

# Лекция 8

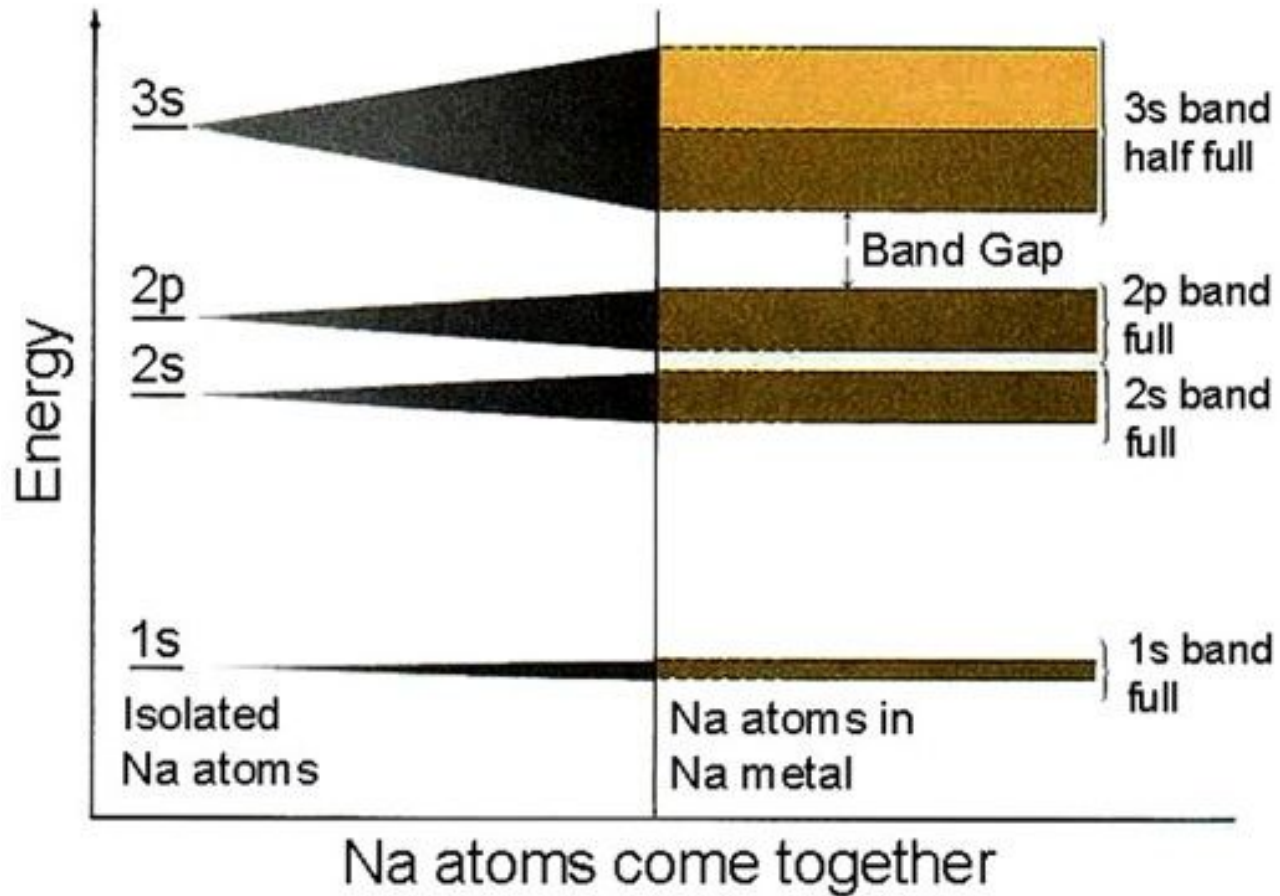
Влияние химической связи на свойства материалов.

Алексей Янилкин

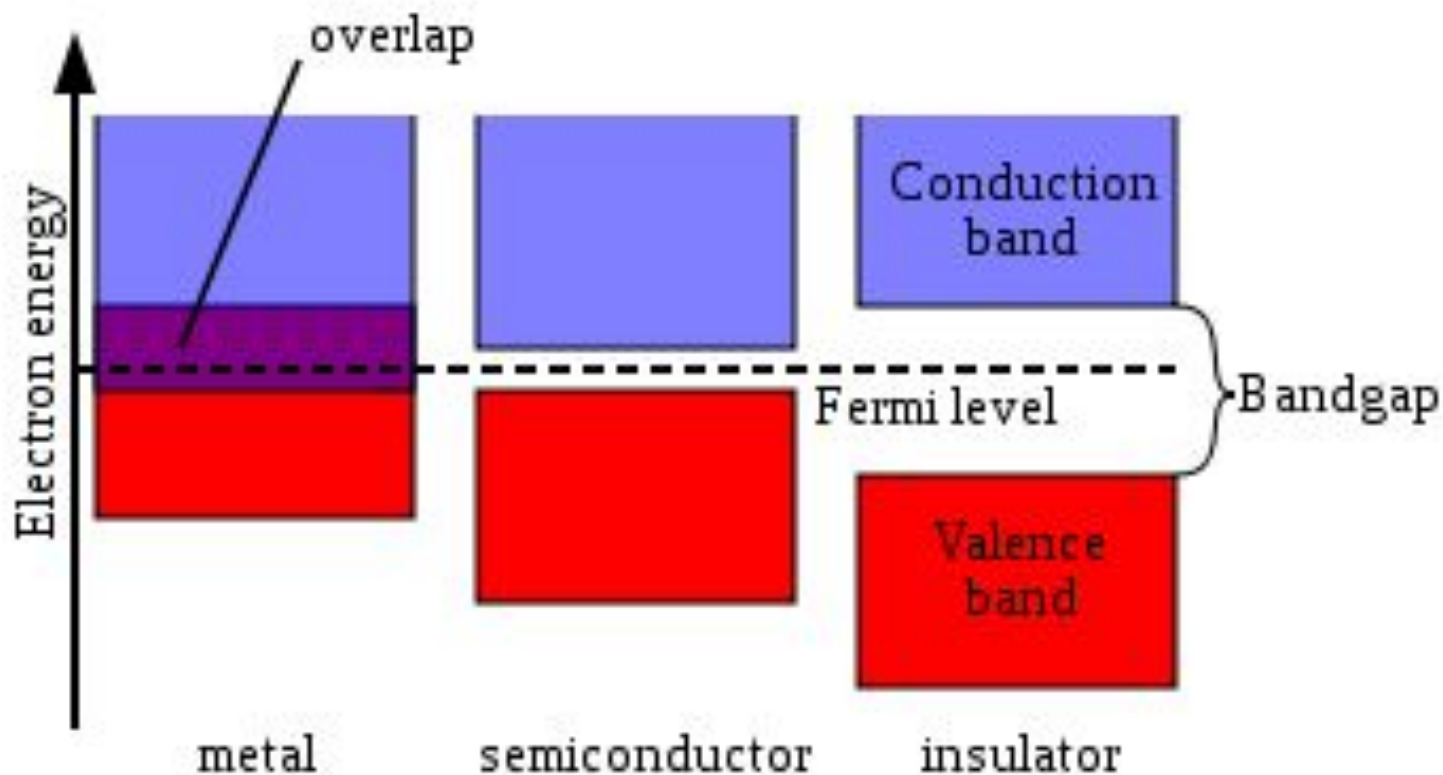
# План лекции

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

# Электрические свойства: зонная теория

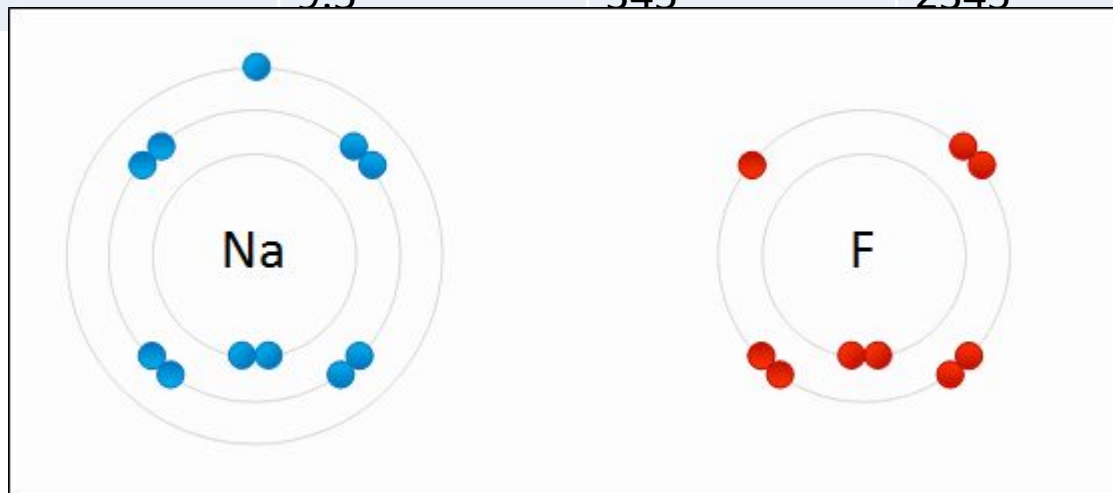


# Электрические свойства



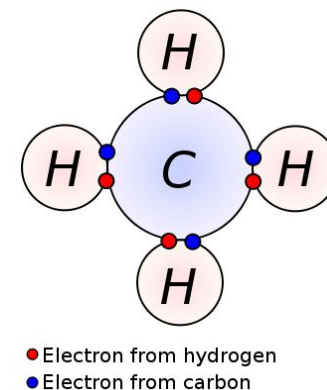
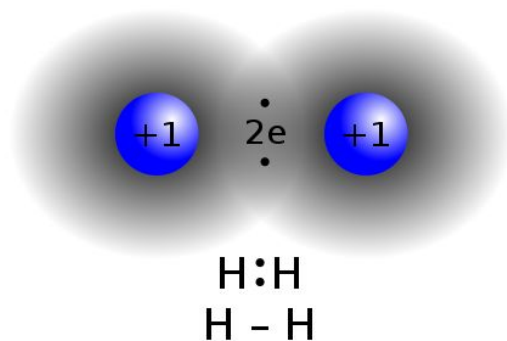
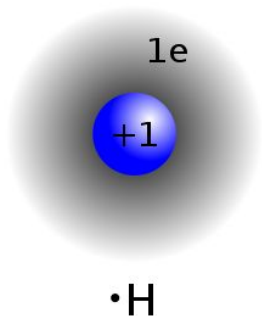
# Ионная связь

| 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 <sub>2</sub> O <sub>3</sub> |                   | 9.5                         | 345                   | 2345                     | 3250                   |



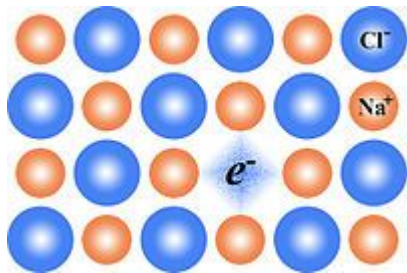
# Ковалентная связь:

| 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<br>(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                      |                        |

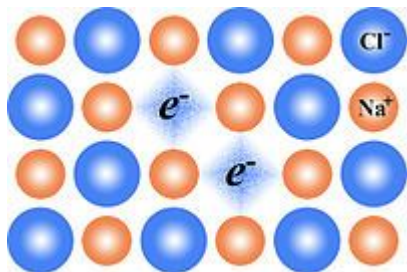
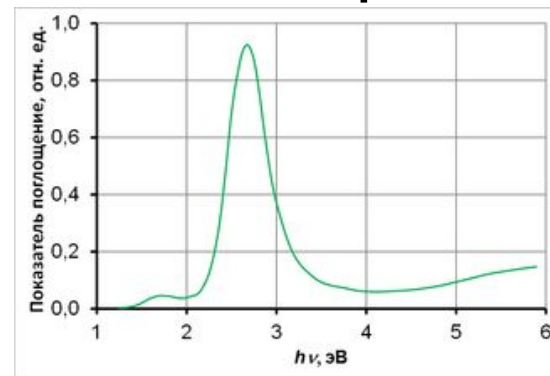


# Диэлектрики: центры окраски

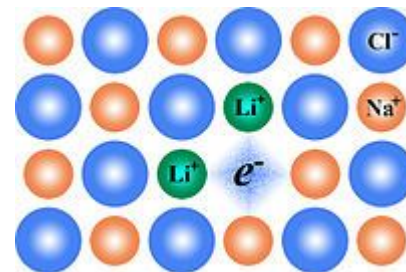
- Центры окраски - точечные дефекты в прозрачных диэлектриках, поглощающие оптическое излучение вне области собственного поглощения диэлектрика.



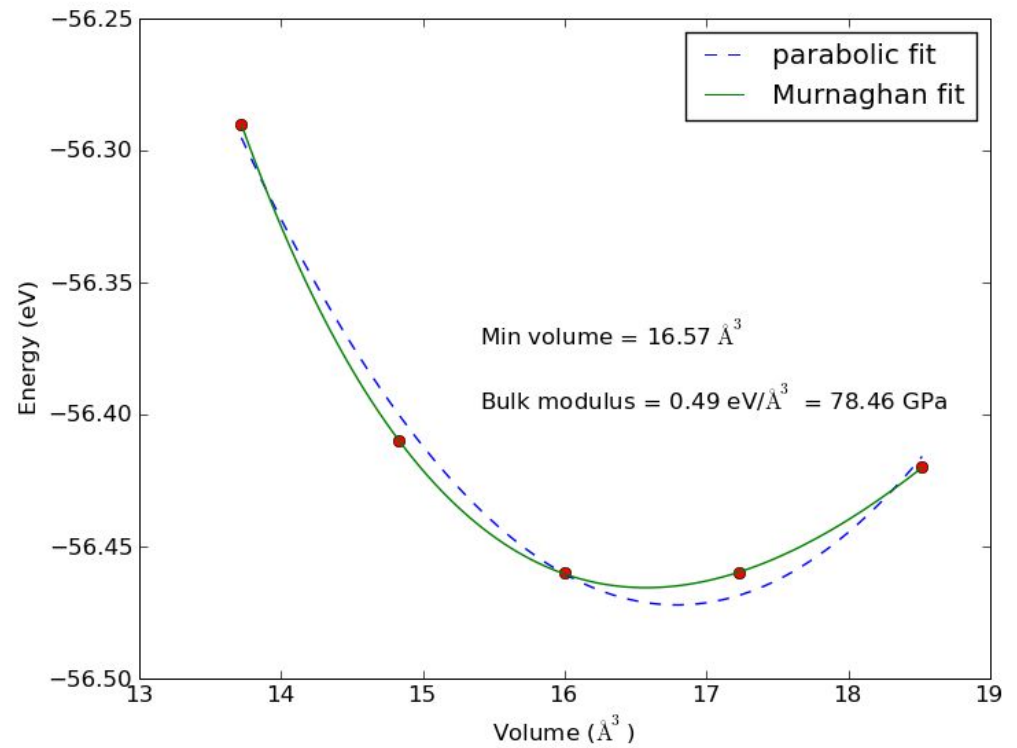
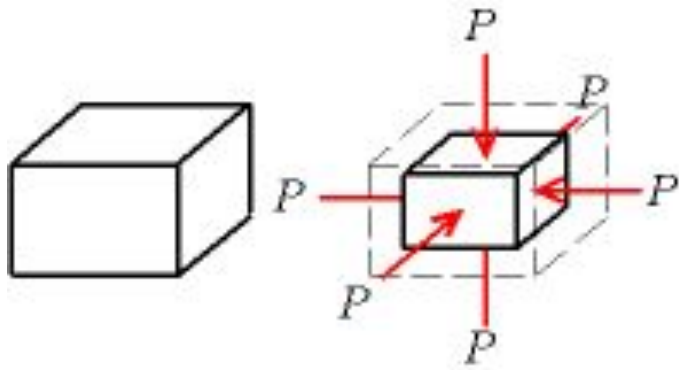
F-  
центр



F<sub>2</sub>- и F<sub>B</sub> -  
центры



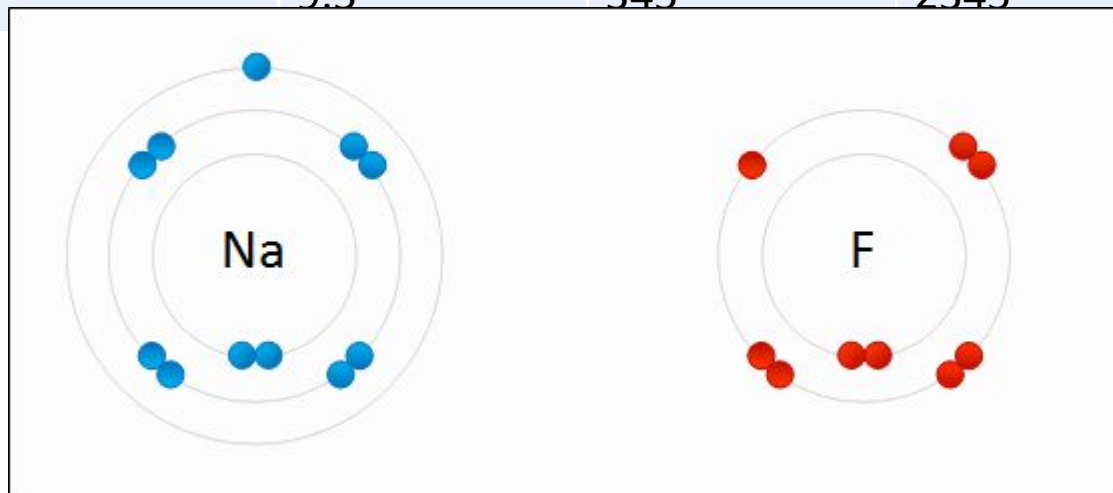
# Упругие свойства





# 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 <sub>2</sub> O <sub>3</sub> |                   | 9.5                         | 345                   | 2345                     | 3250                   |



# Ионная связь

- Объемный модуль:

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

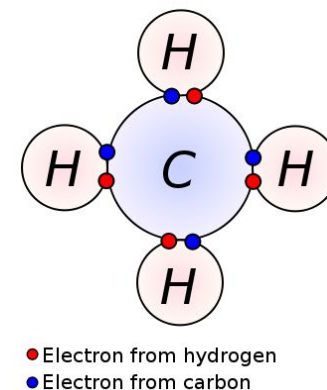
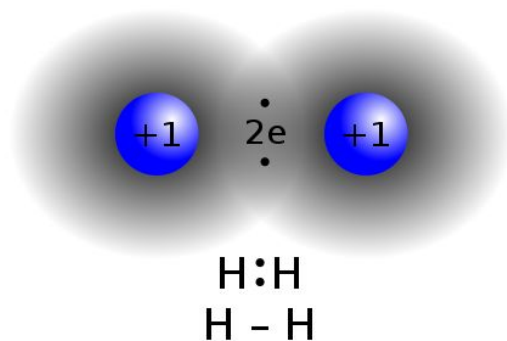
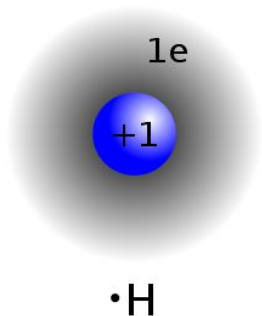
- Из экспериментального значения модуля сдвига определяют отношение  $\frac{R_0}{\rho}$ . Для KCl:

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

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

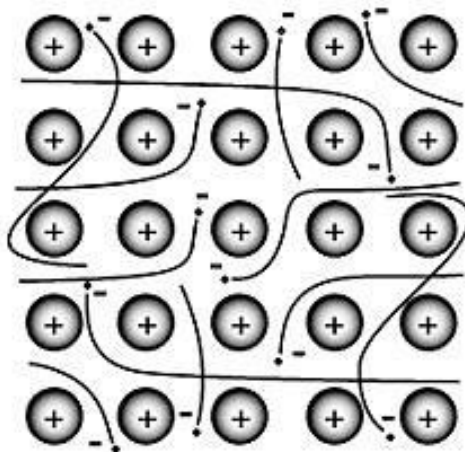
# Ковалентная связь:

| 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<br>(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                      |                        |

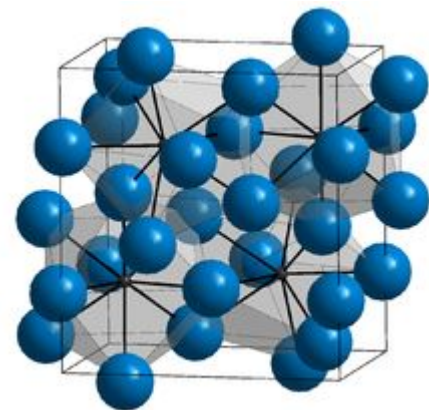
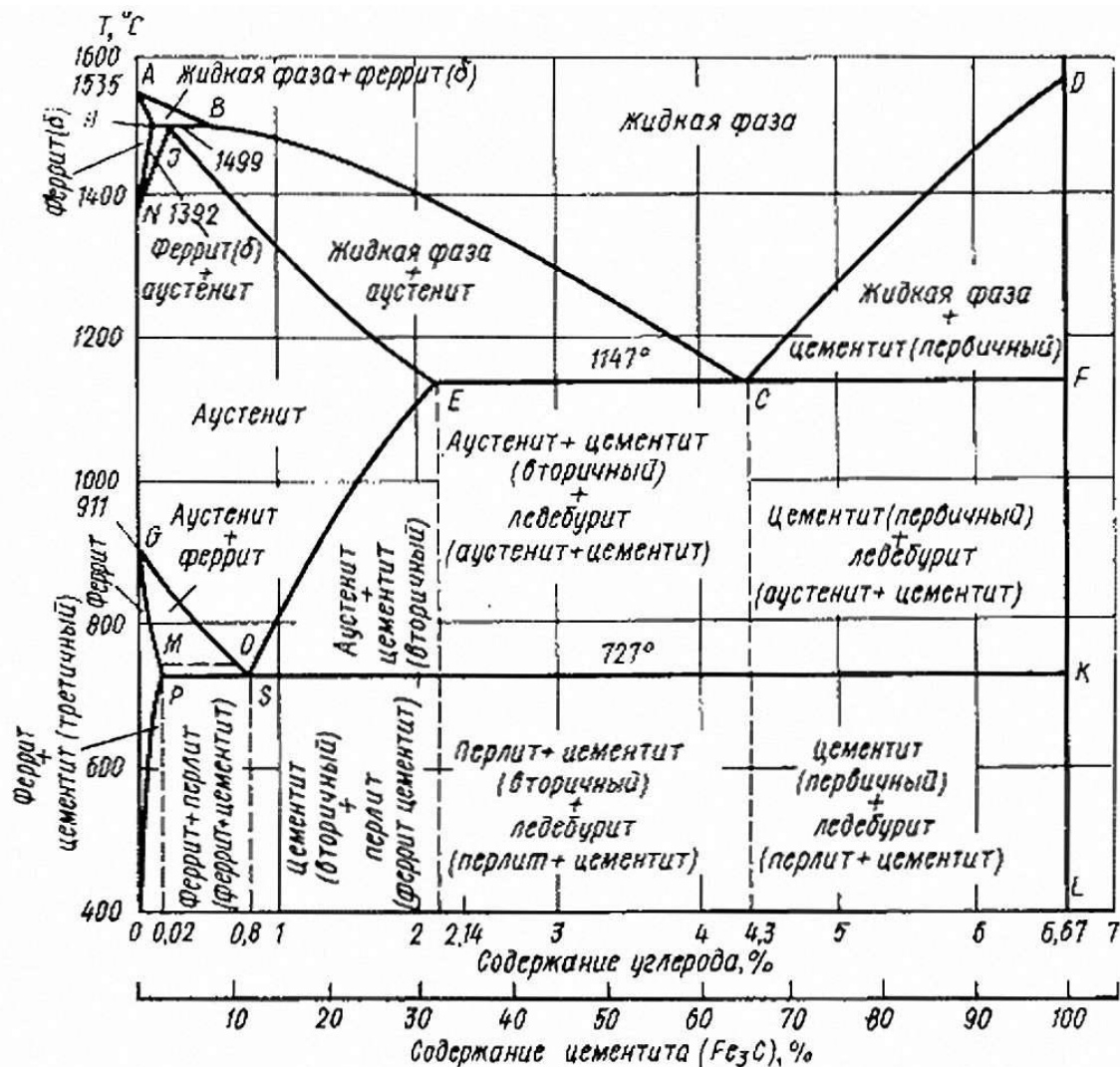


# Металлическая связь

| 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                   |

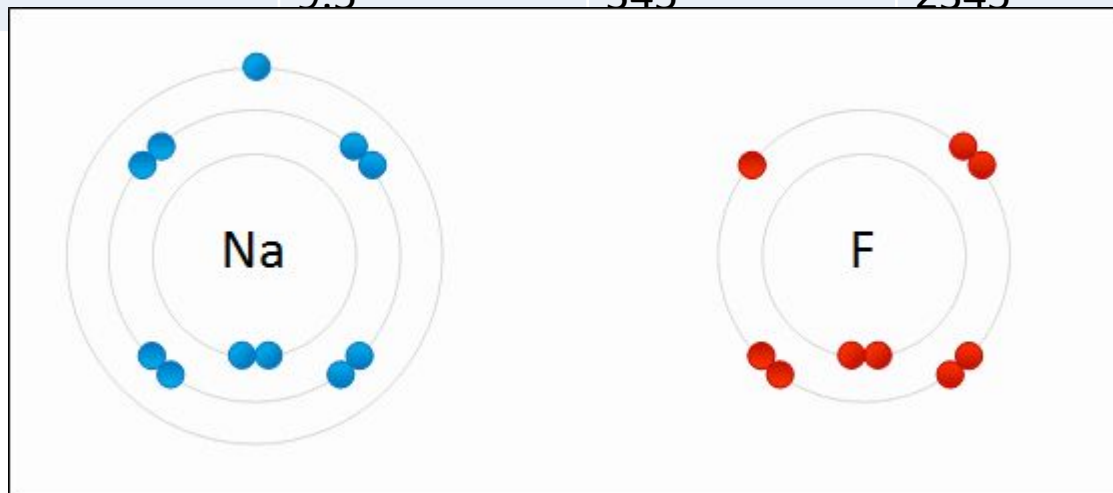


# Температура плавления и кипения



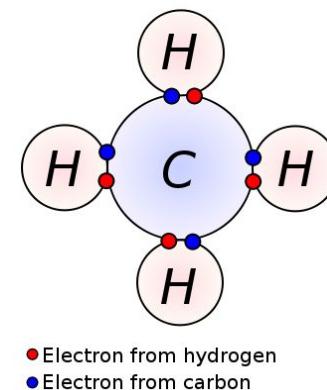
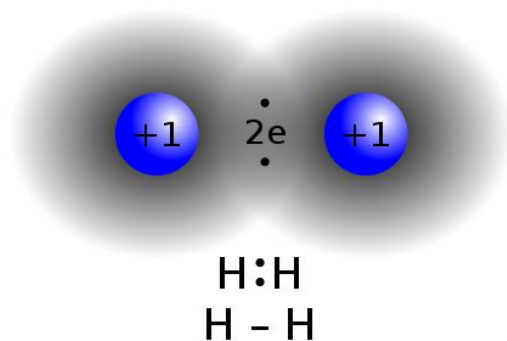
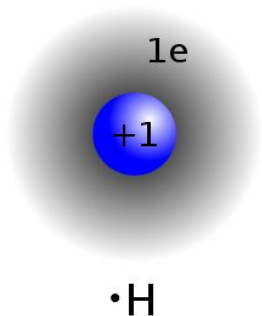
# Ионная связь

| 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 <sub>2</sub> O <sub>3</sub> |                   | 9.5                         | 345                   | 2345                     | 3250                   |



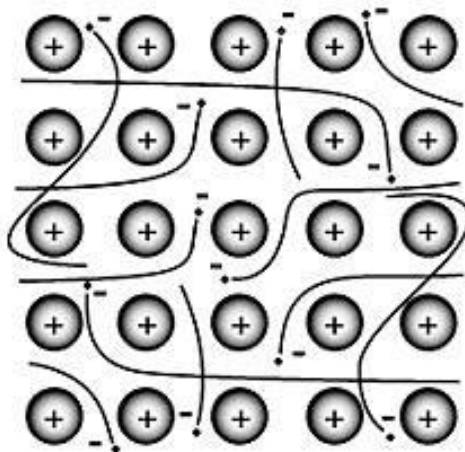
# Ковалентная связь:

| 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<br>(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  $\text{CaF}_2$

# 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 <sup>A</sup><br>водород<br>1<br>H    |   |   |   |   |   |   |   |   |   |   |   |   |  |  |  |   | VIII <sup>A</sup><br>гелий<br>2<br>He        |   |  |                                     |                                       |                                      |  |
| II <sup>A</sup><br>литий<br>3<br>Li    | II <sup>B</sup><br>бериллий<br>4<br>Be  |   |   |   |   |   |   |   |   |   |   |   |  |  |  |   |  | III <sup>A</sup><br>бор<br>5<br>B             | IV <sup>A</sup><br>углерод<br>6<br>C   | V <sup>A</sup><br>азот<br>7<br>N    | VI <sup>A</sup><br>кислород<br>8<br>O | VII <sup>A</sup><br>фтор<br>9<br>F   | VIII <sup>A</sup><br>неон<br>10<br>Ne  |
| III <sup>A</sup><br>натрий<br>11<br>Na | II <sup>A</sup><br>магний<br>12<br>Mg   |   |   |   |   |   |   |   |   |   |   |   |  |  |  |   |  | III <sup>B</sup><br>алюминий<br>13<br>Al      | IV <sup>B</sup><br>кремний<br>14<br>Si | V <sup>B</sup><br>фосфор<br>15<br>P | VI <sup>B</sup><br>сера<br>16<br>S    | VII <sup>B</sup><br>хлор<br>17<br>Cl | VIII <sup>B</sup><br>аргон<br>18<br>Ar |
| IV <sup>A</sup><br>калий<br>19<br>K    | II <sup>A</sup><br>кальций<br>20<br>Ca  | III <sup>B</sup><br>скандий<br>21<br>Sc | IV <sup>B</sup><br>титан<br>22<br>Ti    | V <sup>B</sup><br>ванадий<br>23<br>V        | VI <sup>B</sup><br>хром<br>24<br>Cr     | VII <sup>B</sup><br>марганец<br>25<br>Mn    | VIII <sup>B</sup><br>железо<br>26<br>Fe   | VIII <sup>B</sup><br>кобальт<br>27<br>Co  | VIII <sup>B</sup><br>никель<br>28<br>Ni   | I <sup>B</sup><br>медь<br>29<br>Cu          | II <sup>B</sup><br>цинк<br>30<br>Zn           | III <sup>B</sup><br>галлий<br>31<br>Ga      | IV <sup>B</sup><br>германий<br>32<br>Ge    | V <sup>B</sup><br>мышьяк<br>33<br>As         | VI <sup>B</sup><br>селен<br>34<br>Se       | VII <sup>B</sup><br>бром<br>35<br>Br        | VIII <sup>B</sup><br>криpton<br>36<br>Kr     |   |  |                                     |                                       |                                      |  |
| V <sup>A</sup><br>рубидий<br>37<br>Rb  | II <sup>A</sup><br>стронций<br>38<br>Sr | III <sup>B</sup><br>иттрий<br>39<br>Y   | IV <sup>B</sup><br>цирконий<br>40<br>Zr | V <sup>B</sup><br>ниобий<br>41<br>Nb        | VI <sup>B</sup><br>молибден<br>42<br>Mo | VII <sup>B</sup><br>технеций<br>43<br>Tc    | VIII <sup>B</sup><br>рутений<br>44<br>Ru  | VIII <sup>B</sup><br>родий<br>45<br>Rh    | VIII <sup>B</sup><br>палладий<br>46<br>Pd | I <sup>B</sup><br>серебро<br>47<br>Ag       | II <sup>B</sup><br>кадмий<br>48<br>Cd         | III <sup>B</sup><br>индий<br>49<br>In       | IV <sup>B</sup><br>олово<br>50<br>Sn       | V <sup>B</sup><br>сурьма<br>51<br>Sb         | VI <sup>B</sup><br>теллур<br>52<br>Te      | VII <sup>B</sup><br>йод<br>53<br>I          | VIII <sup>B</sup><br>ксенон<br>54<br>Xe      |   |  |                                     |                                       |                                      |  |
| VI <sup>A</sup><br>цезий<br>55<br>Cs   | II <sup>A</sup><br>барий<br>56<br>Ba    | LANTANIDES                              |   | IV <sup>B</sup><br>гафний<br>72<br>Hf       | V <sup>B</sup><br>тантал<br>73<br>Ta    | VI <sup>B</sup><br>вольфрам<br>74<br>W      | VII <sup>B</sup><br>рений<br>75<br>Re     | VIII <sup>B</sup><br>рений<br>76<br>Os    | VIII <sup>B</sup><br>иридий<br>77<br>Ir   | I <sup>B</sup><br>платина<br>78<br>Pt       | II <sup>B</sup><br>золото<br>79<br>Au         | III <sup>B</sup><br>таллий<br>81<br>Tl      | IV <sup>B</sup><br>свинец<br>82<br>Pb      | V <sup>B</sup><br>висмут<br>83<br>Bi         | VI <sup>B</sup><br>полоний<br>84<br>Po     | VII <sup>B</sup><br>астат<br>85<br>At       | VIII <sup>B</sup><br>радон<br>86<br>Rn       |   |  |                                     |                                       |                                      |  |
| 7<br>Франций<br>87<br>Fr               | II <sup>A</sup><br>радий<br>88<br>Ra    | ACTINIDES                               |   | IV <sup>B</sup><br>резерфордий<br>104<br>Rf | V <sup>B</sup><br>дубний<br>105<br>Db   | VI <sup>B</sup><br>сесквиборий<br>106<br>Sb | VII <sup>B</sup><br>борий<br>107<br>Bh    | VIII <sup>B</sup><br>борий<br>107<br>Bh   | VIII <sup>B</sup><br>хасий<br>108<br>Hs   | VIII <sup>B</sup><br>мейтнерий<br>109<br>Mt | VIII <sup>B</sup><br>дармштадтий<br>110<br>Ds | VIII <sup>B</sup><br>рентгений<br>111<br>Rg | III <sup>B</sup><br>унунтрий<br>113<br>Uut | IV <sup>B</sup><br>унунквадий<br>114<br>Uuq  | V <sup>B</sup><br>унунпентий<br>115<br>Uup | VI <sup>B</sup><br>унунгексий<br>116<br>Uuh | VII <sup>B</sup><br>унунгетсий<br>117<br>Uus | VIII <sup>B</sup><br>унунвостий<br>118<br>Uuo |  |                                     |                                       |                                      |  |
| LANTANIDES                             |   | III <sup>B</sup><br>лантан<br>57<br>La  | IV <sup>B</sup><br>церий<br>58<br>Ce    | V <sup>B</sup><br>протактиний<br>59<br>Pr   | VI <sup>B</sup><br>неодим<br>60<br>Nd   | VII <sup>B</sup><br>неодим<br>60<br>Nd      | VIII <sup>B</sup><br>прометий<br>61<br>Pm | VIII <sup>B</sup><br>самарий<br>62<br>Sm  | VIII <sup>B</sup><br>европий<br>63<br>Eu  | VIII <sup>B</sup><br>гадолий<br>64<br>Gd    | VIII <sup>B</sup><br>диспрозий<br>66<br>Dy    | VIII <sup>B</sup><br>гольмий<br>67<br>Ho    | VIII <sup>B</sup><br>эрий<br>68<br>Er      | VIII <sup>B</sup><br>тулий<br>69<br>Tm       | VIII <sup>B</sup><br>иттербий<br>70<br>Yb  | VIII <sup>B</sup><br>лютеций<br>71<br>Lu    |  |   |  |                                     |                                       |                                      |  |
| ACTINIDES                              |   | III <sup>B</sup><br>актиний<br>89<br>Ac | IV <sup>B</sup><br>торий<br>90<br>Th    | V <sup>B</sup><br>проктиний<br>91<br>Pa     | VI <sup>B</sup><br>уран<br>92<br>U      | VII <sup>B</sup><br>уран<br>92<br>U         | VIII <sup>B</sup><br>нептуний<br>93<br>Np | VIII <sup>B</sup><br>плутоний<br>94<br>Pu | VIII <sup>B</sup><br>амерций<br>95<br>Am  | VIII <sup>B</sup><br>кемрий<br>96<br>Cm     | VIII <sup>B</sup><br>берклий<br>97<br>Bk      | VIII <sup>B</sup><br>калifornий<br>98<br>Cf | VIII <sup>B</sup><br>фермий<br>100<br>Fm   | VIII <sup>B</sup><br>мэнделевий<br>101<br>Md | VIII <sup>B</sup><br>нобелий<br>102<br>No  | VIII <sup>B</sup><br>лоуренсий<br>103<br>Lr |  |   |  |                                     |                                       |                                      |  |

Одобрено редакцией [www.borok.by](http://www.borok.by)