

Тема 7. Кристаллические системы

7.1. Общие представления об агрегатном состоянии вещества



Расстояние между частицами

Соизмеримо с размерами самих частиц

В ряде случаев частицы отдалены друг от друга

Значительно больше размера самих частиц

Соотношение средней потенциальной и кинетической энергии частиц

$$E_{\text{ср пот}} > E_{\text{ср кин}}$$

$$E_{\text{ср пот}} \approx E_{\text{ср кин}}$$

$$E_{\text{ср пот}} < E_{\text{ср кин}}$$

Расположение частиц

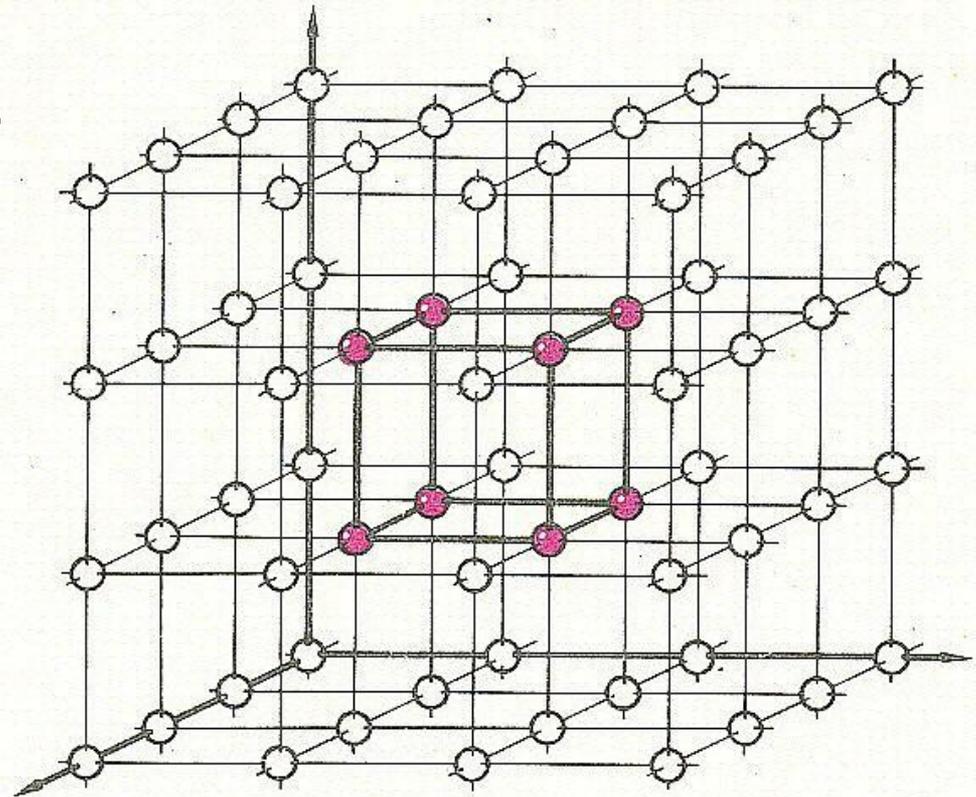
Дальний порядок

Ближний порядок

Хаотичное движение

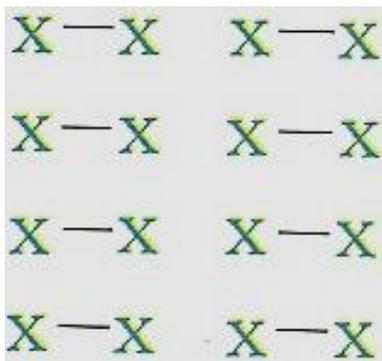
7.2. Типы кристаллических решеток

Элементарная кристаллическая ячейка – наименьший комплекс частиц, который при многократном повторении в пространстве позволяет воспроизвести пространственную кристаллическую решетку

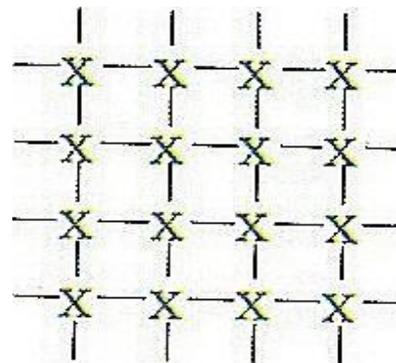


По типу частиц, находящихся в узлах кристаллической решетки, их делят на:

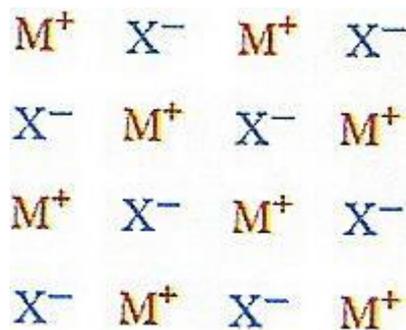
○ молекулярные



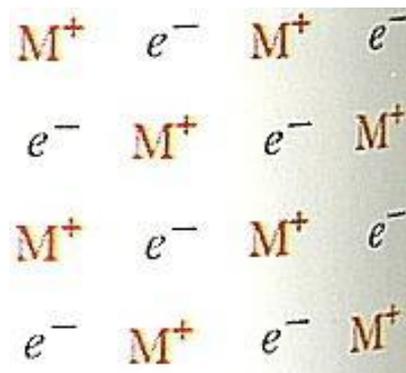
○ атомные



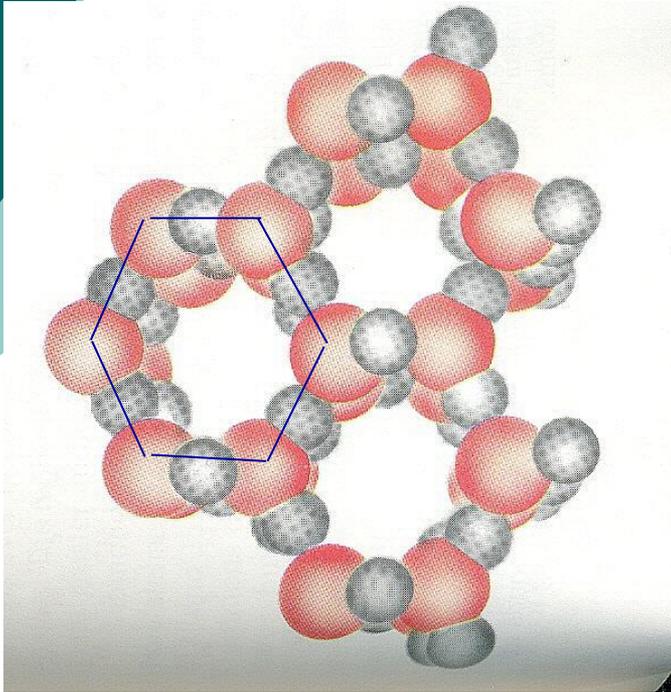
○ ионные



○ металлические



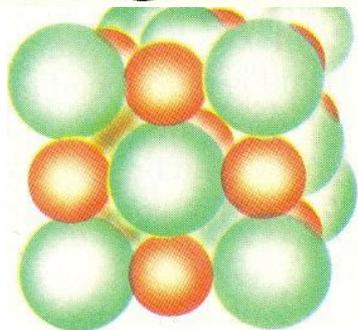
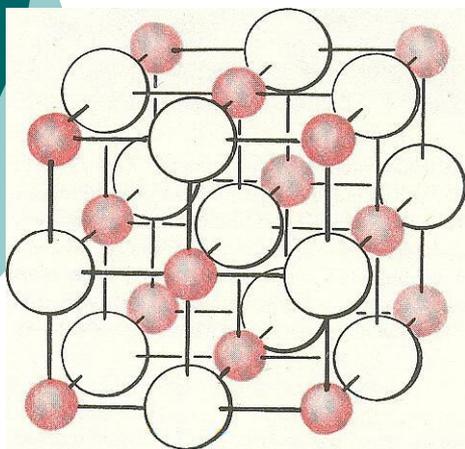
Соединения с молекулярными решетками



Кристаллическая
решетка льда

- В узлах кристаллической решетки находятся молекулы вещества.
- Связь между частицами в кристалле осуществляется за счет сил межмолекулярного взаимодействия, чаще всего – сил Ван-дер-Ваальса, реже – водородной связи.
- Энергия решетки - низкая
- Вещество с молекулярной решеткой имеет низкую температуру плавления.

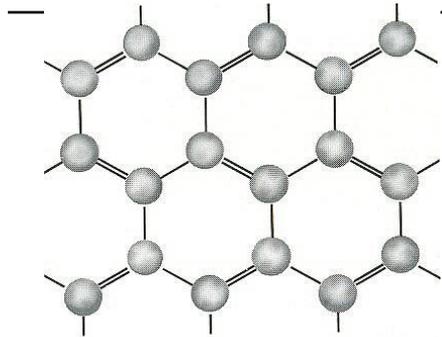
Соединения с ионными решетками



Кристаллическая
решетка NaCl

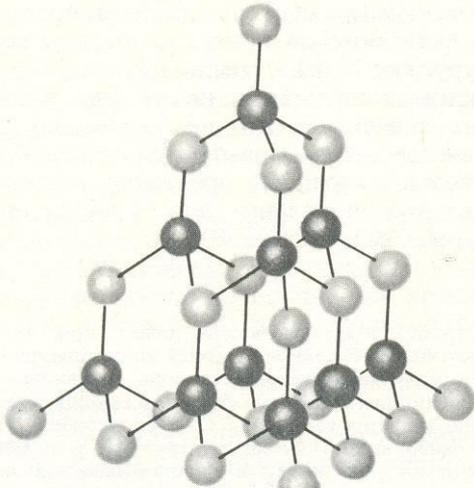
- В узлах кристаллической решетки находятся положительно и отрицательно заряженные ионы.
- Между частицами в кристалле действует ионная связь.
- Число ближайших соседей каждого иона определяется а) принципом электронейтральности; б) соотношением размеров ионов
- Энергия решетки – значительно выше, чем у молекулярной, но ниже, чем у атомной.

Соединения с атомными решетками



Кристаллическая решетка графита

- В узлах кристаллической решетки находятся атомы неметаллов.
- Между частицами в кристалле действует ковалентная связь.
- Энергия решетки – высокая.
- Температура плавления – высокая.



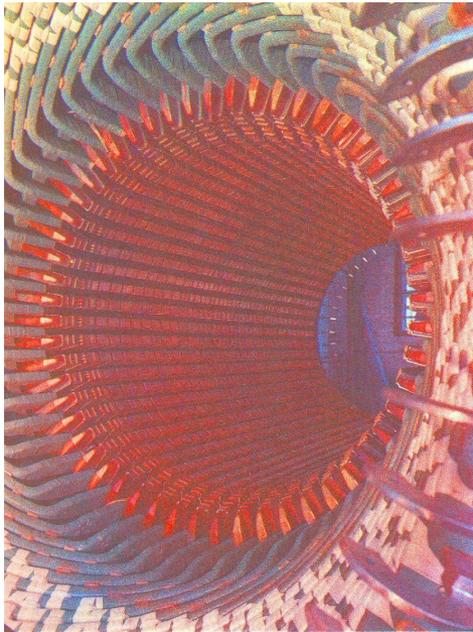
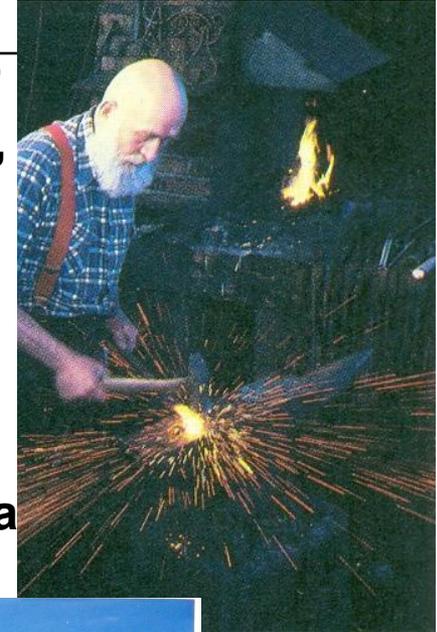
Кристаллическая решетка алмаза

Энергия связи различных кристаллов

Кристалл	Тип кристаллической решетки	Энергия связи, кДЖ/моль
CH_4	молекулярная	10,0
NaCl	ионная	754
C (алмаз) Al_2O_3 (корунд)	атомная	712 1180
Na Fe	металлическая	109 394

7.3. Особенности кристаллов металлов

Физические и технологические свойства металлов: электропроводность, прочность, пластичность, и ряд других, определяются строением металлических кристаллов и особенностями ковалентной (металлической) связи в кристалле металла



Химизм явления электропроводности

- При образовании атомного и металлического кристалла все соседние атомы оказываются связаны между собой ковалентными связями. При этом валентные электроны атомов принадлежат всем атомам, образующим кристалл.
- Электроны, как в атоме, так и в молекуле, и в кристалле, могут находиться только на определенных **разрешенных энергетических уровнях**. Этим уровням соответствуют **энергетические зоны**: с минимальной энергией – **валентная зона**, с более высокой – **зона проводимости**.

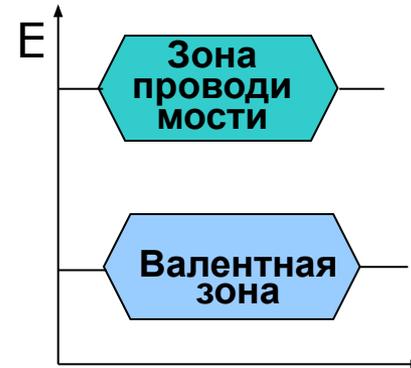
E

- У металлов связь образуют, как правило, s- и sp-орбитали. Соседние разрешенные энергетические зоны перекрывают друг друга



- Электроны беспрепятственно переходят из валентной зоны в зону проводимости. При этом они *перестают осуществлять химическую связь и превращаются в носителей электрического тока*

- У неметаллов связь образуют, как правило, sp^2 - , sp^3 - и выше-орбитали.
- Разница в энергии между соседними разрешенными энергетическими зонами существенна

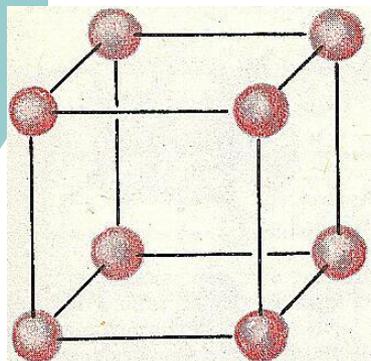


- Переход электронов из одной зоны в другую затруднен

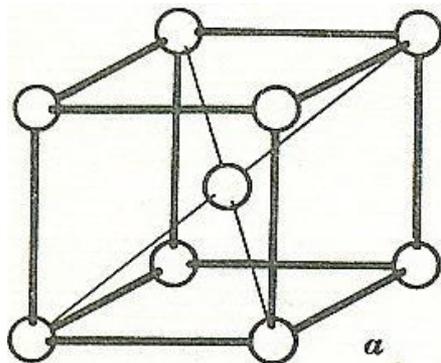
В общем случае электропроводность металлов выше, чем неметаллов, а прочность - ниже.

Пластичность металлов и особенности их кристаллического строения

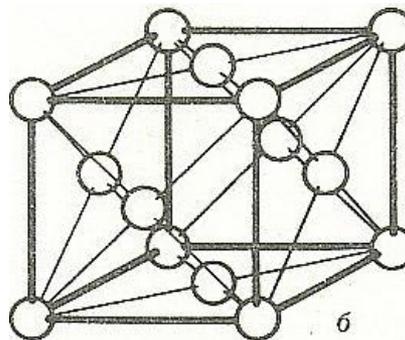
○ Основные типы кристаллических решеток металлов



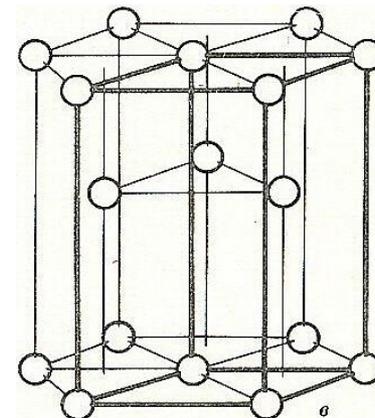
простая кубическая
 $K = 6$



кубическая
объемноцентриро-
ванная
 $K = 8$ (Li, Na, K, Rb)



кубическая
ранецентрирова-
нная
 $K = 12$ (Cu, Ag, Au)



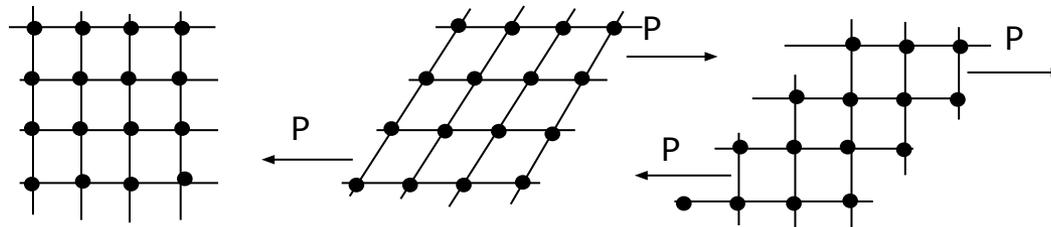
Гексагональная
 $K = 12$ (Ti, Zr, Hf)

Координационное число (K) – число атомов, находящихся на наиболее близком расстоянии от данного атома.

Для металлов характерно высокое значение K (≥ 8), высокую плотность упаковки решетки (малые расстояния между частицами). Для неметаллов характерно низкое значение K (≤ 4), низкая плотность упаковки решетки. У O_2 $K=2$, у N_2 $K=3$, у алмаза $K=4$

Плоскость скольжения – это плоскость, максимально «заселенная» атомами

- Пластичность металла связана со сдвигом атомов в кристаллической решетке вдоль плоскостей скольжения.
- **В кристалле металла** координационное число велико, и при сдвиге одной плоскости относительно другой легко происходит перестройка химических связей. В результате при нагрузке кристалл не разрушается, а деформируется



- **У неметаллов** координационное число мало. Перестройка химических связей практически невозможна. В результате при нагрузке кристалл не деформируется, а разрушается.