

Лекция 8

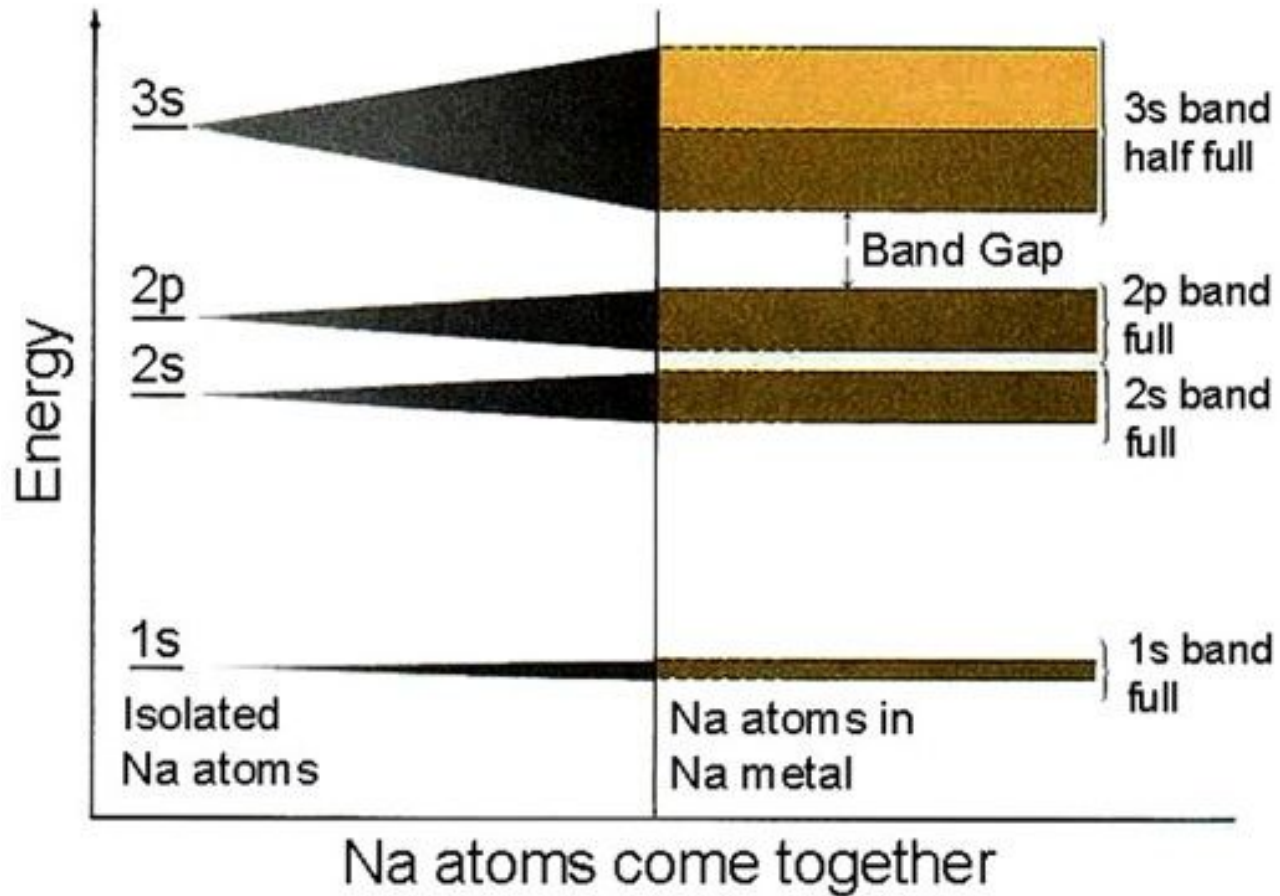
Влияние химической связи на свойства материалов.

Алексей Янилкин

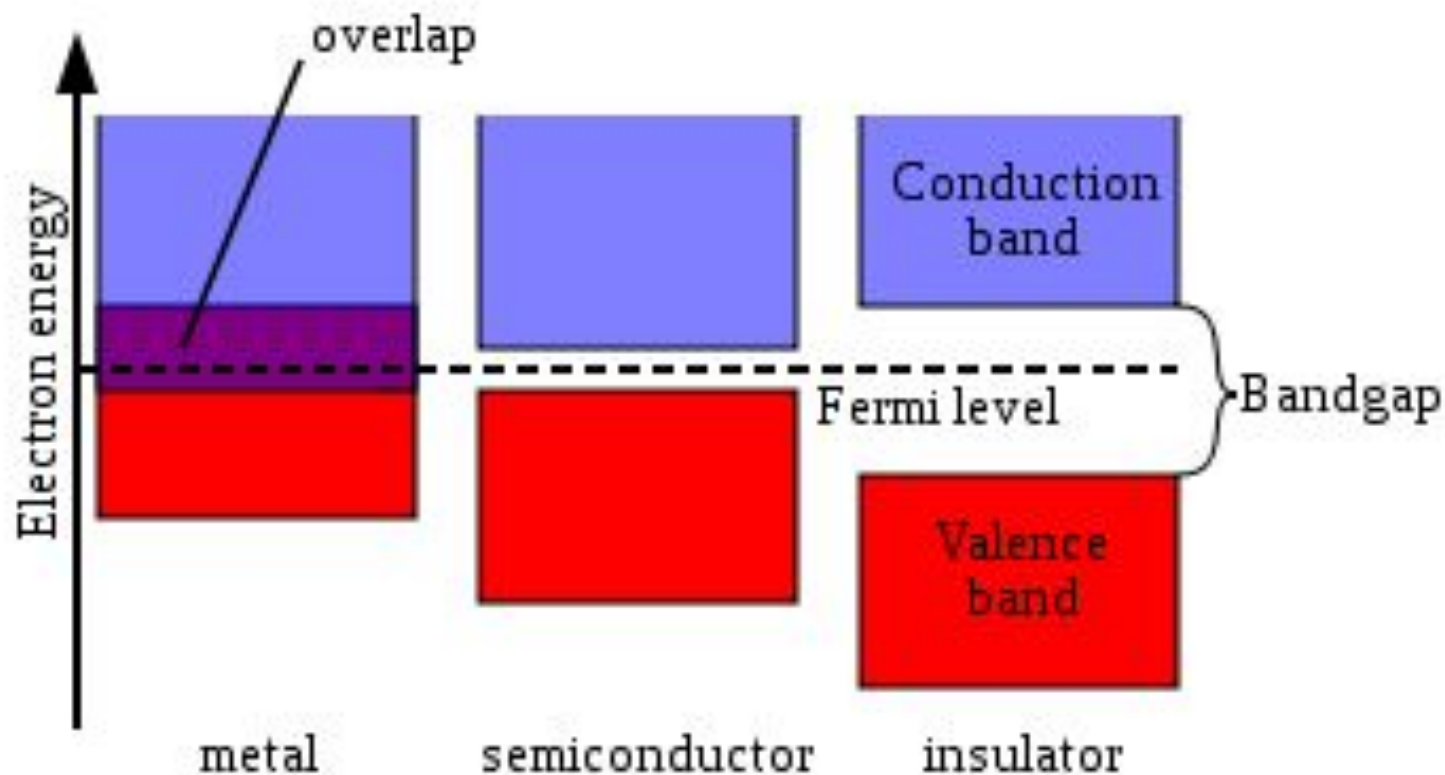
План лекции

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

Электрические свойства: зонная теория

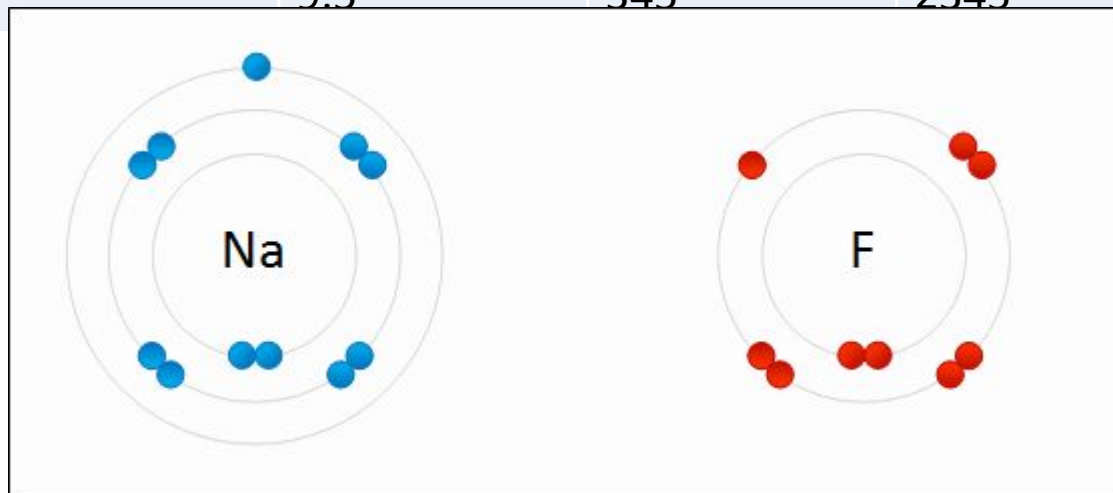


Электрические свойства



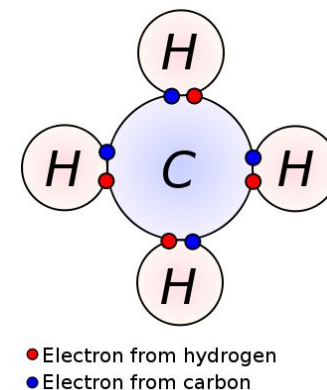
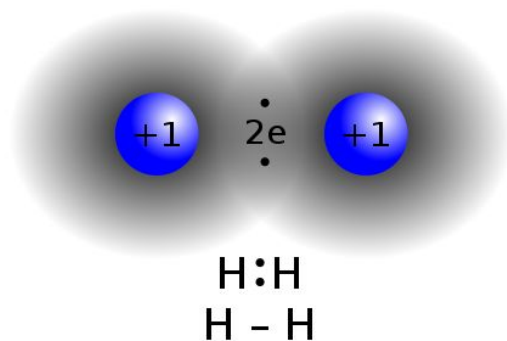
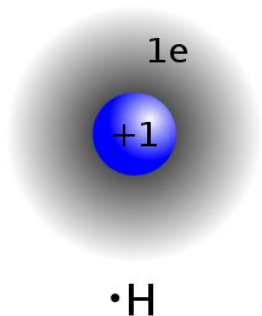
Ионная связь

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



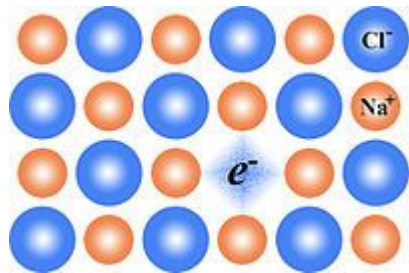
Ковалентная связь:

Соединение	Энергия когезии, эВ	Ширина запрещенной зоны, эВ	Объемный модуль упругости, ГПа	Температура плавления, К	Температура кипения, К
C	7 (1.54 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	

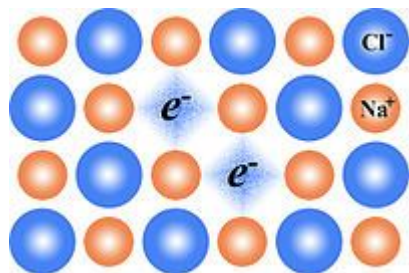
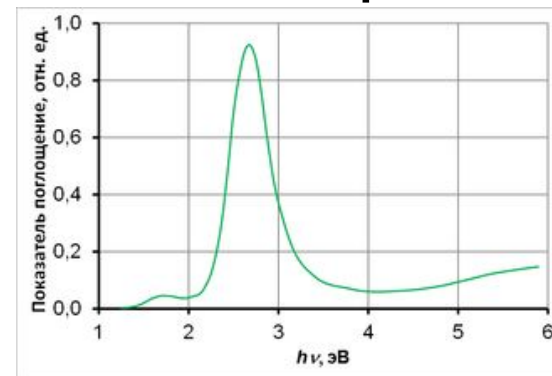


Диэлектрики: центры окраски

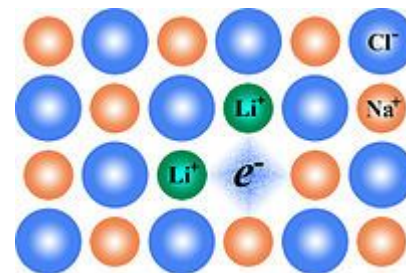
- Центры окраски - точечные дефекты в прозрачных диэлектриках, поглощающие оптическое излучение вне области собственного поглощения диэлектрика.



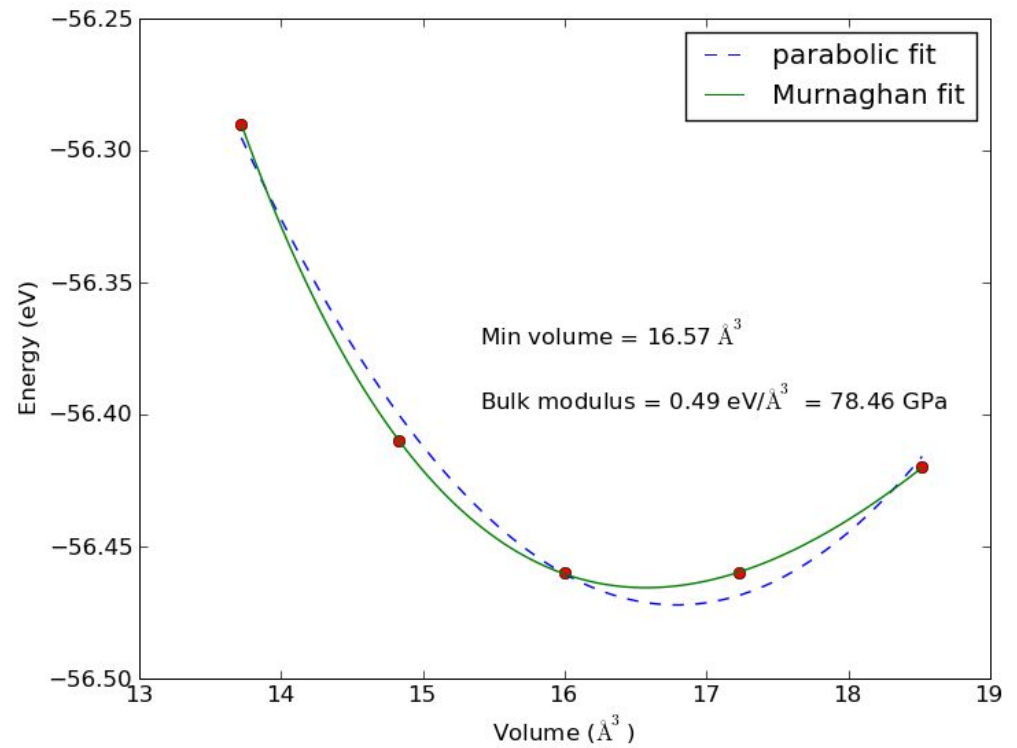
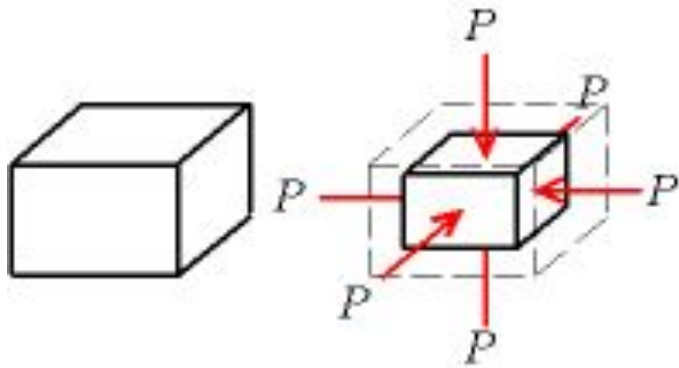
F-
центр



F₂- и F_B -
центры

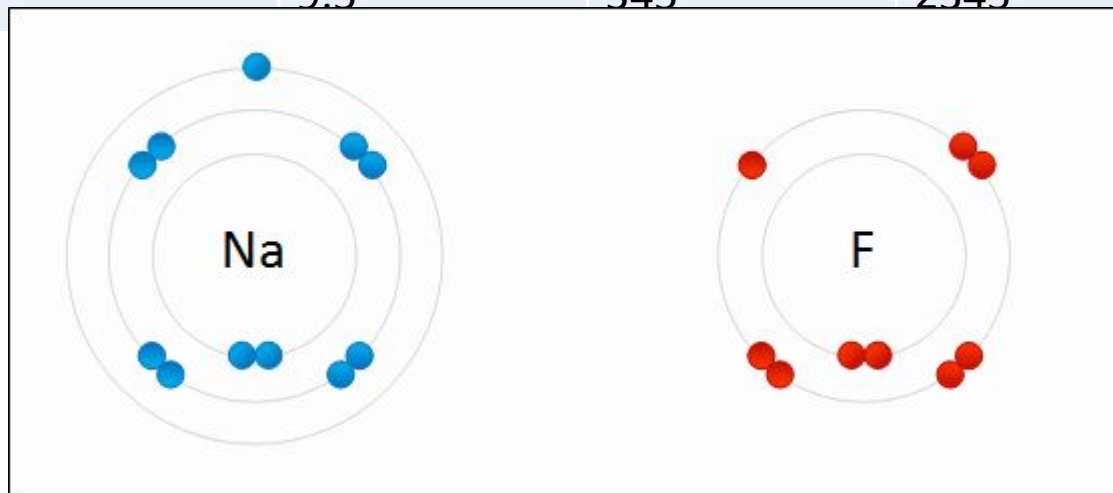


Упругие свойства



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:

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

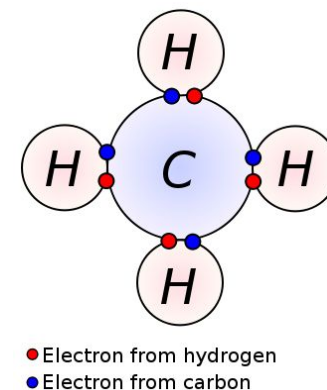
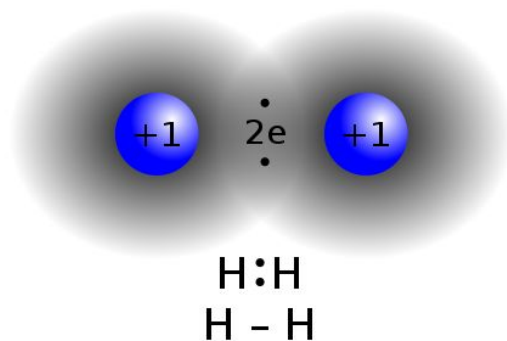
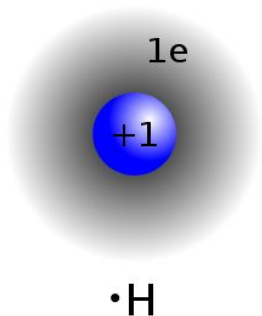
- Из экспериментального значения модуля сдвига определяют отношение $\frac{R_0}{\rho}$. Для KCl:

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

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

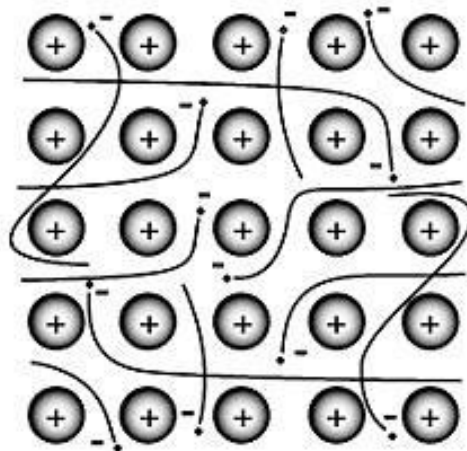
Ковалентная связь:

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	

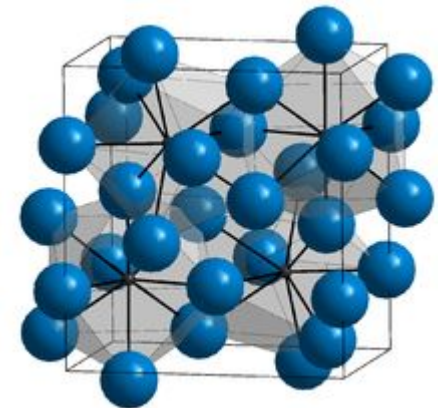
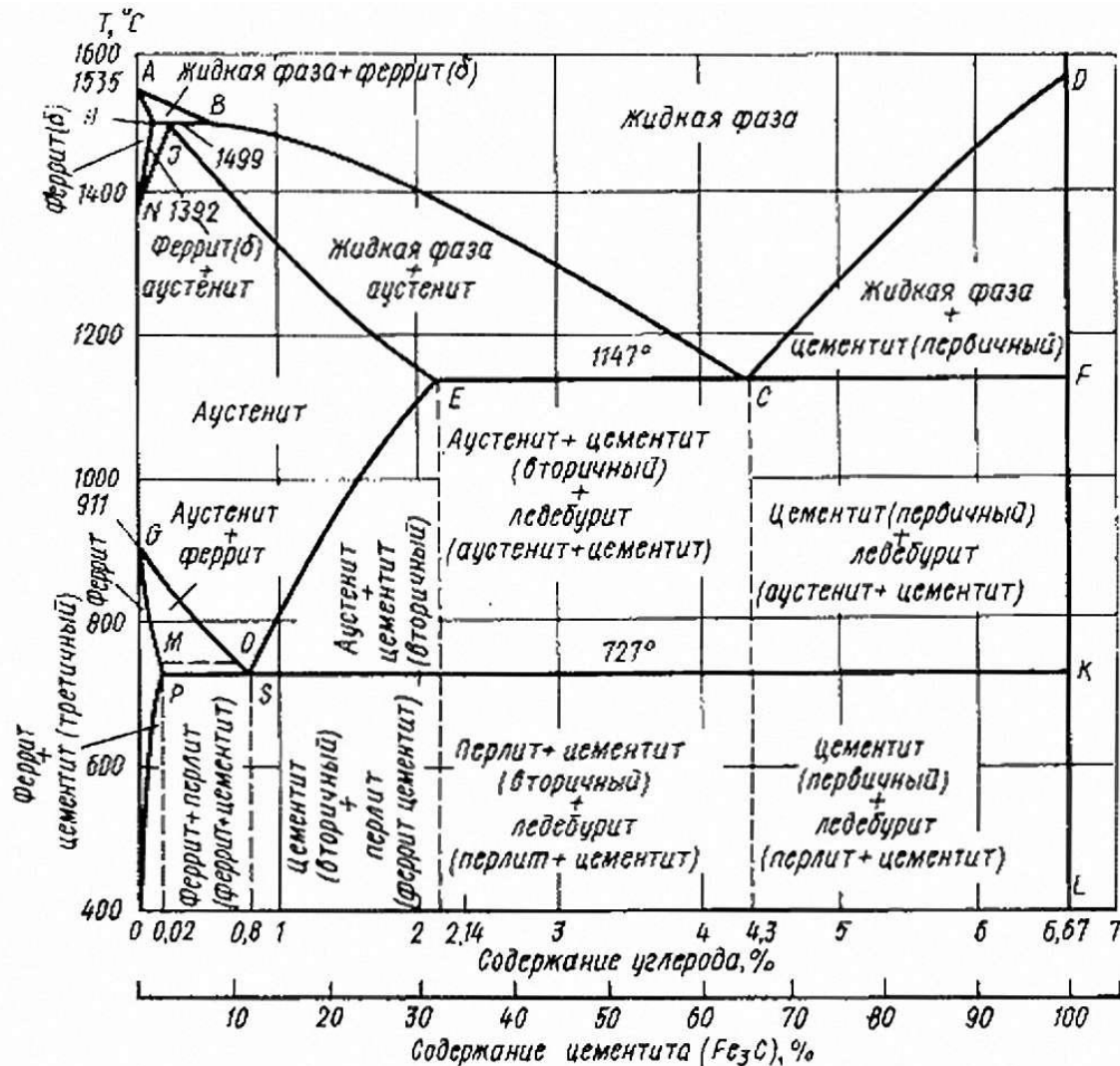


Металлическая связь

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

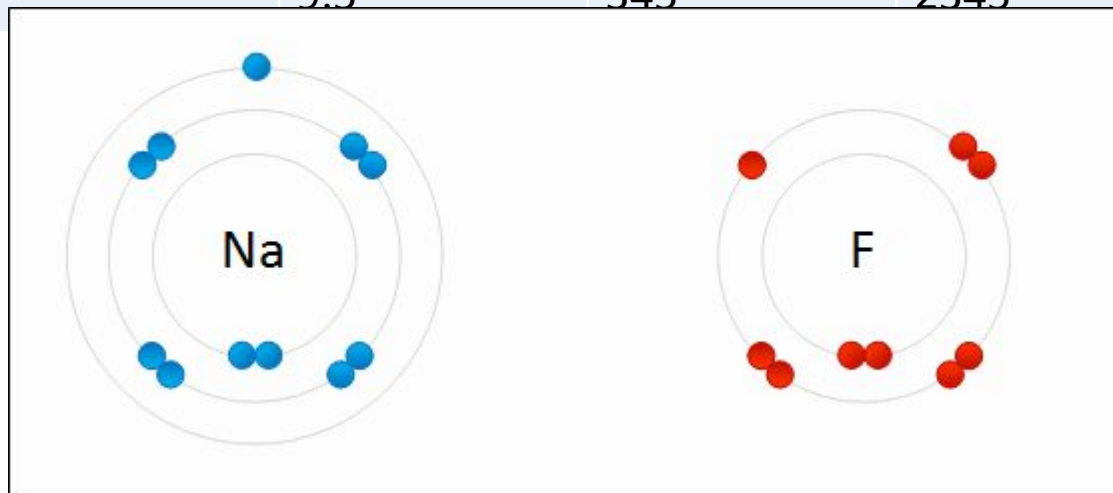


Температура плавления и кипения



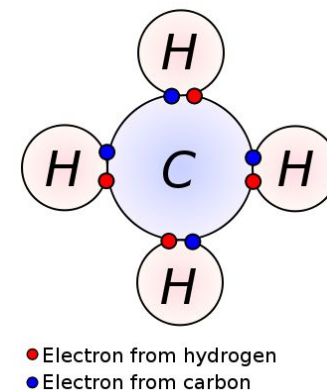
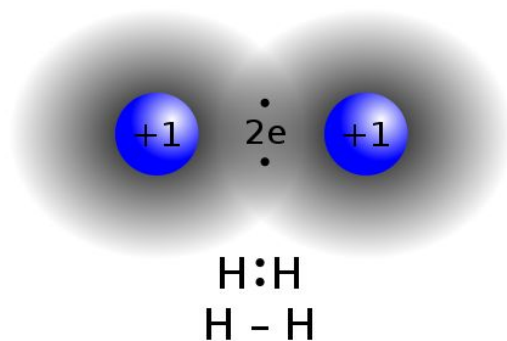
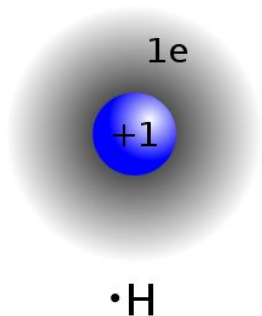
Ионная связь

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



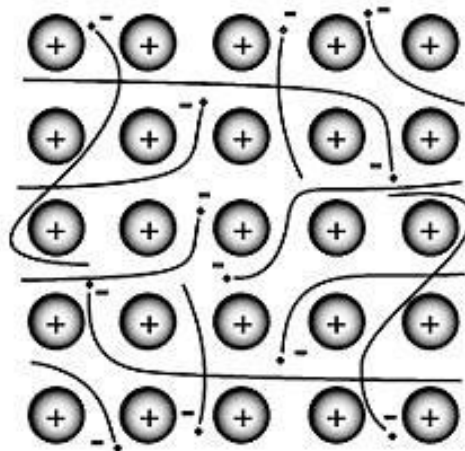
Ковалентная связь:

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).

