

Лекция 8

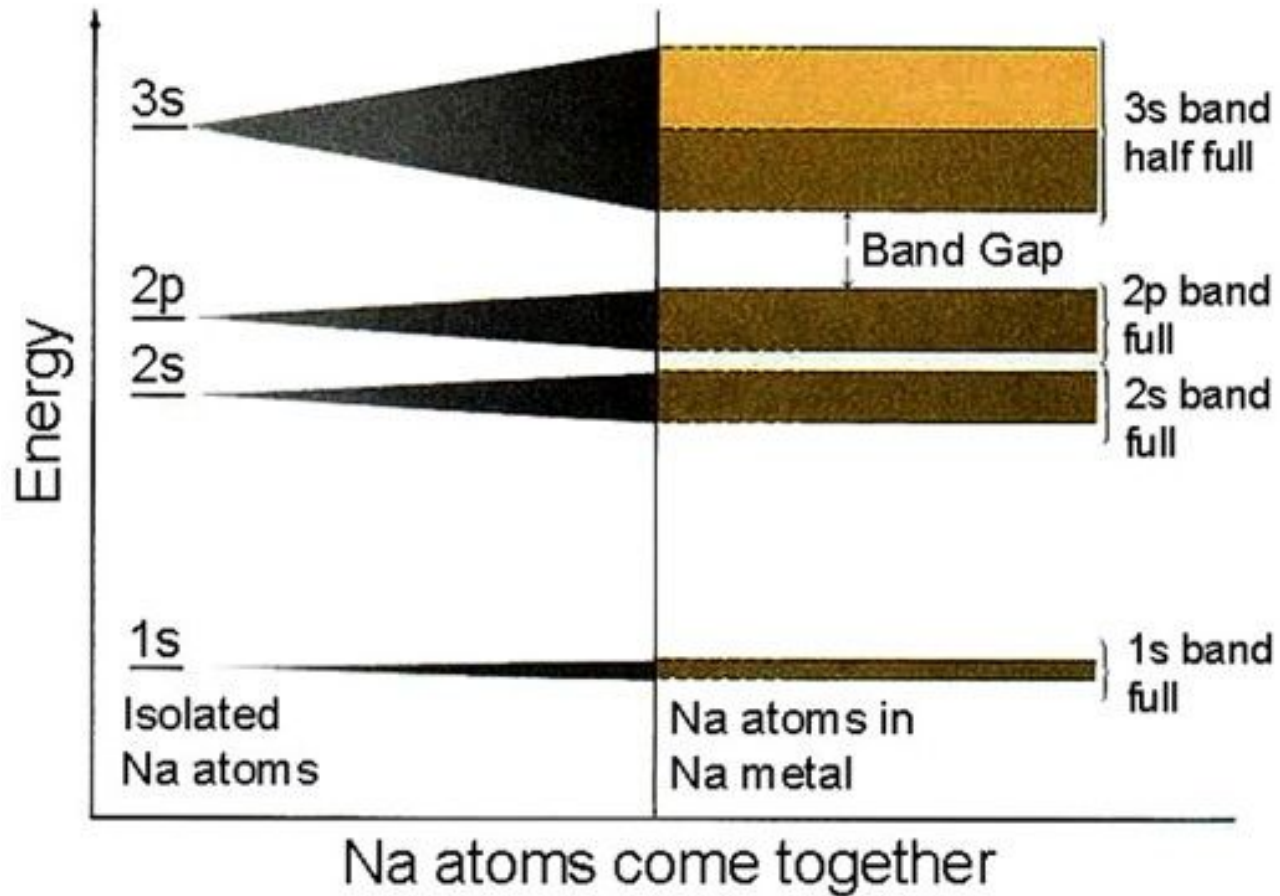
Влияние химической связи на свойства материалов.

Алексей Янилкин

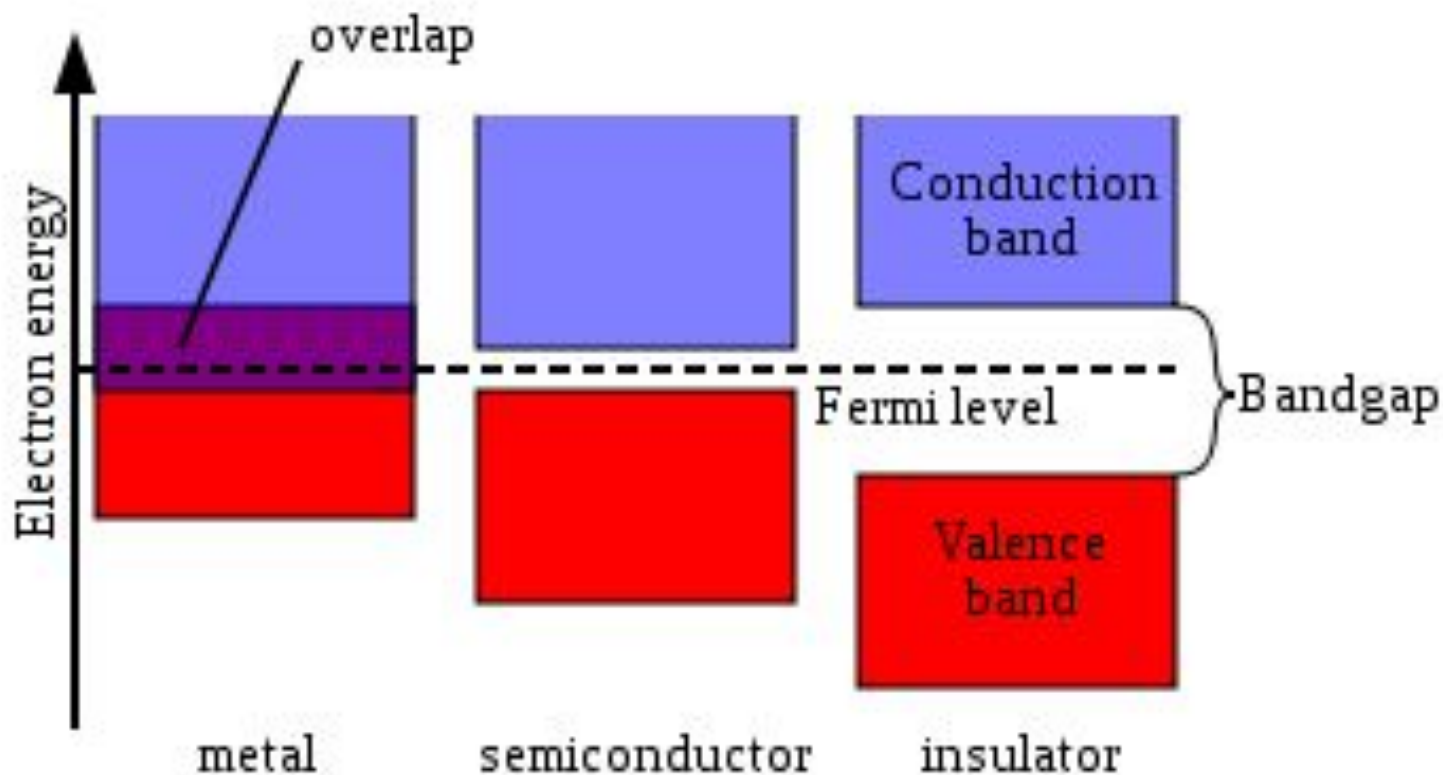
План лекции

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

Электрические свойства: зонная теория

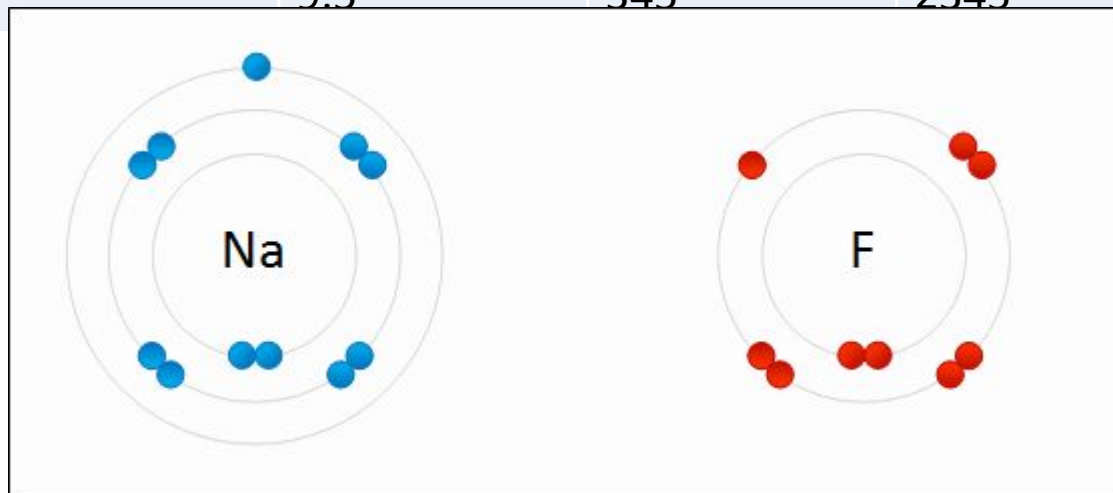


Электрические свойства



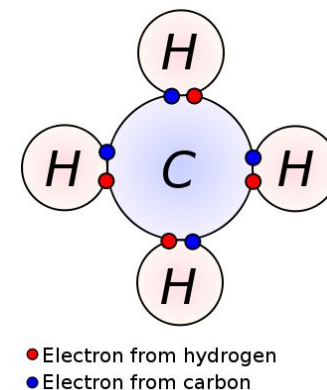
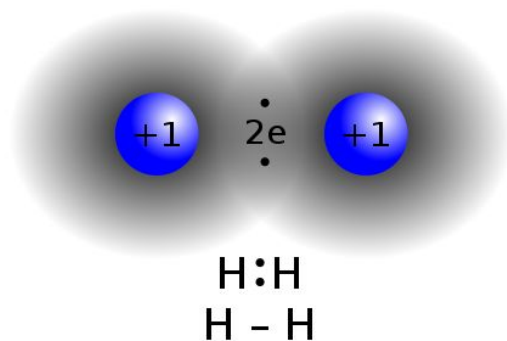
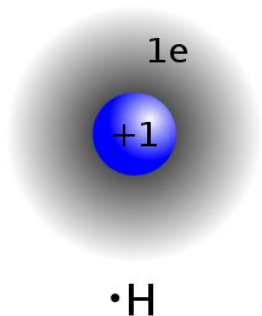
Ионная связь

Соединение	Энергия связи, эВ	Ширина запрещенной зоны, эВ	Модуль упругости, ГПа	Температура плавления, К	Температура кипения, К
LiCl	8.8 (2.57 Å)	9.5	30	878	1655
NaCl	7.9 (2.82 Å)	8.5	24	1073	1738
KCl	7.4 (3.14 Å)	9.5	17	1043	1693
Al ₂ O ₃		9.5	345	2345	3250



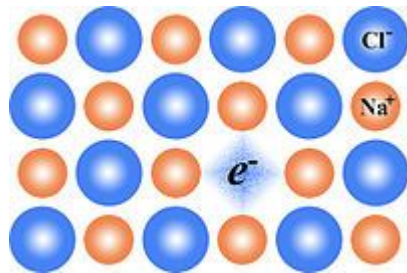
Ковалентная связь:

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	

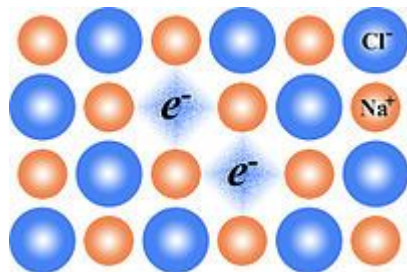
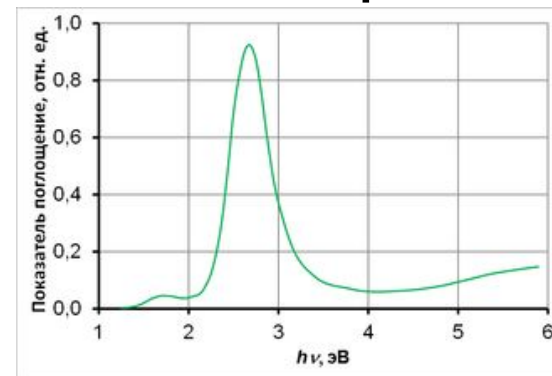


Диэлектрики: центры окраски

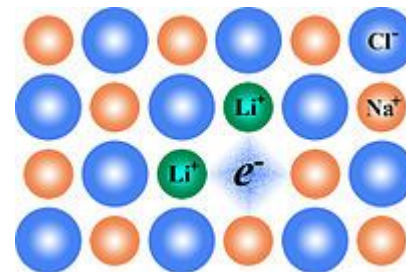
- Центры окраски - точечные дефекты в прозрачных диэлектриках, поглощающие оптическое излучение вне области собственного поглощения диэлектрика.



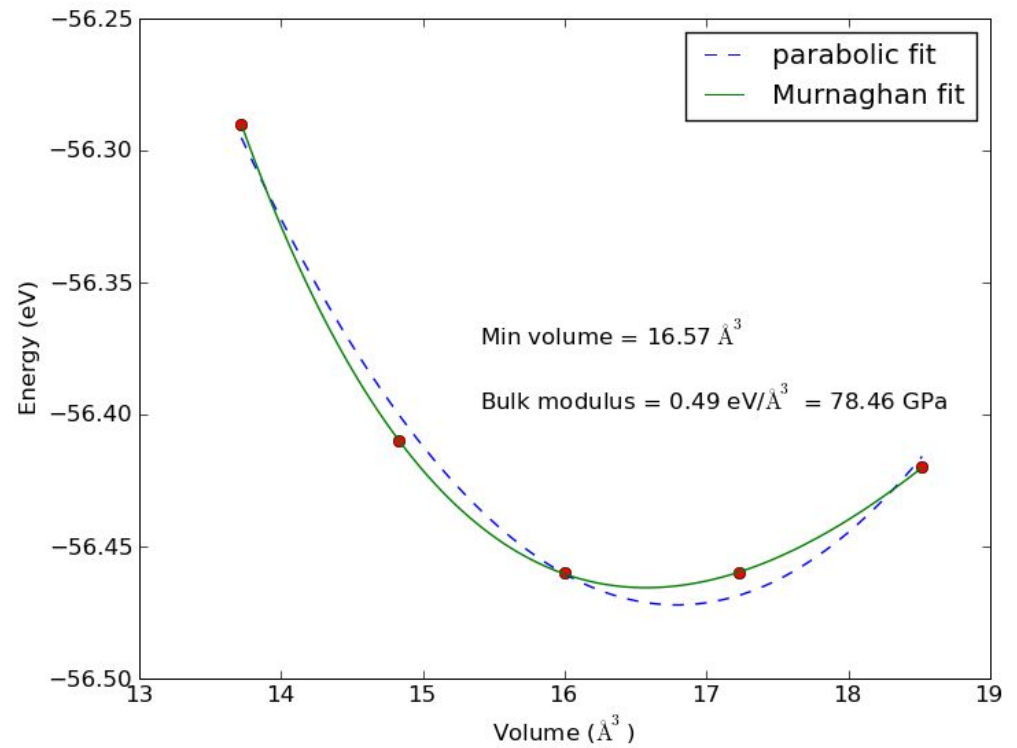
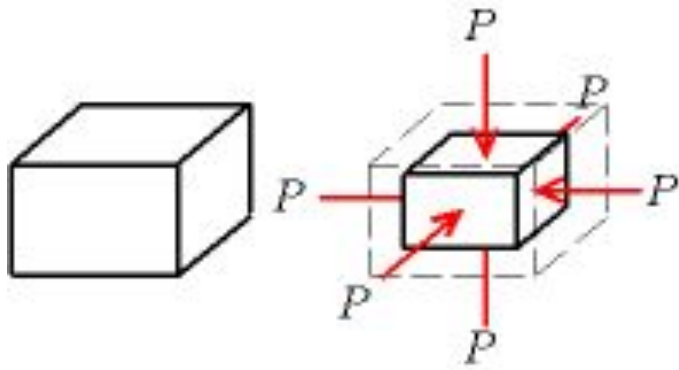
F-
центр



F₂- и F_B -
центры

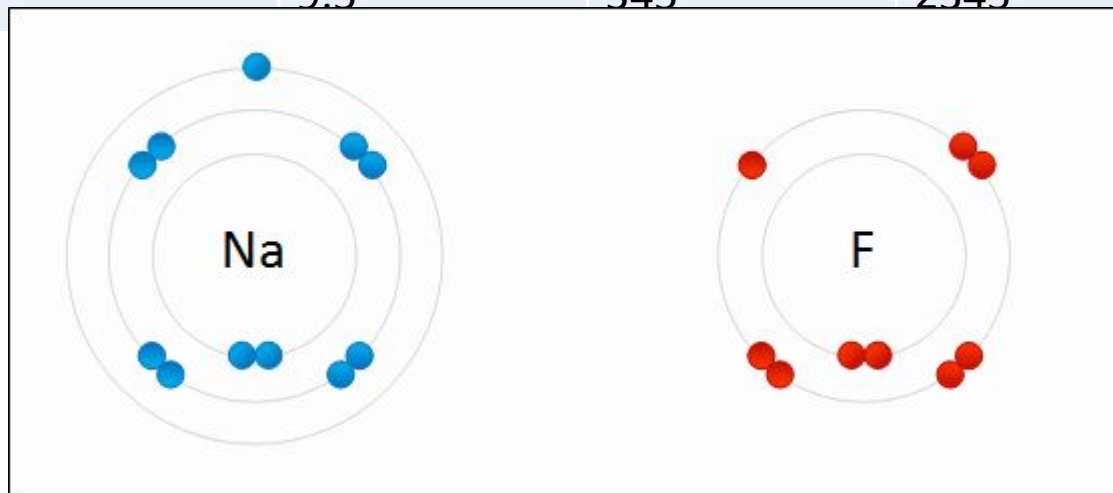


Упругие свойства



Ионная связь

Соединение	Энергия связи, эВ	Ширина запрещенной зоны, эВ	Модуль упругости, ГПа	Температура плавления, К	Температура кипения, К
LiCl	8.8 (2.57 Å)	9.5	30	878	1655
NaCl	7.9 (2.82 Å)	8.5	24	1073	1738
KCl	7.4 (3.14 Å)	9.5	17	1043	1693
Al ₂ O ₃		9.5	345	2345	3250



Ионная связь

- Объемный модуль:

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

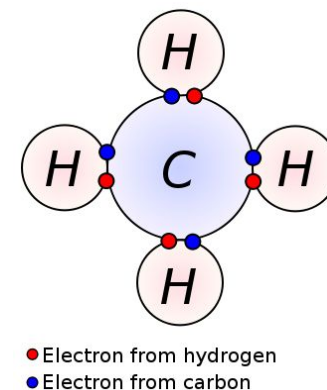
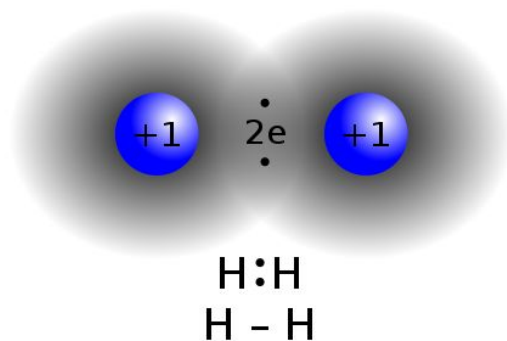
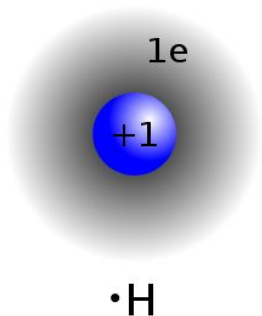
- Из экспериментального значения модуля сдвига определяют отношение $\frac{R_0}{\rho}$. Для KCl:

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

Для многих щелочно-галогидных солей $\rho \approx 0.3 \text{ \AA}$

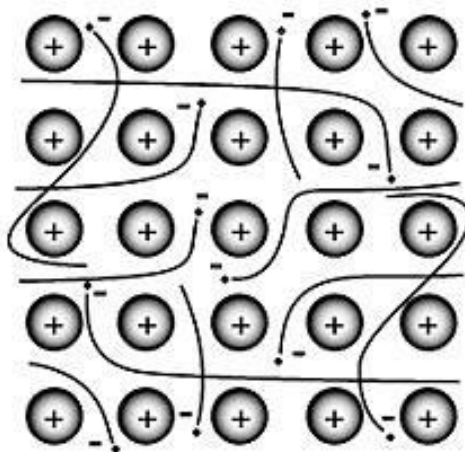
Ковалентная связь:

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

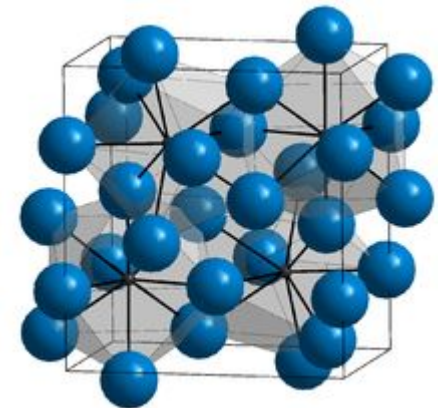
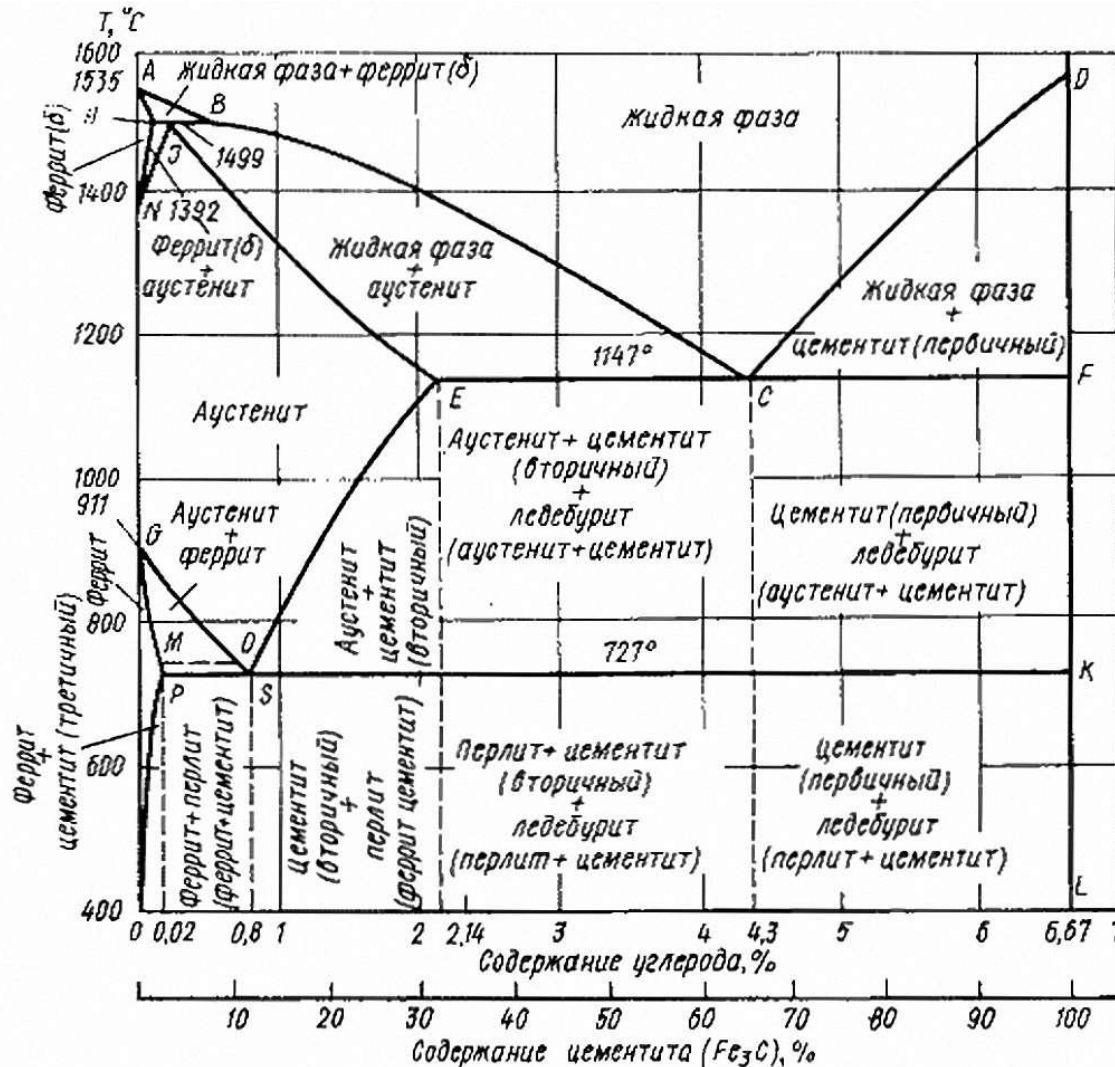


Металлическая связь

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

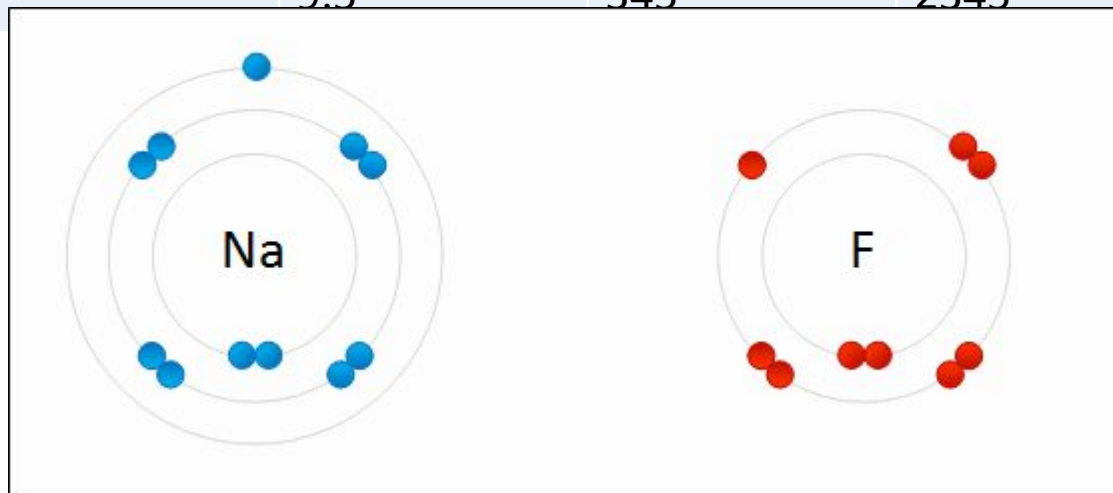


Температура плавления и кипения



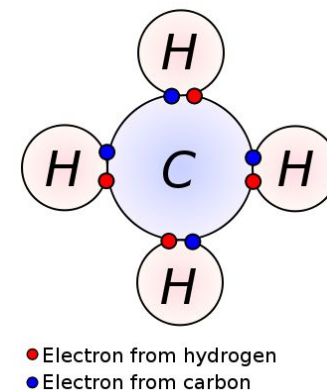
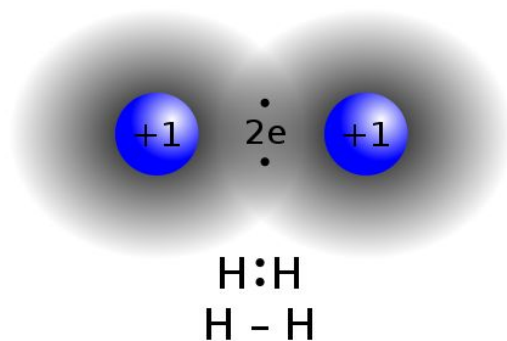
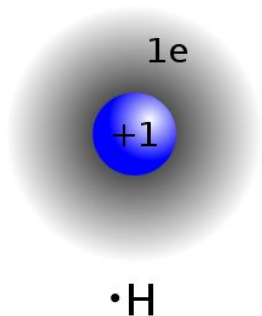
Ионная связь

Соединение	Энергия связи, эВ	Ширина запрещенной зоны, эВ	Модуль упругости, ГПа	Температура плавления, К	Температура кипения, К
LiCl	8.8 (2.57 Å)	9.5	30	878	1655
NaCl	7.9 (2.82 Å)	8.5	24	1073	1738
KCl	7.4 (3.14 Å)	9.5	17	1043	1693
Al ₂ O ₃		9.5	345	2345	3250



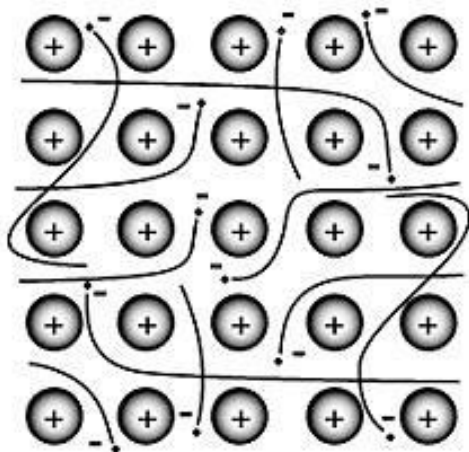
Ковалентная связь:

Соединение	Энергия когезии, эВ	Ширина запрещенной зоны, эВ	Объемный модуль упругости, ГПа	Температура плавления, К	Температура кипения, К
C	7 (1.54 Å)	5.5	440	3700-4000 (при 11 ГПа)	
Si	3.6 (2.35 Å)	1.21	97,6	1414,85	2349,85
Ge	3.2 (2.45 Å)	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

Периодическая система химических элементов Д.И. Менделеева

ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЙ РЯД АКТИВНОСТИ МЕТАЛЛОВ

Eu, Sm, Li, Cs, Rb, K, Ra, Ba, Sr, Ca, Na, Ac, La, Ce, Pr, Nd, Pm, Gd, Tb, Mg, Y, Dy, Am, Ho, Er, Tm, Lu, Sc, Pu, Th, Np, U, Hf, Be, Al, Ti, Zr, Yb, Mn, V, Nb, Pa, Cr, Zn, Ga, Fe, Cd, In, Tl, Co, Ni, Te, Mo, Sn, Pb, H, W, Sb, Bi, Ge, Re, Cu, Tc, Te, Rh, Po, Hg, Ag, Pd, Os, Ir, Pt, Au

РЯД ЭЛЕКТРООТРИЦАТЕЛЬНОСТИ НЕМЕТАЛЛОВ

Si, As, H, P, Se, I, C, S, Br, Cl, N, O, F

I ^A ВОДОРОД 1 H 1,00794 1,00811 0,00010643																	VIII ^A ГЕЛИЙ 2 He 4,002602						
II ^A ЛИТИЙ 3 Li 6,941 6,941 0,034	II ^B БЕРИЛЛИЙ 4 Be 9,0122 9,0122 0,0015023																	VI ^A ФТОР 9 F 18,9984032 18,9984032 0,0014914	VII ^A НЕОН 10 Ne 20,1797 20,1797 0,00091922				
III ^A НАТРИЙ 11 Na 22,98976928 22,98976928 0,0011934	III ^B МАГНИЙ 12 Mg 24,304 24,304 0,001733																	VI ^B АЛЮМИНИЙ 13 Al 26,9815386 26,9815386 0,0019824	VI ^B КРЕМНИЙ 14 Si 28,0855 28,0855 0,0033997	V ^A ФОСФОР 15 P 30,973762 30,973762 0,0037591	IV ^A СЕРА 16 S 32,06 32,06 0,0037546	III ^A ХЛОР 17 Cl 35,453 35,453 0,0054914	II ^A АРГОН 18 Ar 39,948 39,948 0,001794
IV ^A КАЛИЙ 19 K 39,0983 39,0983 0,00669	IV ^A КАЛЬЦИЙ 20 Ca 40,078 40,078 0,00866	III ^B СКАНДИЙ 21 Sc 44,955912 44,955912 0,0076321	IV ^B ТИТАН 22 Ti 47,88 47,88 0,007539	V ^B ВАНАДИЙ 23 V 50,9415 50,9415 0,0090026	VI ^B ХРОМ 24 Cr 51,9961 51,9961 0,0092618	VII ^B МАНГАНЕЦ 25 Mn 54,938044 54,938044 0,0093726	VIII ^B ЖЕЛЕЗО 26 Fe 55,845 55,845 0,0093726	VIII ^B КОБАЛЬТ 27 Co 58,933195 58,933195 0,0094906	VIII ^B НИКЕЛЬ 28 Ni 58,6934 58,6934 0,0094906	I ^B МЕДЬ 29 Cu 63,546 63,546 0,0095428	II ^B ЦИНК 30 Zn 65,38 65,38 0,0095428	III ^B ГАЛИЙ 31 Ga 69,723 69,723 0,0097456	IV ^B ГЕРМАНИЙ 32 Ge 72,630 72,630 0,0097456	V ^B АРСЕН 33 As 74,9216 74,9216 0,0097456	VI ^B СЕЛЕН 34 Se 78,9718 78,9718 0,0097456	VII ^B БРОМ 35 Br 79,904 79,904 0,0097456	VIII ^B КРИПТОН 36 Kr 83,80 83,80 0,0097456						
V ^A РУБИДИЙ 37 Rb 85,4678 85,4678 0,0107302	V ^A СТРОНЦИЙ 38 Sr 87,62 87,62 0,0107302	IV ^B ИТРИЙ 39 Y 88,905848 88,905848 0,0107302	V ^B ЦИРКОНИЙ 40 Zr 91,224 91,224 0,0107302	V ^B НИОБИЙ 41 Nb 92,90638 92,90638 0,0107302	V ^B МОЛИБДЕН 42 Mo 95,94 95,94 0,0107302	V ^B ТЕХНЕЦИЙ 43 Tc 98,90625 98,90625 0,0107302	V ^B РУТЕЦИЙ 44 Ru 101,07 101,07 0,0107302	V ^B РОДИЙ 45 Rh 102,90550 102,90550 0,0107302	V ^B ПАЛЛАДИЙ 46 Pd 106,42 106,42 0,0107302	I ^B СЕРЕБРО 47 Ag 107,8682 107,8682 0,0107302	II ^B КАДМИЙ 48 Cd 112,411 112,411 0,0107302	III ^B ИНДИЙ 49 In 114,818 114,818 0,0107302	IV ^B ОЛОВО 50 Sn 118,710 118,710 0,0107302	V ^B СУРЬМА 51 Sb 121,757 121,757 0,0107302	VI ^B ТЕЛЛУР 52 Te 127,60 127,60 0,0107302	VII ^B ИОД 53 I 126,905 126,905 0,0107302	VIII ^B КСЕНОН 54 Xe 131,29 131,29 0,0107302						
VI ^A ЦЕЗИЙ 55 Cs 132,90545196 132,90545196 0,0107302	VI ^A БАРИЙ 56 Ba 137,327 137,327 0,0107302			V ^B ТАНТАЛ 72 Hf 178,49 178,49 0,0107302	V ^B ТАНТАЛ 73 Ta 180,94788 180,94788 0,0107302	V ^B ВОЛЬФРАМ 74 W 183,84 183,84 0,0107302	V ^B РЕНИЙ 75 Re 186,207 186,207 0,0107302	V ^B РЕНИЙ 76 Os 190,23 190,23 0,0107302	V ^B ИРИДИЙ 77 Ir 192,222 192,222 0,0107302	V ^B ПЛАТИНА 78 Pt 195,084 195,084 0,0107302	V ^B ЗОЛОТО 79 Au 196,966569 196,966569 0,0107302	III ^B ТАЛЛИЙ 81 Tl 204,3833 204,3833 0,0107302	IV ^B СВИНЕЦ 82 Pb 207,2 207,2 0,0107302	V ^B БИСМУТ 83 Bi 208,9804 208,9804 0,0107302	V ^B ПОЛОНИЙ 84 Po 209 209 0,0107302	V ^B АСТАТ 85 At 210 210 0,0107302	V ^B РАДОН 86 Rn 222 222 0,0107302						
VII ^A ФРАНЦИЙ 87 Fr 223 223 0,0107302	VII ^A РАДИЙ 88 Ra 226 226 0,0107302			V ^B РЕЗЕРВАДИЙ 104 Rf 261 261 0,0107302	V ^B ДУБИЙ 105 Db 262 262 0,0107302	V ^B СЕБОРГИЙ 106 Sb 263 263 0,0107302	V ^B БОРИЙ 107 Bh 264 264 0,0107302	V ^B БОРИЙ 108 Hs 265 265 0,0107302	V ^B КАССИЙ 109 Mt 266 266 0,0107302	V ^B МЕНТЕНРИЙ 110 Ds 267 267 0,0107302	V ^B ДАРЬШТАДИЙ 111 Rg 268 268 0,0107302	V ^B УНТУРИЙ 113 Uut 269 269 0,0107302	V ^B УНУВАДИЙ 114 Uuq 270 270 0,0107302	V ^B УНУПЕНТИЙ 115 Uup 271 271 0,0107302	V ^B УНУГЕСИЙ 116 Uuh 272 272 0,0107302	V ^B УНУОСЕТТИЙ 117 Uus 273 273 0,0107302	V ^B УНУОКТАЙ 118 Uuo 274 274 0,0107302						
		V ^B ЛАНТАНЫ 57 La 138,90547 138,90547 0,0107302	V ^B ЦЕРИЙ 58 Ce 140,12 140,12 0,0107302	V ^B ПРАЗЕДИЙ 59 Pr 140,90766 140,90766 0,0107302	V ^B НЕОДИМ 60 Nd 144,242 144,242 0,0107302	V ^B ПРОМЕТИЙ 61 Pm 144,91264 144,91264 0,0107302	V ^B САМАРИЙ 62 Sm 150,36 150,36 0,0107302	V ^B ЕВРОПИЙ 63 Eu 151,964 151,964 0,0107302	V ^B ГАДОЛИНИЙ 64 Gd 157,25 157,25 0,0107302	V ^B ДИСПРОЗИЙ 66 Dy 162,50 162,50 0,0107302	V ^B ГОЛЬМИЙ 67 Ho 164,93032 164,93032 0,0107302	V ^B ЭРБИЙ 68 Er 167,259 167,259 0,0107302	V ^B ТУЛИЙ 69 Tm 168,93032 168,93032 0,0107302	V ^B ИТТЕРБИЙ 70 Yb 173,05446 173,05446 0,0107302	V ^B Лютеций 71 Lu 174,967 174,967 0,0107302								
		V ^B АКТИИДЫ 89 Ac 227,03373 227,03373 0,0107302	V ^B ТОРИЙ 90 Th 232,0377 232,0377 0,0107302	V ^B ПРОСТАКТИИДЫ 91 Pa 231,036889 231,036889 0,0107302	V ^B УРАН 92 U 238,02891 238,02891 0,0107302	V ^B УРАН 92 U 238,02891 238,02891 0,0107302	V ^B НЕПТУНИЙ 93 Np 237,048173 237,048173 0,0107302	V ^B ПУТОРИЙ 94 Pu 244,06422 244,06422 0,0107302	V ^B АМЕРИЦИЙ 95 Am 243,061381 243,061381 0,0107302	V ^B КЮРИЙ 96 Cm 247,070353 247,070353 0,0107302	V ^B БЕРКЕЛИЙ 97 Bk 247,070353 247,070353 0,0107302	V ^B КАЛИФОРНИЙ 98 Cf 251,083288 251,083288 0,0107302	V ^B ФЕРМИЙ 100 Fm 257,10371 257,10371 0,0107302	V ^B МЕНДЕЛЕВИЙ 101 Md 258,10371 258,10371 0,0107302	V ^B НОБЕЛИЙ 102 No 259,10371 259,10371 0,0107302	V ^B ЛОРЕНСЦИЙ 103 Lr 260,10371 260,10371 0,0107302							

Одобрено редакцией www.bogor.by.ru