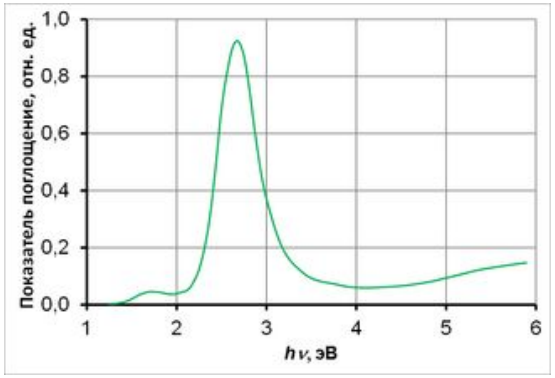



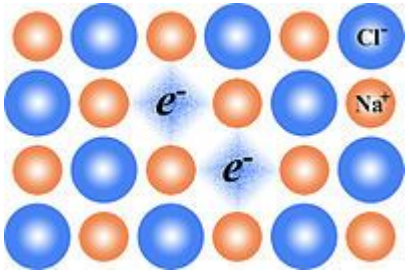
# Диэлектрики: центры окраски

- Центры окраски - точечные дефекты в прозрачных диэлектриках, поглощающие оптическое излучение вне области собственного поглощения диэлектрика.

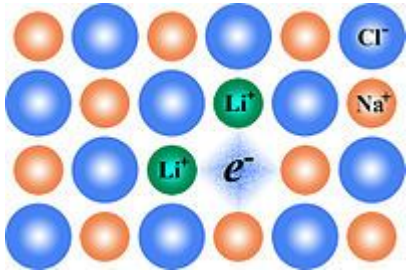



F-центр

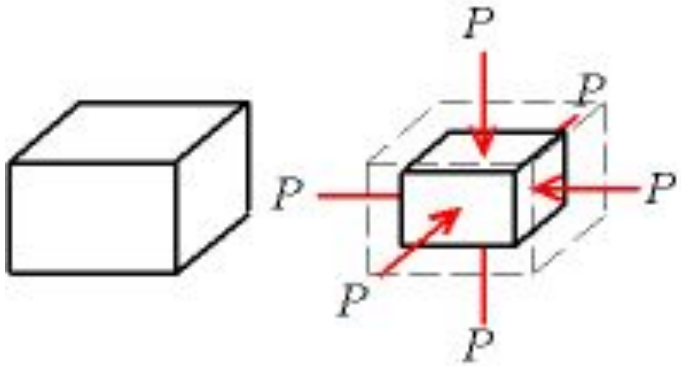


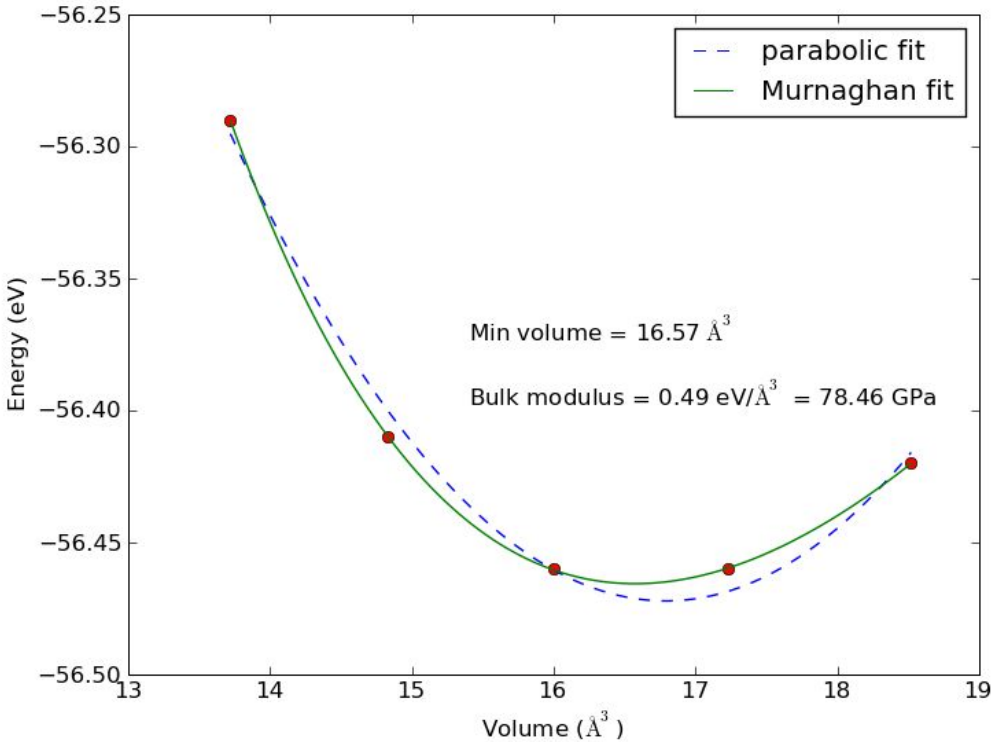




F2- и FB - центры



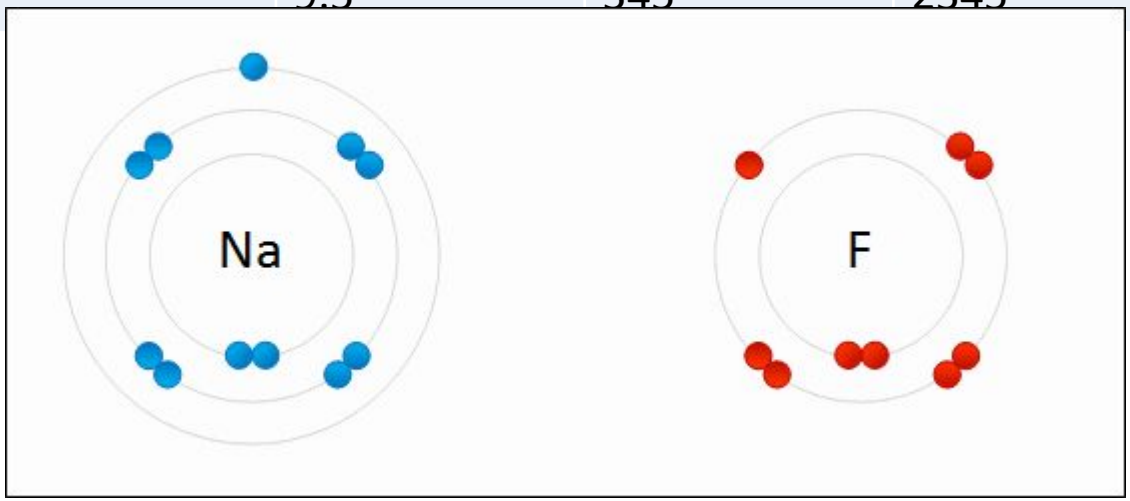
# Упругие свойства



# Ионная связь

| Соединение | Энергия связи, эВ | Ширина запрещенной зоны, эВ | Модуль упругости, ГПа | Температура плавления, К | Температура кипения, К |
|---|---|---|---|---|---|
| LiCl | 8.8 (2.57 A) | 9.5 | 30 | 878 | 1655 |
| NaCl | 7.9 (2.82 A) | 8.5 | 24 | 1073 | 1738 |
| KCl | 7.4 (3.14 A) | 9.5 | 17 | 1043 | 1693 |
| Al2O3 | | 9.5 | 345 | 2345 | 3250 |



# Ионная связь

- Объемный модуль:

$$B = \frac{\alpha q^2}{18R_0^4}\left(\frac{R_0}{\rho} - 2\right)$$

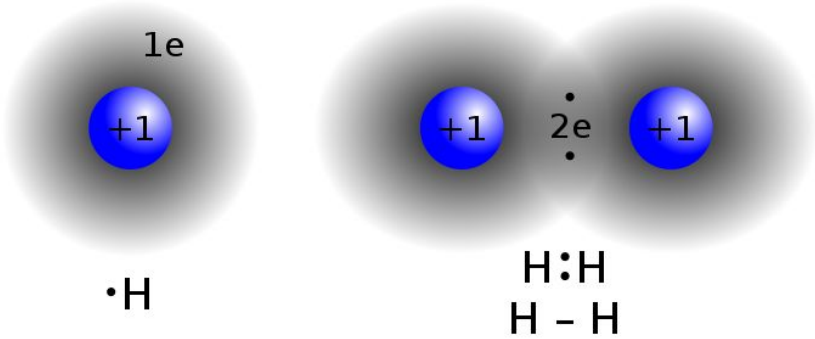
- Из экспериментального значения модуля сдвига определяют отношение $\frac{R_0}{\rho}$. Для KCl:

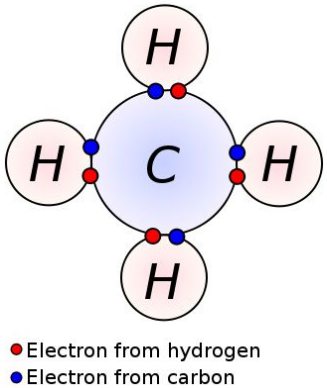
$$\frac{R_0}{\rho} \approx 10$$

Для многих щелочно-галоидных солей $\rho \approx 0.3$ А

# Ковалентная связь:

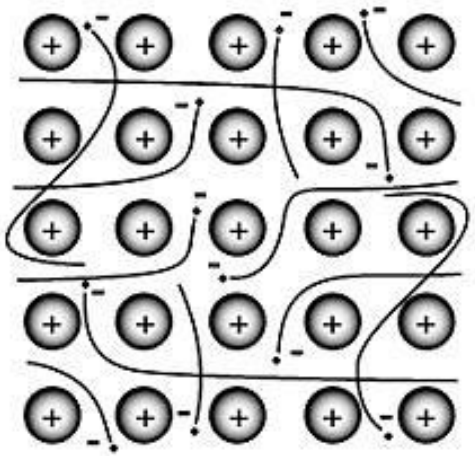
| Соединение | Энергия когезии, эВ | Ширина запрещенной зоны, эВ | Объемный модуль упругости, ГПа | Температура плавления, К | Температура кипения, К |
|---|---|---|---|---|---|
| C | 7 (1.54 A) | 5.5 | 440 | 3700-4000 (при 11 ГПа) | |
| Si | 3.6 (2.35 A) | 1.21 | 97,6 | 1414,85 | 2349,85 |
| Ge | 3.2 (2.45 A) | 0.75 | 75 | 1210 | 3103 |
| SiC | | 2.36-3.03 | | | |
| BN | | 4.5-6.4 | 400 | 2973 | |



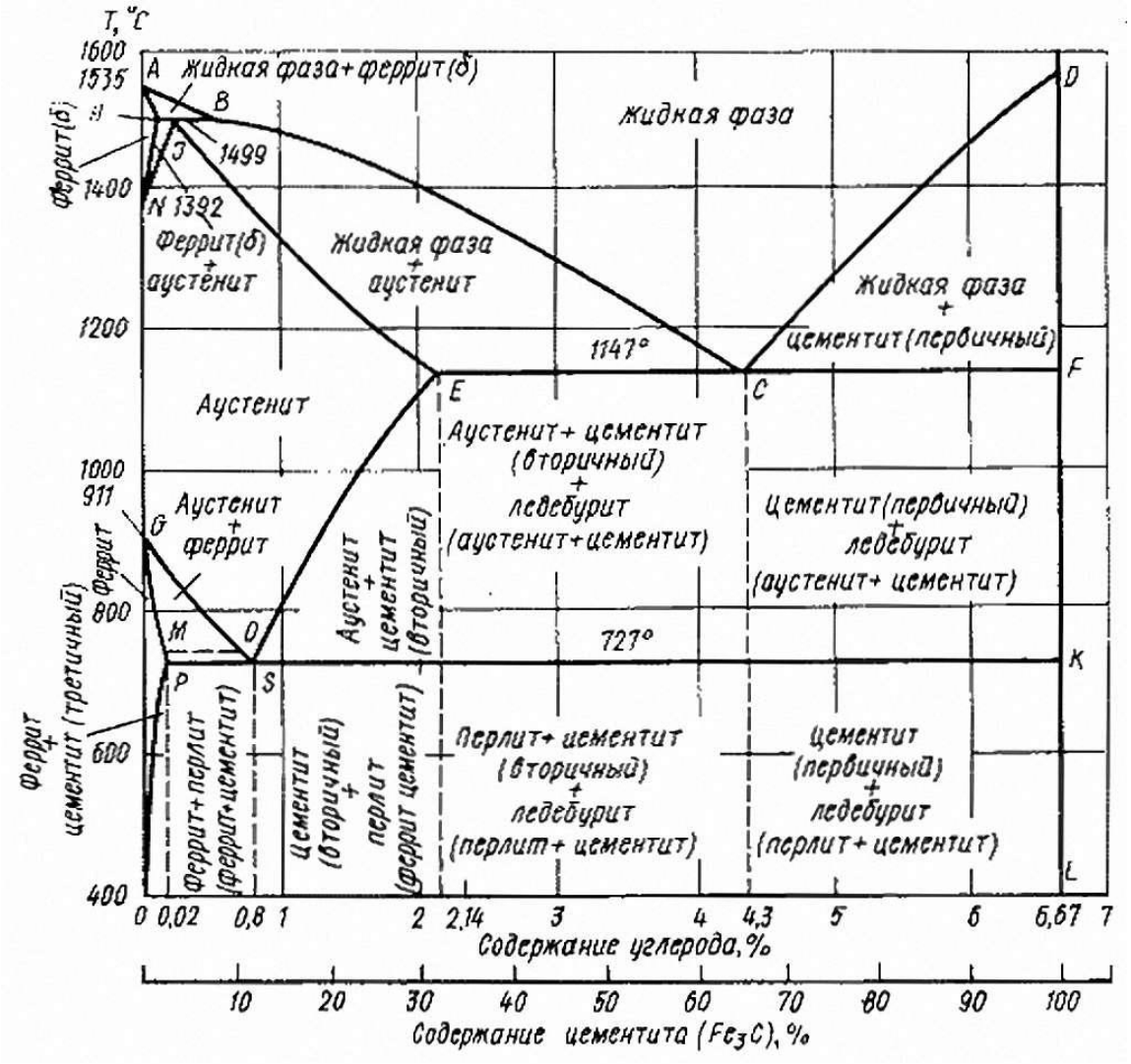



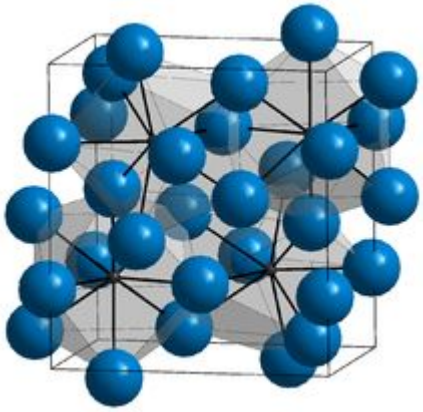
# Металлическая связь

| Соединение | Энергия связи, эВ | Ширина запрещенной зоны, эВ | Модуль упругости, ГПа | Температура плавления, К | Температура кипения, К |
|---|---|---|---|---|---|
| Al | ~2.8 | | 76 | 933.47 | 2743 |
| Cu | ~3 | | 140 | 1357 | 2835 |
| Fe | ~3.4 | | 170 | 1811 | 3134 |
| Mo | ~6 | | 230 | 2896 | 4912 |



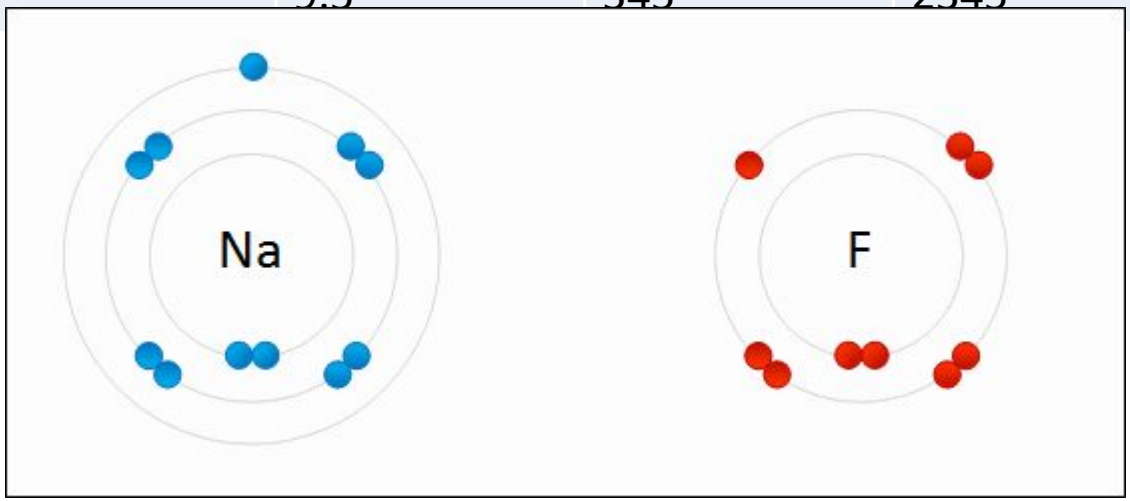
# Температура плавления и кипения



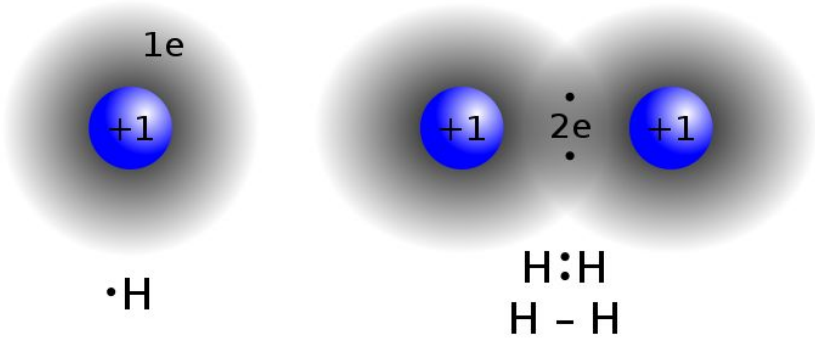
# Ионная связь

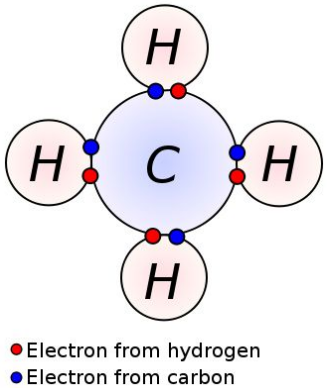
| Соединение | Энергия связи, эВ | Ширина запрещенной зоны, эВ | Модуль упругости, ГПа | Температура плавления, К | Температура кипения, К |
|---|---|---|---|---|---|
| LiCl | 8.8 (2.57 A) | 9.5 | 30 | 878 | 1655 |
| NaCl | 7.9 (2.82 A) | 8.5 | 24 | 1073 | 1738 |
| KCl | 7.4 (3.14 A) | 9.5 | 17 | 1043 | 1693 |
| Al2O3 | | 9.5 | 345 | 2345 | 3250 |



# Ковалентная связь:

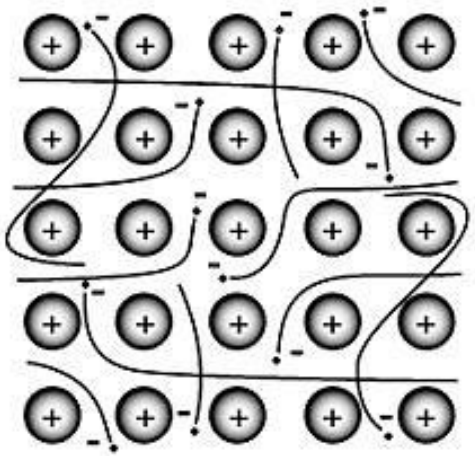
| Соединение | Энергия когезии, эВ | Ширина запрещенной зоны, эВ | Объемный модуль упругости, ГПа | Температура плавления, К | Температура кипения, К |
|---|---|---|---|---|---|
| C | 7 (1.54 A) | 5.5 | 440 | 3700-4000 (при 11 ГПа) | |
| Si | 3.6 (2.35 A) | 1.21 | 97,6 | 1414,85 | 2349,85 |
| Ge | 3.2 (2.45 A) | 0.75 | 75 | 1210 | 3103 |
| SiC | | 2.36-3.03 | | | |
| BN | | 4.5-6.4 | 400 | 2973 | |



# Металлическая связь

| Соединение | Энергия связи, эВ | Ширина запрещенной зоны, эВ | Модуль упругости, ГПа | Температура плавления, К | Температура кипения, К |
|---|---|---|---|---|---|
| Al | ~2.8 | | 76 | 933.47 | 2743 |
| Cu | ~3 | | 140 | 1357 | 2835 |
| Fe | ~3.4 | | 170 | 1811 | 3134 |
| Mo | ~6 | | 230 | 2896 | 4912 |



# Вопросы

- Оценить энергию связи в молекуле водорода по спектру поглощения
- Оценить объемный модуль $CaF_2$

# Список литературы


- Физико-химический основы материаловедения. // Г. Готтштайн (2009).
- Материаловедение. // Адаскин, Седов, Онегина, Климов (2005).
- Введение в физику твердого тела. // Киттель (1978).

# Таблица Менделеева