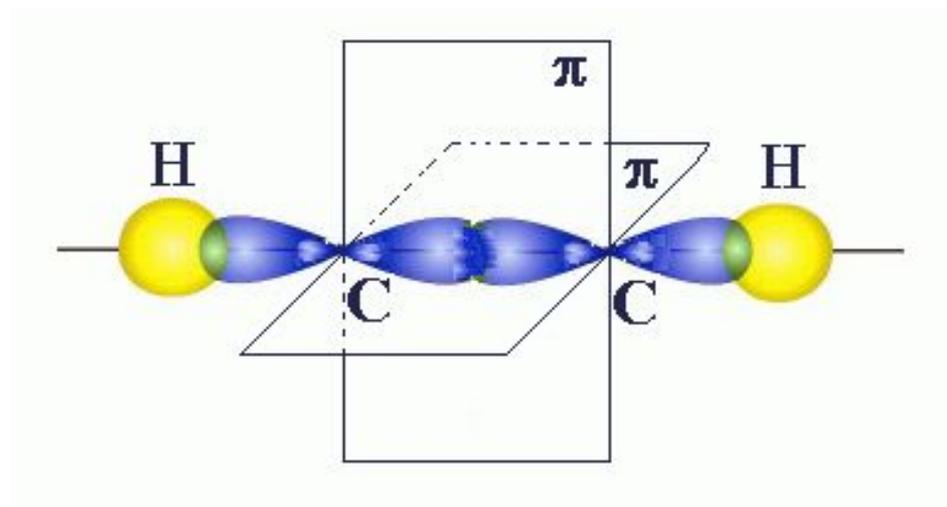


# ХИМИЧЕСКАЯ СВЯЗЬ



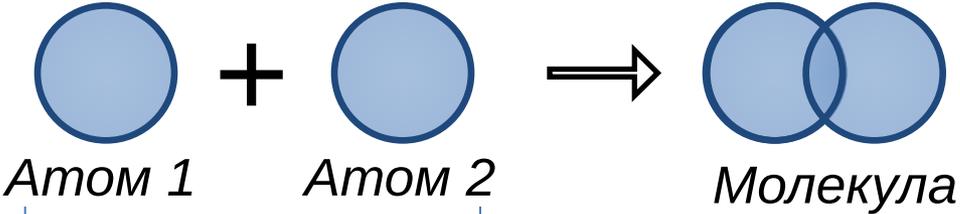
# Почему?

*минимуму энергии* системы соответствует *максимум устойчивости* и, наоборот, *минимуму устойчивости* отвечает *максимум энергии*»

Процесс самопроизвольный, т.е.  $\Delta G < 0$

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S$$

*Энтальпийный фактор*      *Энтропийный фактор*



$$S_1 > S_2 \Rightarrow \Delta S < 0$$

$\Delta G < 0$  только если  $\Delta H < 0$



**Молекула** - устойчивая электронейтральная частица, представляющая мельчайшую частицу вещества, обладающую его химическими свойствами

Не способствует образованию химической связи

# Химическая связь...

**ХИМИЧЕСКАЯ СВЯЗЬ** это взаимодействие атомов, обусловленное перекрыванием их электронных облаков и сопровождающееся **уменьшением полной энергии системы**

Химическая связь осуществляется валентными электронами

У **s**- и **p**- элементов это внешние электроны



У **d**-элементов - внешние **ns**- и предвнешние **(n-1)d**



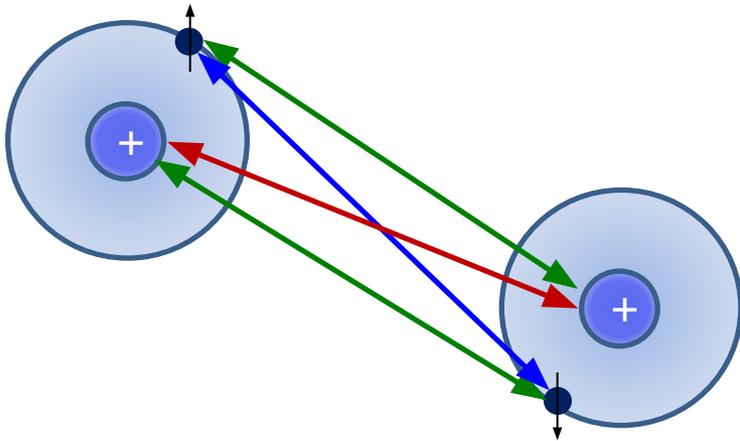
У **f**-элементов – **ns**-, **(n-1)d**- и **(n-2)f** электроны



# Химическая связь

## Ядерно-электронные взаимодействия

способствуют образованию химической связи



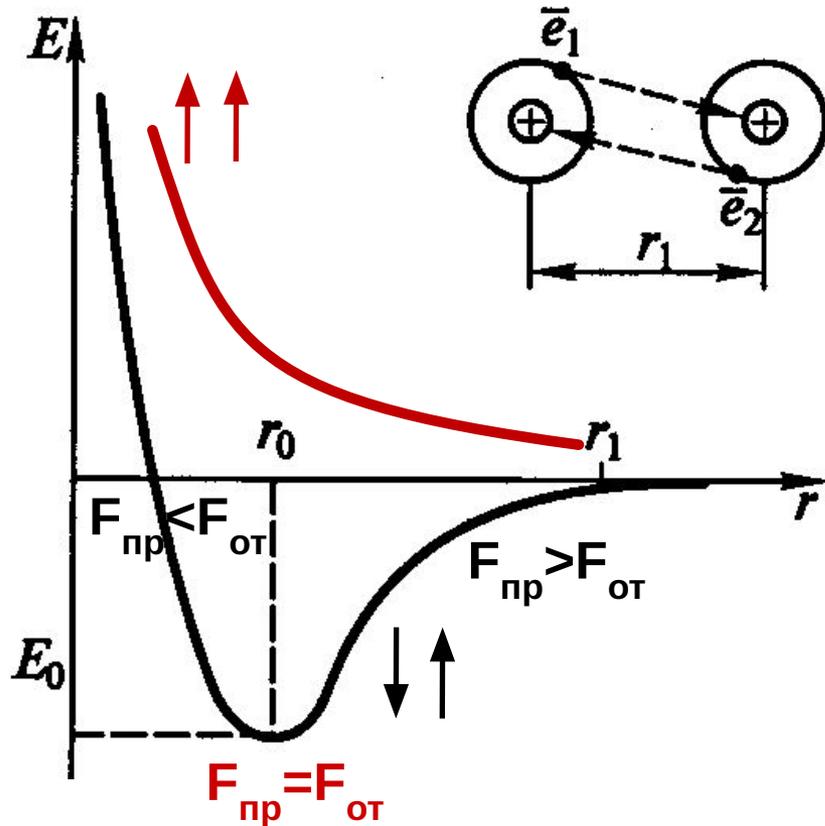
## Межъядерное

**отталкивание** не способствует  
образованию химической связи

## Межэлектронные взаимодействия

- притяжение электронов с антипараллельными спинами  
(положительный фактор в образовании связи);
- отталкивание электронов с параллельными спинами  
(отрицательный фактор)

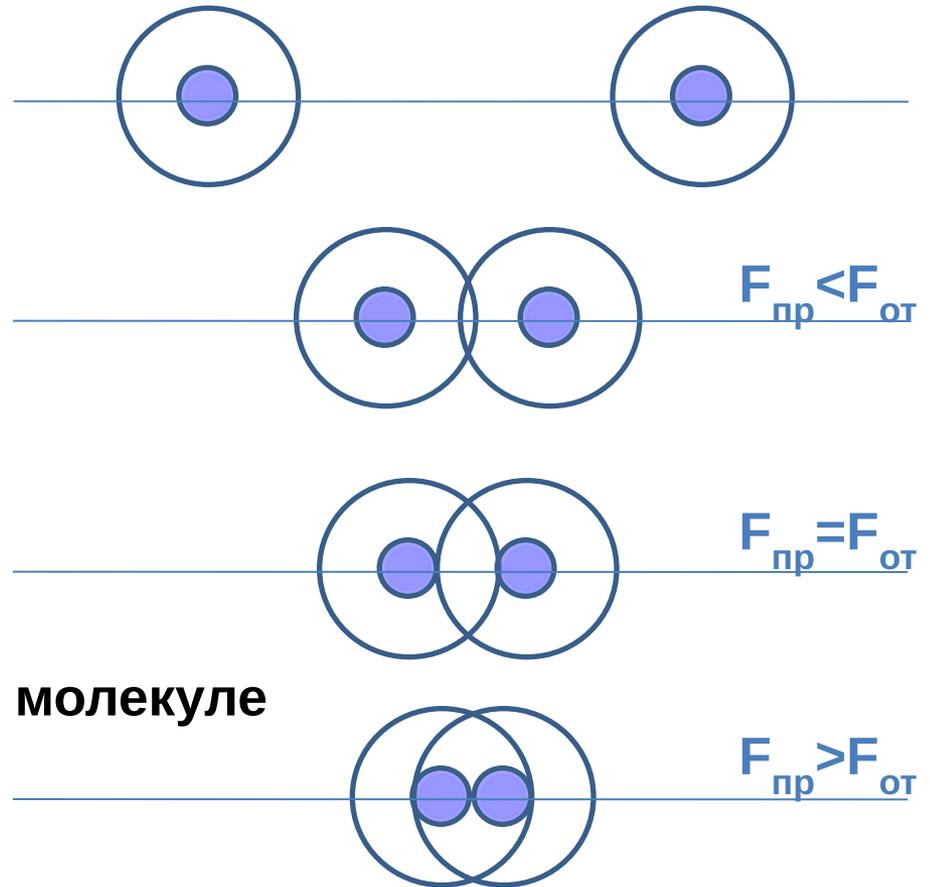
# Химическая связь



$r_0$  – расстояние между атомами в молекуле

$E_0$  – энергия связи

В 1927 году В. Гайтлер и Ф. Лондон исследовали зависимость потенциальной энергии системы ( $E$ ) из двух атомов водорода от расстояния между их ядрами ( $r$ )



# Химическая связь

**Длина связи ( $r$ )** – межъядерное расстояние  
взаимодействующих атомов

Зависит от размеров электронных оболочек  
и степени их перекрывания

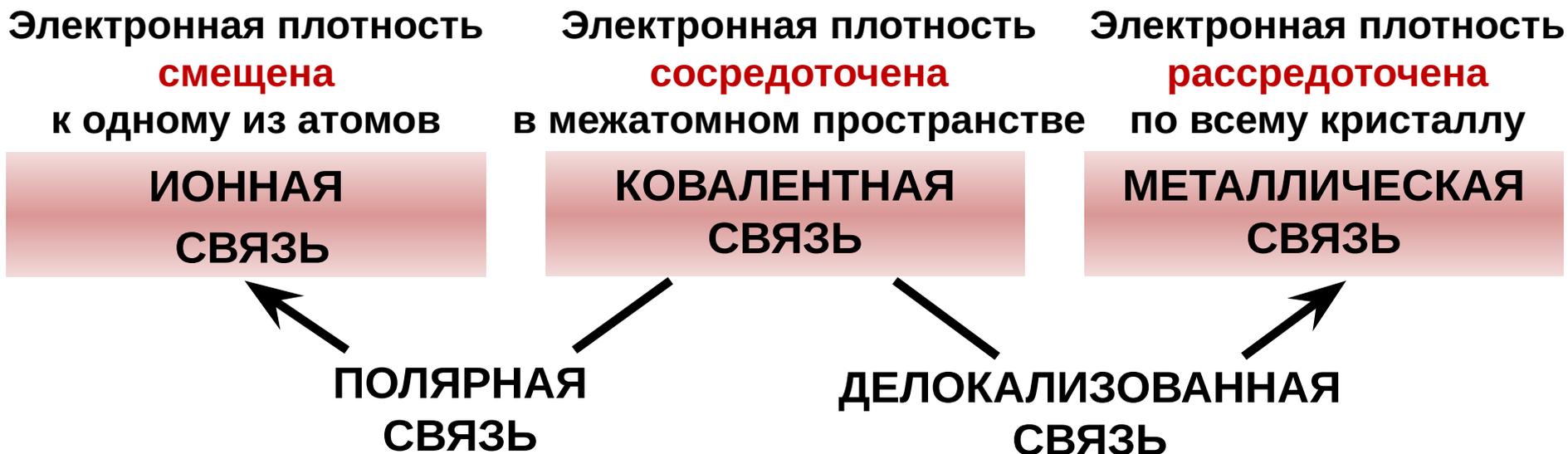
С уменьшением длины связи обычно увеличивается энергия связи  
и, соответственно, устойчивость молекул

**Энергия химической связи ( $E_{\text{св}}$ )** –  
количество энергии,  
выделяющееся при образовании химической связи

Чем больше энергия химической связи, тем устойчивее молекулы

# Типы химической связи

Тип химической связи определяется характером распределения электронной плотности между взаимодействующими атомами



При сближении **молекул** также возникает **ХИМИЧЕСКАЯ СВЯЗЬ**

**Водородная химическая связь**

**Ван-дер-ваальсовы взаимодействия**

**Межмолекулярные связи** отличаются значительно **меньшей прочностью**

# Теории химической связи

## Метод валентных связей (ВС)

Представления о двухцентровых  
локализованных связях  
(Ф. Лондон, В. Гайтлер, Л. Полинг)  
1927 г.



## Метод молекулярных орбиталей (ММО)

Представления о многоцентровых  
делокализованных связях  
(Р. Малликен, Ф. Гунд, Э. Хюккель и др.)  
40-е годы XX века



Обе теории дополняют друг друга

# Метод валентных связей

## Основные положения

1. Химическая связь между атомами образуется в результате обобществления валентных электронов, т.е. образования общих электронных пар
2. Общие электронные пары образуют лишь неспаренные электроны с антипараллельными спинами
3. При образовании химической связи происходит частичное перекрывание атомных орбиталей (АО), что приводит к увеличению электронной плотности в межъядерном пространстве
4. Химическая связь тем прочнее, чем в большей степени перекрываются взаимодействующие АО
5. В пространстве химическая связь располагается в том направлении, в котором возможность перекрывания АО наибольшая
6. Связь, образованная перекрыванием АО по линии, соединяющей центры атомов, называется –  $\sigma$ -связью, а по обе стороны от линии  $\pi$ -связью.  
 $E_{\sigma} > E_{\pi}$
7. Если молекула образуется путём перекрывания двух АО, связь называется одинарной, если более двух АО – кратной. **Одинарная связь** представлена всегда  $\sigma$ -связью, а **кратные связи** включают  $\sigma$ - и  $\pi$ -связи
8. Общая электронная пара соответствует единице химической связи

# Метод валентных связей

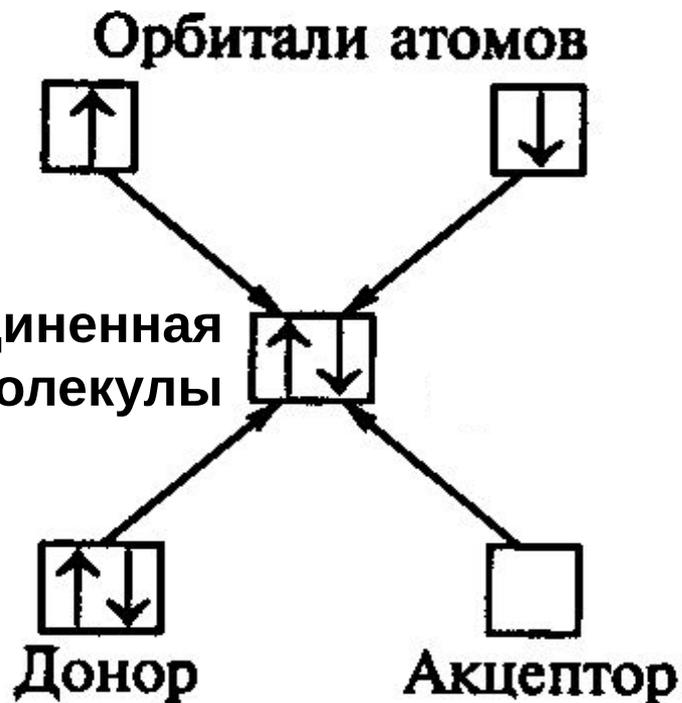
Ковалентность элемента  
или его спинвалентность  
определяется числом **неспаренных** валентных электронов  
в основном и возбуждённом состояниях атома

## Механизмы образования ковалентной связи

- Обменный
- Донорно-акцепторный

Каждый атом дает по одному  
неспаренному электрону  
в общую электронную пару

Один атом (донор)  
предоставляет электронную пару,  
а другой атом (акцептор)  
предоставляет для этой пары  
свободную орбиталь



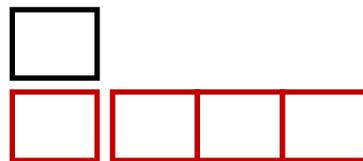
# Метод валентных связей

## Свойства ковалентной связи

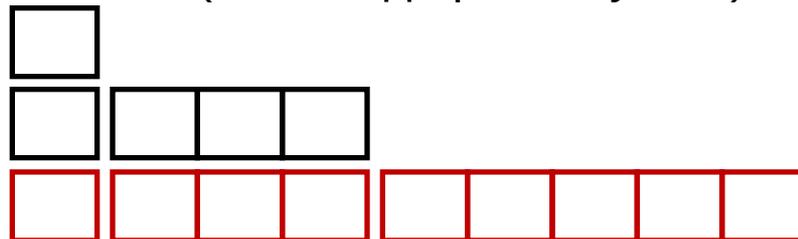
1. Энергия связи
2. Длина связи
3. **Насыщаемость**
4. Кратность связи
5. Направленность
6. Полярность
7. Поляризуемость

**Насыщаемость** Количество связей (обобществленных пар электронов), которые имеет атом, определяется числом орбиталей, способных участвовать в образовании связи

II период – максимальная валентность не более IV



III период (s- и p-) – максимальная валентность не более IX (не всегда реализуется)



Максимальная валентность атома зависит от положения элемента в ПС

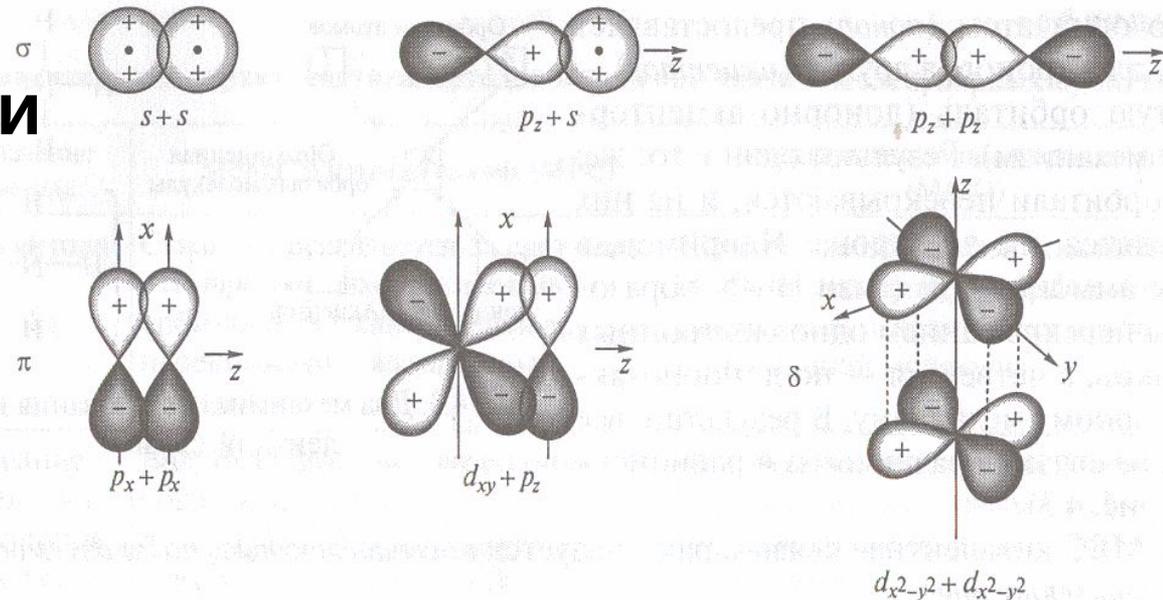
# Метод валентных связей

## Свойства ковалентной связи

1. Энергия связи
2. Длина связи
3. Насыщаемость
- 4. Кратность связи**
5. Направленность
6. Полярность
7. Поляризуемость

## Кратность связи

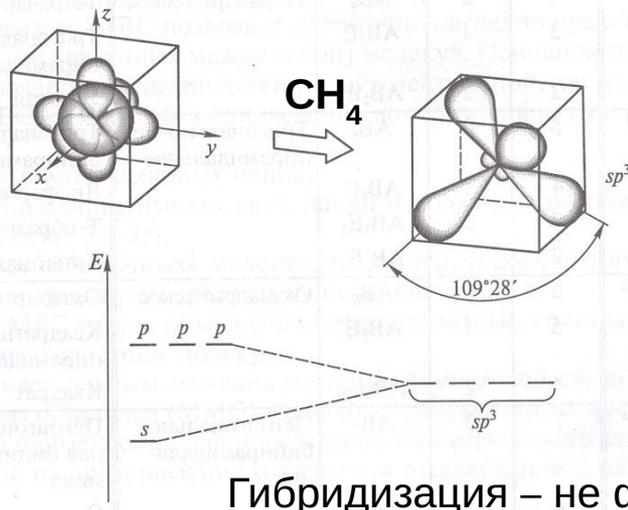
число электронных пар, обобществлённых двумя соседними атомами молекулы в результате ковалентной химической связи. Чем выше кратность связи, тем, как правило, меньше её длина и выше прочность.



# Метод валентных связей

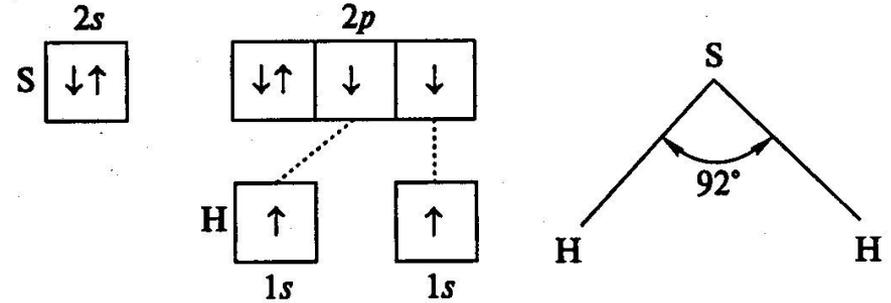
## Свойства ковалентной связи

1. Энергия связи
2. Длина связи
3. Кратность связи
4. Насыщаемость
5. **Направленность**
6. Полярность
7. Поляризуемость



Гибридизация – не физическое явление, а модель

## Направленность



H<sub>2</sub>S – нелинейная,  
так как связь образована двумя  
p-орбиталями серы,  
находящимися под углом 90°

**Гибридизация** – смешение в процессе образования химической связи разных по форме и энергии АО (*s*-, *p*-, *d*- или *f*) с образованием новых, но уже одинаковых по форме и энергии орбиталей

В гибридизации участвуют близкие по значению энергии орбитали. Химические связи, образованные гибридными орбиталями, прочнее, а полученная молекула более устойчива

# Свойства ковалентной связи

## Направленность

Формула молекулы	Тип гибридизации	Геометрия молекулы	Пример
$AB_2$	$sp$	Линейная	$BeH_2$
$AB_3$	$sp^2$	Треугольная Угловая	$BCl_3$ $GeF_2$
$AB_4$	$sp^3$	Тетраэдр Тригональная пирамида Угловая	$CH_4$ $NH_3$ $H_2O$
$AB_5$	$sp^3d$	Тригональная бипирамида Дисфеноид («качели») Т-образная Линейная	$PF_5$ $SCl_4$ $ICl_3$ $XeF_2$
$AB_6$	$sp^3d^2$	Октаэдр Квадратная пирамида Квадрат	$SF_6$ $IF_5$ $XeF_4$
$AB_7$	$sp^3d^3$	Пентагональная бипирамида Одношапочный октаэдр	$IF_7$ $SbF_6$

# Свойства ковалентной связи

1. Энергия связи
2. Длина связи
3. Кратность связи
4. Насыщаемость
5. Направленность
- 6. Полярность**
7. Поляризуемость

Под **электроотрицательностью** атома понимают его способность притягивать к себе обобществленные электроны

**Полярность** определяется степенью перекрывания орбиталей

Чем **больше разница** в относительной **электроотрицательности** атомов (ОЭО), тем **выше полярность** химической связи

Если связь образована двумя одинаковыми атомами (т.е.  $\Delta\text{ОЭО} = 0$ ), то электроны в равной степени принадлежат обоим атомам и молекула **неполярна**

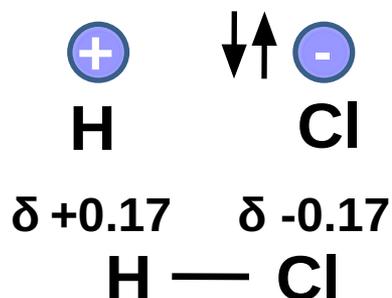
Когда связь образована двумя разными атомами, электронная плотность смещена в сторону более электроотрицательного атома. Такая связь называется **полярной**

Если  $\Delta\text{ОЭО}=2.5-3.2$  связь условно считают **ионной** и рассматривают как предельный случай ковалентной полярной связи

# Свойства ковалентной связи

## Полярность

### Степень ионности связи



Смещение электронной плотности  
к более электроотрицательному атому

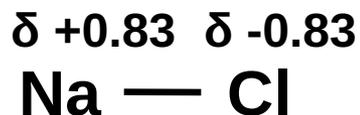


Возникновение эффективных зарядов ( $\delta$ )



Степень ионности

Связь в молекуле HCl полярная, имеет на 17 % ионный характер



т.е. степень ионности равна 83%

**Полного** перетягивания связующих пар электронов  
от более электроположительного к более электроотрицательному атому  
и образования 100%-ной ионной связи практически **не бывает**

# Свойства ковалентной связи

## Полярность

### Дипольный момент связи ( $\mu$ )

$$\vec{\mu} = q \cdot l$$

[Д] (Дебай) или [Кл·м]  
1 Д =  $0.33 \cdot 10^{-29}$  Кл·м

$l$  – длина связи

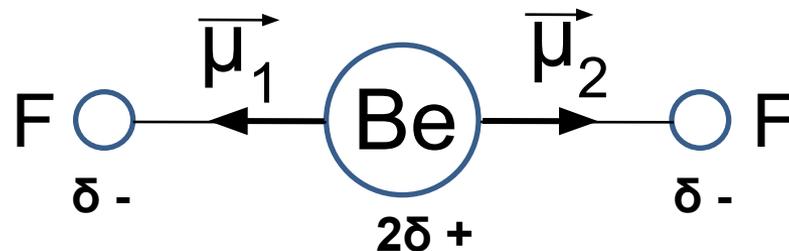
$q$  – эффективный заряд

### Дипольный момент зависит

- от полярности связи
- от геометрии молекул
- от наличия неподеленных пар электронов

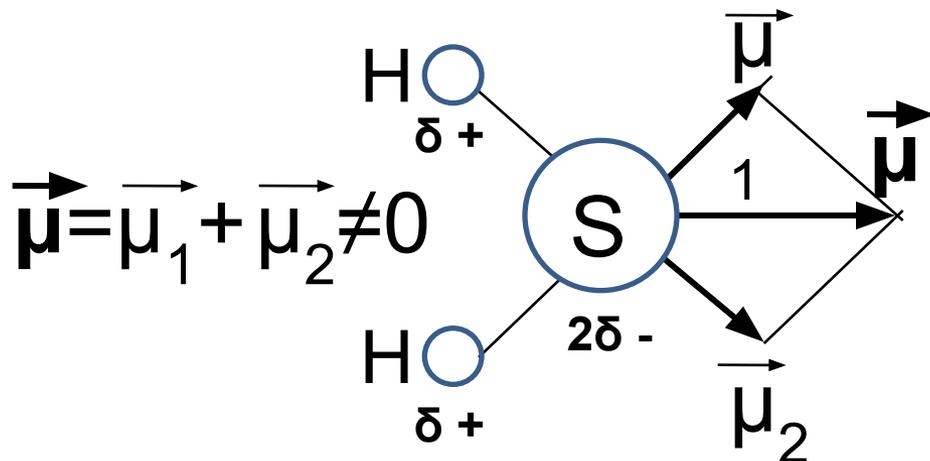
## Неполярные молекулы

если сумма дипольных моментов связей = 0



$$\vec{\mu} = \vec{\mu}_1 + \vec{\mu}_2 = 0$$

## Полярные молекулы



# Свойства ковалентной связи

**Поляризуемость** или динамическая поляризация

– это способность электронной оболочки атома или молекулы деформироваться под воздействием внешнего поля, в качестве которого могут выступать ионы или полярные молекулы

Существует **обратная зависимость между полярностью и поляризуемостью** ковалентной связи:

чем больше электроны в статической (нереагирующей) молекуле сдвинуты под действием электроотрицательного атома (статическая поляризация), тем меньше остается возможности для их дальнейшего смещения под внешним воздействием (динамическая поляризация)

	HCl	HBr	HJ
<b>ΔЭО</b>	<b>0.9</b>	<b>0.7</b>	<b>0.5</b>

Полярность связи уменьшается  
Поляризуемость растет

# Метод

## молекулярных орбиталей

Основная идея ММО, заключается в том, что все электроны находятся на молекулярных орбиталях, единых для всей системы ядер и электронов данной молекулы

### ОСНОВНЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ

1. При образовании молекулы по ММО изменяют своё состояние не только валентные электроны, а все электроны соединяемых атомов. Они переходят с АО (одно ядро, одноцентровые) на более сложные многоцентровые – МО
2. МО – это объём пространства в поле нескольких ядер, где вероятность нахождения электронов составляет 90-95%

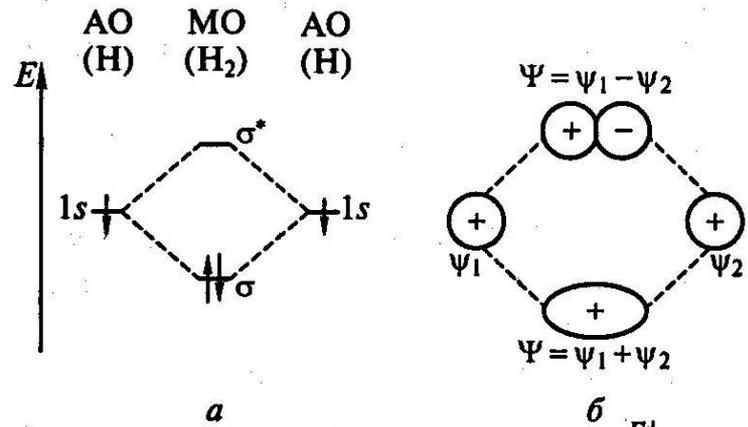
# Метод молекулярных

## орбиталей

3. Для получения МО используют метод линейной комбинации атомных орбиталей МЛКАО.  
Из двух АО разных атомов образуется две МО:
  - а) **связывающая**, которая характеризуется меньшим запасом энергии по сравнению с запасом энергии АО;
  - б) **разрыхляющая** – с большим запасом энергии
4. Число МО равно сумме АО соединяемых атомов. Например, для молекулы  $\text{H}_2\text{O}$ :  $2\text{АО}(\text{H}) + 8\text{АО}(\text{O}) = 10\text{МО}$
5. Распределение электронов на МО молекулы подчиняется тем же правилам, что и по АО в атоме (принцип минимума полной энергии молекулы, запрет Паули, правило Гунда)
6. Химическая связь в ММО характеризуется энергией связи и кратностью связи ( $p$ ). Если  $p > 0$ , то химическая связь реализуется. Чем больше  $p$ , тем больше энергия и прочность связи

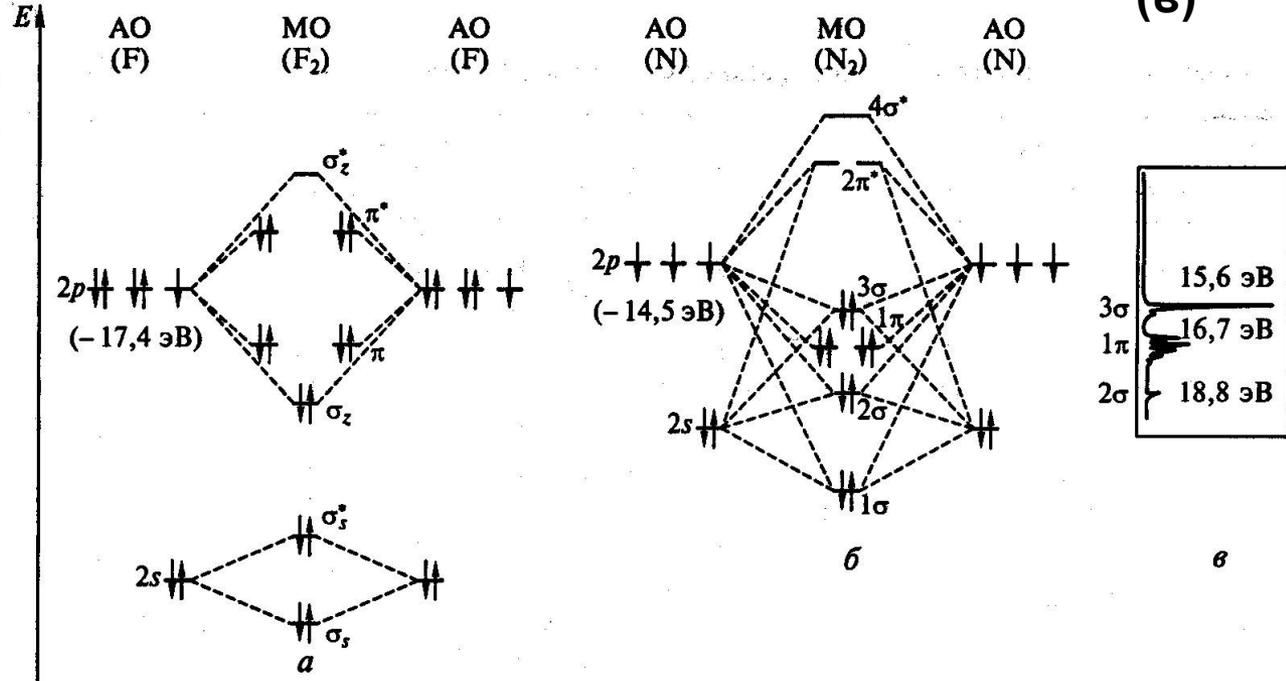
# Метод молекулярных орбиталей

## Двухатомные гомоядерные молекулы



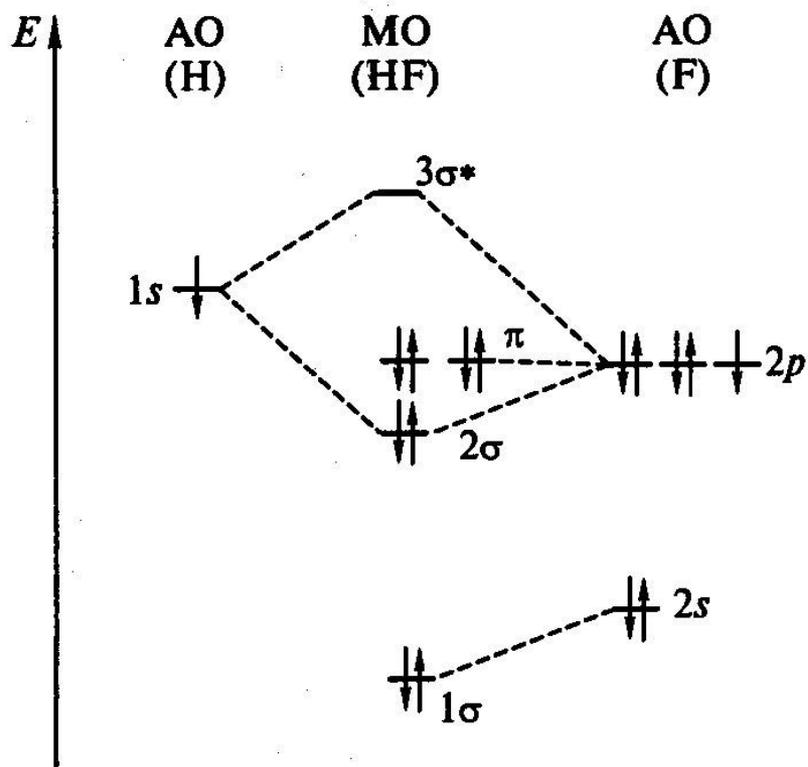
Энергетическая диаграмма МО молекулы водорода (а) и схема образования  $\sigma_s$ -орбитали (б)

Энергетические диаграммы МО молекул F<sub>2</sub> (а), N<sub>2</sub> (б) и фотоэлектронный спектр молекулы N<sub>2</sub> (в)

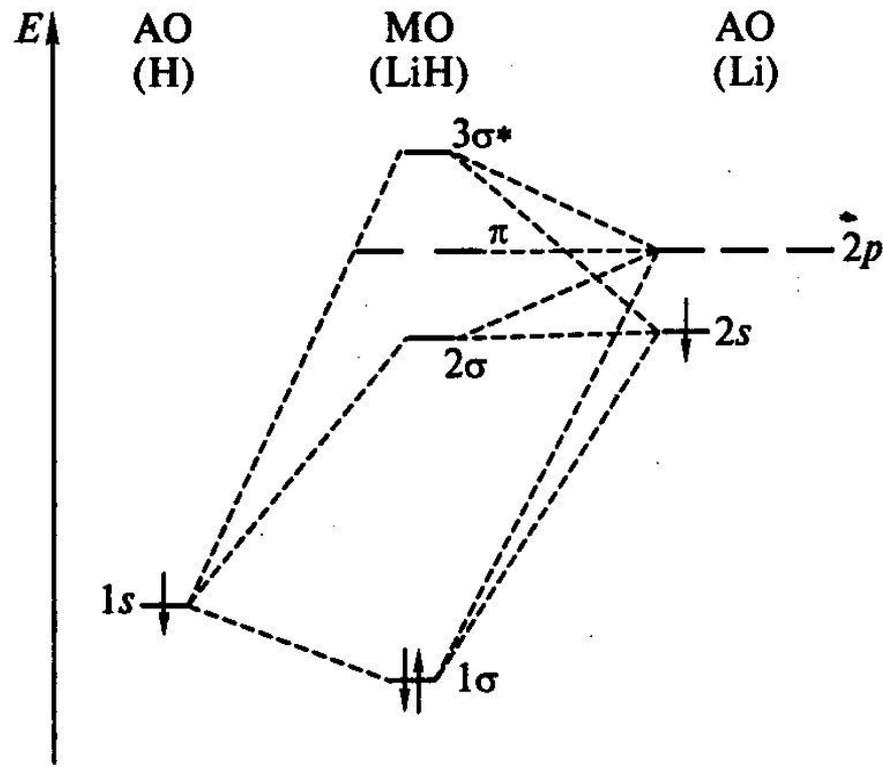


# Метод молекулярных орбиталей

## Гетероядерные двухатомные молекулы



*a*



*б*

Энергетические диаграммы МО молекул HF (а), LiH (б)

# Метод молекулярных орбиталей

## Какую информацию можно извлечь из энергетических диаграмм МО?

- Прочность молекул – определяется выигрышем энергии при образовании молекулы из атомов и коррелирует с величиной кратности связи (полуразностью числа электронов на связывающих и разрыхляющих орбиталях)
- Межатомные расстояния
- Магнитные свойства
- Энергетические и спектральные характеристики

# Теории химической связи

Название метода	Метод валентных связей (МВС)	Метод молекулярных орбиталей (ММО)
Суть метода	Связь осуществляется за счет <i>пары электронов</i> , находящихся на орбитали, образовавшейся за счет перекрывания двух атомных орбиталей (АО)	В молекуле образуется собственная система <i>молекулярных орбиталей (МО)</i> , на которых находятся все электроны данной молекулы
Описание поведения электронов в молекуле (расчет волновой функции)	Волновая функция электронов образующих связь: $\Psi = \psi_A(1)\psi_B(2) + \psi_A(2)\psi_B(1) + \psi_A(1)\psi_A(2) + \psi_B(1)\psi_B(2),$ где $\psi_A$ и $\psi_B$ - волновые функции атомов А и В, 1 и 2 - номера электронов, участвующих в связи	В приближении линейной комбинации атомных орбиталей (ЛКАО) молекулярные орбитали образуются из атомных $\Psi_I = c_1\psi_A + c_2\psi_B$ $\Psi_{II} = c_3\psi_A - c_4\psi_B$
Симметрия орбиталей	Орбитали $\sigma$ -, $\pi$ - и $\delta$ -симметрии образуют, соответственно, $\sigma$ -, $\pi$ - и $\delta$ -связи	МО имеют $\sigma$ -, $\pi$ - и $\delta$ - и более сложные типы симметрии
Число связей	Количество общих электронных пар	Нет понятия числа связей
Прочность молекулы	Определяется величиной перекрывания АО	Определяется разностью энергий электронов на МО и исходных АО
Геометрия молекулы	Определяется направлением в пространстве АО, участвующих в связи	Определяется как положение атомов в пространстве, при котором энергия системы минимальна

# Теории химической связи

## Метод Валентных связей

### достоинства:

- нагляден;
- описывает геометрию молекул

- недостатки:**
- не рассматривает вклад неспаренных электронов в образование связи (природу связи в частице  $\text{H}^{2+}$ )
  - не может объяснить магнитные свойства вещества (например, парамагнитные свойства  $\text{O}_2$ )

# Теории химической связи

## Метод Молекулярных орбиталей

### достоинства:

- общий подход при описании всех химических соединений

### недостатки:

- не столь нагляден, как МВС
- не объясняет геометрии молекул

**выбор метода определяется объектом исследования и поставленной задачей**

На заметку домохозяйке:  
Шуруп, забитый молотком  
держится крепче чем  
гвоздь, закрученный  
отверткой.

# Ионная связь

При взаимодействии наиболее электроотрицательных атомов с наиболее электроположительными образуется связь с **большой степенью полярности**

**Ионные кристаллы** – твердые вещества, структурными единицами которых являются ионы

## Прочность

$$E_{\text{кул}} = \frac{Az^+z^-e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad \text{Энергия кулоновского взаимодействия}$$

$$E_{\text{отт}} \sim \frac{1}{r^n} \quad \text{Энергия отталкивания электронных оболочек}$$

## Энергия кристаллической решётки

$$U^0 = \frac{AN_A z^+ z^- e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \left(1 - \frac{1}{n}\right) \quad \text{Уравнение Борна-Ланде}$$

# Ионная связь

## Пространственное расположение ионов

**Координационное число** (число ближайших соседей) – определяется относительными размерами аниона и катиона

Соотношение $r_-/r_+$	Координационное число	Тип структуры	Примеры соединений
$< 0.414$	4	Сфалерит (ZnS)	CuCl, CdS, InAs
$< 0.732$	6	NaCl	LiCl, KBr, TiO, PbTe
$< 1.37$	8	CsCl	CaS, CsCN, NH <sub>4</sub> Cl

# Ионная связь

## Электронная структура

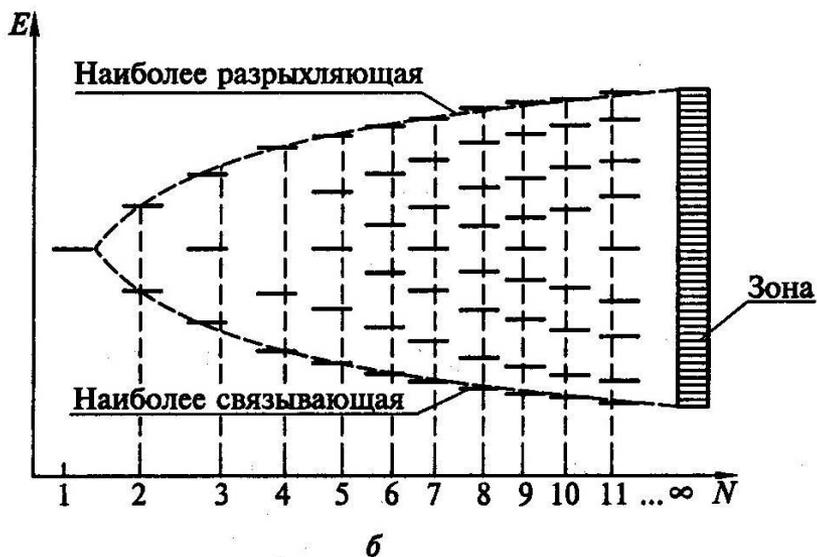
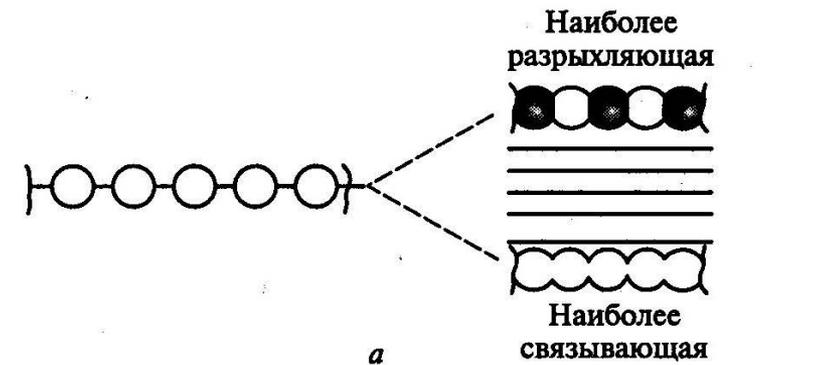


Схема образования МО в кристалле (а) и энергетическая диаграмма (б)

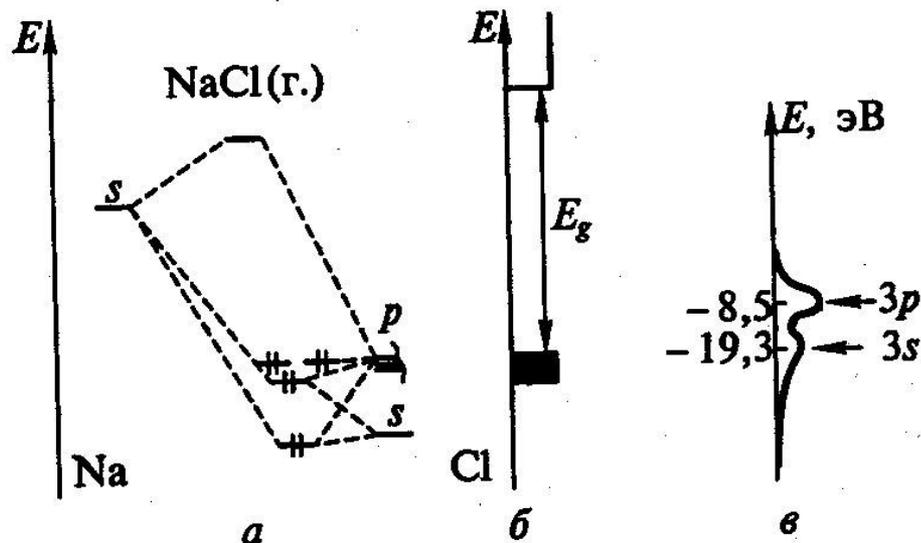


Схема энергетической диаграммы МО молекулы NaCl (а), энергетических зон (б) и рентгеноэлектронного спектра кристалла (в)

$E_g$  – **запрещенная зона**

Заполненная электронами зона – **валентная зона**

Полностью пустая зона – **зона проводимости**

# Металлическая связь

**Металлической** обычно называют связь

между атомами металлов в твердом состоянии

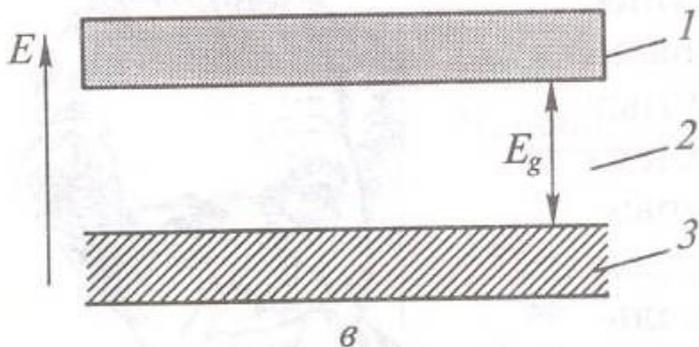
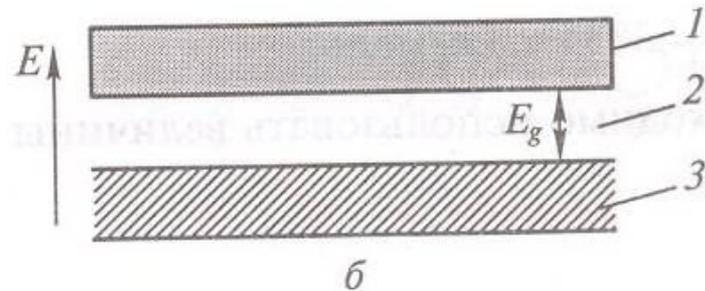
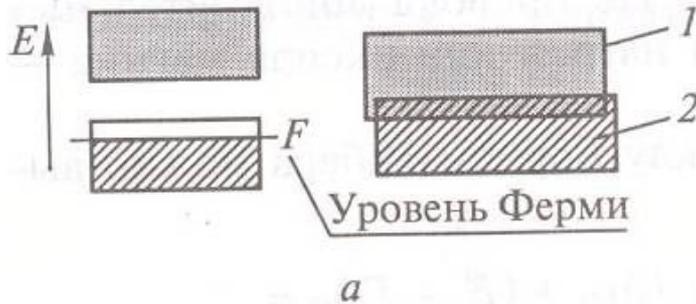


Схема энергетических зон

(а) – в металле:

1 – зона проводимости;

2 – валентная зона (частично заполненная или перекрывающаяся с зоной проводимости)

(б) в полупроводнике

(в) в диэлектрике

1 – зона проводимости (пустая);

2 – запрещенная зона

3 – валентная зона (заполненная)

Связь не направленная и не насыщаемая

**Прочность** определяется разностью энергий электронов в кристалле и в изолированных атомах, что в свою очередь зависит от структуры энергетических зон

# Комплексные соединения

химические вещества, в состав которых входят комплексные частицы

**Комплексная частица** — сложная химическая частица, все или часть связей в которой образованы по донорно-акцепторному механизму



**Комплексообразователь** — центральный атом комплексной частицы.

**Обычно** комплексообразователь — **атом металла**. Комплексообразователь **обычно положительно заряжен** и в таком случае именуется **металлоцентром**;

заряд комплексообразователя может быть также отрицательным или равным нулю

**Лиганды (Адденды)** — атомы или изолированные группы атомов, располагающиеся вокруг комплексообразователя.

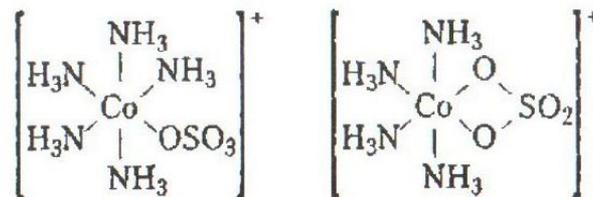
- в качестве лигандов могут выступать нейтральные молекулы ( $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{CO}$ ,  $\text{NH}_3$  и др.), анионы ( $\text{OH}^-$ ,  $\text{Cl}^-$ ,  $\text{PO}_4^{3-}$  и др.), а также катион водорода  $\text{H}^+$

**Внутренняя сфера** комплексного соединения — центральный атом со связанными с ним лигандами, то есть, собственно, комплексная частица

**Внешняя сфера** комплексного соединения — остальные частицы, связанные с комплексной частицей **ионной или межмолекулярными** связями, включая водородные

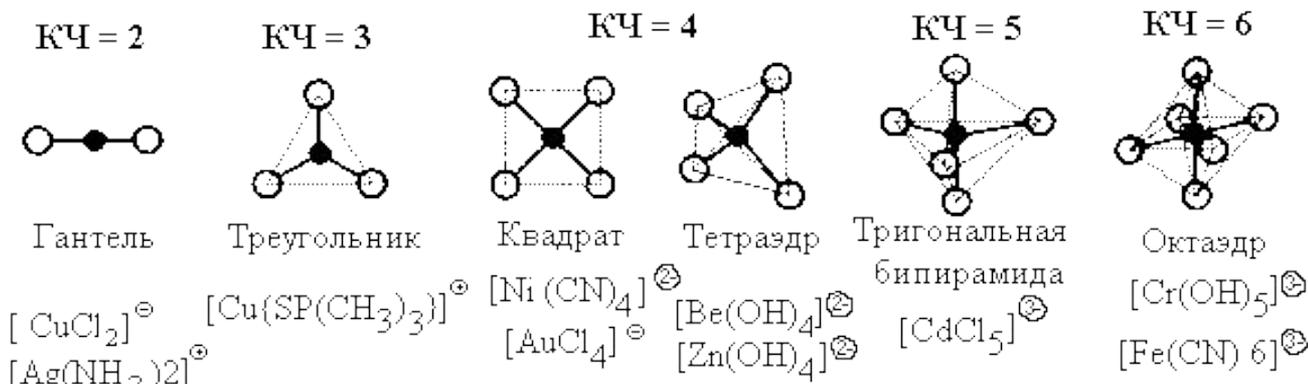
# Комплексные соединения

Дентатность лиганда определяется числом координационных мест, занимаемых лигандом в координационной сфере комплексообразователя



**Координационный полиэдр** — воображаемый молекулярный многогранник, в центре которого расположен атом-комплексобразователь, а в вершинах — частицы лигандов, непосредственно связанные с центральным атомом

**Координационное число (КЧ)** — число связей, образуемых центральным атомом с лигандами. Для комплексных соединений с монодентатными лигандами КЧ равно числу лигандов, а в случае полидентатных лигандов — числу таких лигандов, умноженному на дентатность



# Комплексные соединения

## Классификация

### По заряду комплекса

1) **Катионные** комплексы образованы в результате координации вокруг положительного иона нейтральных молекул ( $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{NH}_3$  и др.).

$[\text{Zn}(\text{NH}_3)_4]\text{Cl}_2$  — хлорид тетраамминцинка(II)

$[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]\text{Cl}_2$  — хлорид гексаамминкобальта(II)

2) **Анионные** комплексы: в роли комплексообразователя выступает атом с положительной степенью окисления, а лигандами являются простые или сложные анионы.

$\text{K}_2[\text{BeF}_4]$  — тетрафторобериллат(II) калия

$\text{Li}[\text{AlH}_4]$  — тетрагидридоалюминат(III) лития

$\text{K}_3[\text{Fe}(\text{CN})_6]$  — гексацианоферрат(III) калия

3) **Нейтральные** комплексы образуются при координации молекул вокруг нейтрального атома, а также при одновременной координации вокруг положительного иона — комплексообразователя отрицательных ионов и молекул.

$[\text{Ni}(\text{CO})_4]$  — тетракарбонилникель

# Комплексные соединения

## Классификация

### По числу мест, занимаемых лигандами в координационной сфере

- 1) Монодентатные лиганды.** Такие лиганды бывают нейтральными (молекулы  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{NH}_3$ ,  $\text{CO}$ ,  $\text{NO}$  и др.) и заряженными (ионы  $\text{CN}^-$ ,  $\text{F}^-$ ,  $\text{Cl}^-$ ,  $\text{OH}^-$ ,  $\text{SCN}^-$ , и др.)
- 2) Бидентатные лиганды.** Примерами служат лиганды: ион аминокислотной кислоты  $\text{H}_2\text{N} - \text{CH}_2 - \text{COO}^-$ , оксалат-ион  $^- \text{O} - \text{CO} - \text{CO} - \text{O}^-$ , карбонат-ион  $\text{CO}_3^{2-}$ , сульфат-ион  $\text{SO}_4^{2-}$ , тиосульфат-ион  $\text{S}_2\text{O}_3^{2-}$
- 3) Полидентатные лиганды.** Например, комплексоны — органические лиганды, содержащие в своём составе несколько групп  $-\text{C}\equiv\text{N}$  или  $-\text{COOH}$  (этилендиаминтетрауксусная кислота — ЭДТА). Циклические комплексы, образуемые некоторыми полидентатными лигандами, относят к хелатным (гемоглобин и др.)

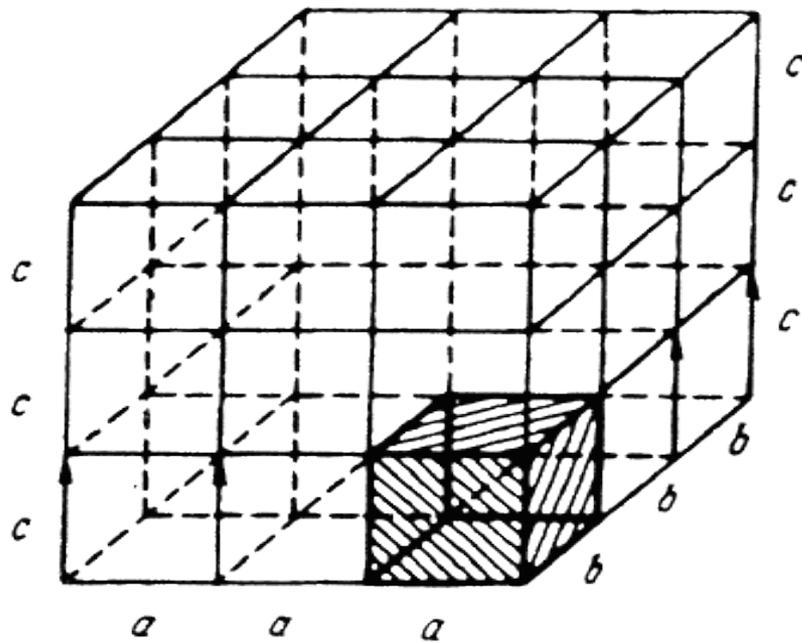
# Комплексные соединения

## Классификация

### По природе лиганда

- 1) **Аммиакаты** — комплексы, в которых лигандами служат молекулы аммиака, например:  $[\text{Cu}(\text{NH}_3)_4]\text{SO}_4$ ,  $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]\text{Cl}_3$ ,  $[\text{Pt}(\text{NH}_3)_6]\text{Cl}_4$  и др.
- 2) **Аквакомплексы** — в которых лигандом выступает вода:  $[\text{Co}(\text{H}_2\text{O})_6]\text{Cl}_2$ ,  $[\text{Al}(\text{H}_2\text{O})_6]\text{Cl}_3$  и др.
- 3) **Карбонилы** — комплексные соединения, в которых лигандами являются молекулы оксида углерода(II):  $[\text{Fe}(\text{CO})_5]$ ,  $[\text{Ni}(\text{CO})_4]$ .
- 4) **Ацидокомплексы** — комплексы, в которых лигандами являются кислотные остатки. К ним относятся комплексные соли:  $\text{K}_2[\text{PtCl}_4]$ , комплексные кислоты:  $\text{H}_2[\text{CoCl}_4]$ ,  $\text{H}_2[\text{SiF}_6]$ .
- 5) **Гидроксиокомплексы** — комплексные соединения, в которых в качестве лигандов выступают гидроксид-ионы:  $\text{Na}_2[\text{Zn}(\text{OH})_4]$ ,  $\text{Na}_2[\text{Sn}(\text{OH})_6]$  и др.

# Кристаллическое строение



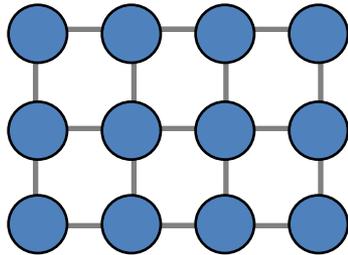
Кристаллические решётки веществ – это упорядоченное расположение частиц (атомов, молекул, ионов) в строго определённых точках пространства

Точки размещения частиц называют **узлами кристаллической решётки**

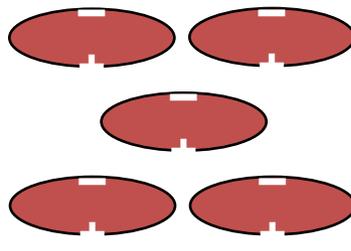
В зависимости от типа частиц, расположенных в узлах кристаллической решётки, и характера связи между ними различают 4 типа кристаллических решёток: ионные, атомные, молекулярные, металлические

# Типы кристаллических решеток

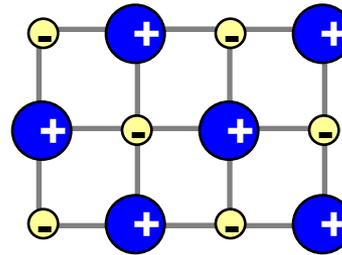
## Тип химической связи



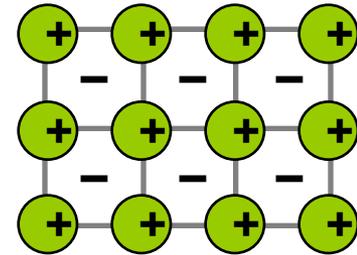
Атомная  
я



Молекулярная



Ионная  
я



Металлическая  
я

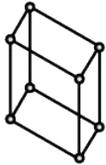
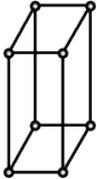
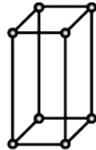
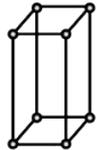
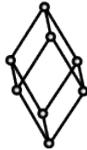
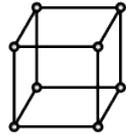
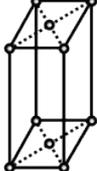
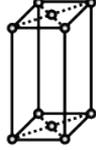
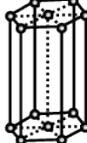
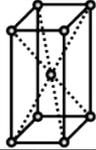
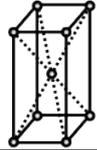
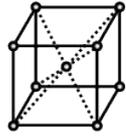
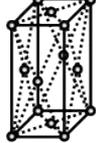
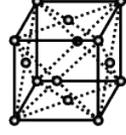


Свойства кристаллов определяются особенностями строящих кристаллическую решетку атомов и молекул, силами связей и взаимным расположением в пространстве – структурой кристалла

# Кристаллическое строение

## Типы (сингонии) кристаллических решеток

Решетки Бравэ

Тип решетки	Сингония						
	Три- клинная	Моно- клинная	Ромби- ческая	Тетраго- нальная	Триго- нальная (ром- боэдриче- ская)	Гексаго- нальная	Кубическая
Примитивный						—	
Базоцентри- рованный	—			—	—		—
Объемо- центрированный	—	—			—	—	
Гранецентри- рованный	—	—		—	—	—	

кубическая  $a=b=c$ ,  $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$

тетрагональная  $a=b \neq c$ ,  $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$

гексагональная  $a=b \neq c$ ,  $\alpha=\beta=90^\circ$ ,  
 $\gamma=120^\circ$

тригональная  $a=b=c$ ,  $\alpha=\beta=\gamma \neq 90^\circ$

ромбическая  $a \neq b \neq c$ ,  $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$

моноклинная  $a \neq b \neq c$ ,  $\alpha=\gamma=90^\circ$ ,  $\beta \neq 90^\circ$

триклинная  $a \neq b \neq c$ ,  $\alpha \neq \beta \neq \gamma$

# Кристаллическое строение

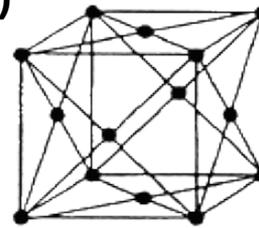
**Координационным числом** называется число атомов, находящихся на наиболее близком и равном расстоянии от данного атома

**Плотность кристаллической решетки**, т. е. объем, занятый атомами, характеризуется коэффициентом компактности

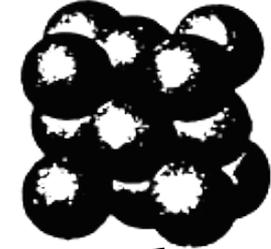
$$Q = \frac{4\pi R^3 n}{3V} \cdot 100,$$

гранецентрированная кубическая (ГЦК)

Z=12

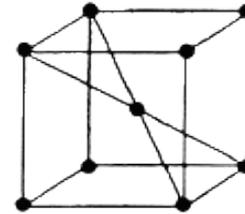


a

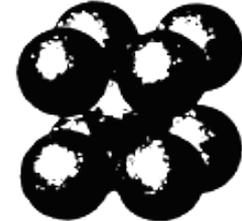


объемноцентрированная кубическая (ОЦК)

Z=8

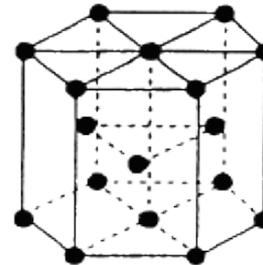


b



гексагональная плотноупакованная (ГП)

Z=12



в



*Типы элементарных ячеек кристаллических решеток металлов и схемы упаковки в них атомов*

# Реальные кристаллы

- *дефекты кристаллической решетки или дефектное строение кристалла*
- *условия минералообразования (Т, Р, геометрия полостей, в которых происходит рост, примеси и многие другие).*

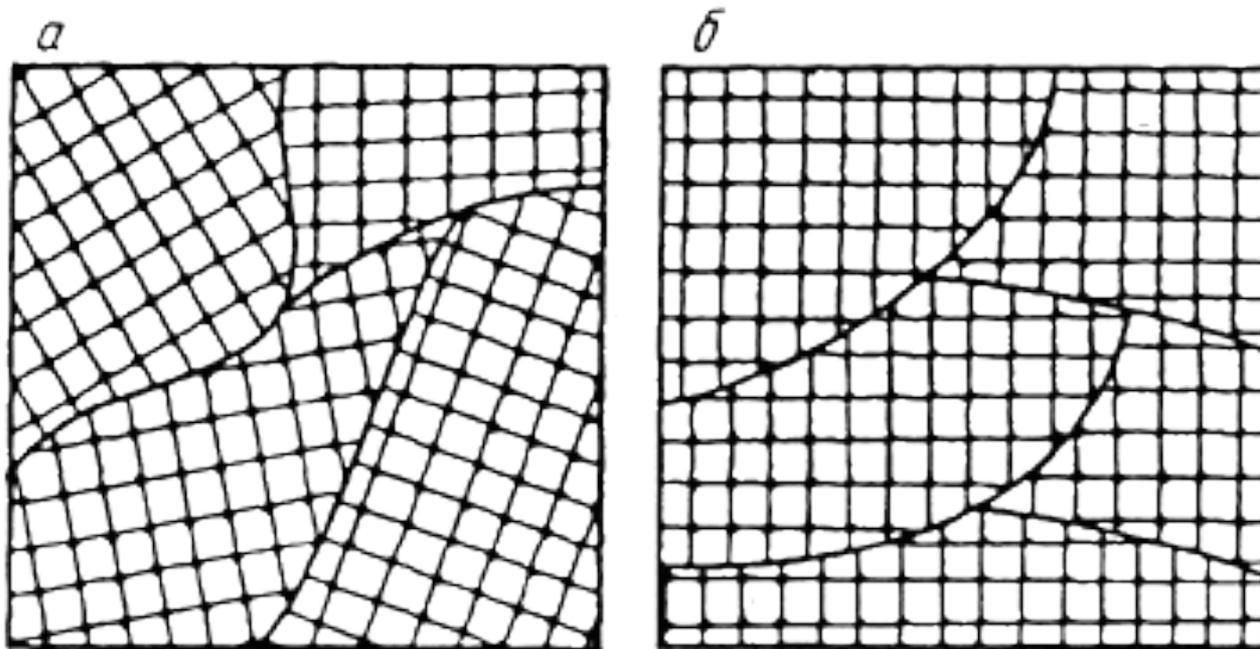


**идеальный кристалл**, форма которого обусловлена только кристаллической структурой



**реальный кристалл**, содержащий соответствующий набор дефектов и имеющий искажения обусловленные условиями роста

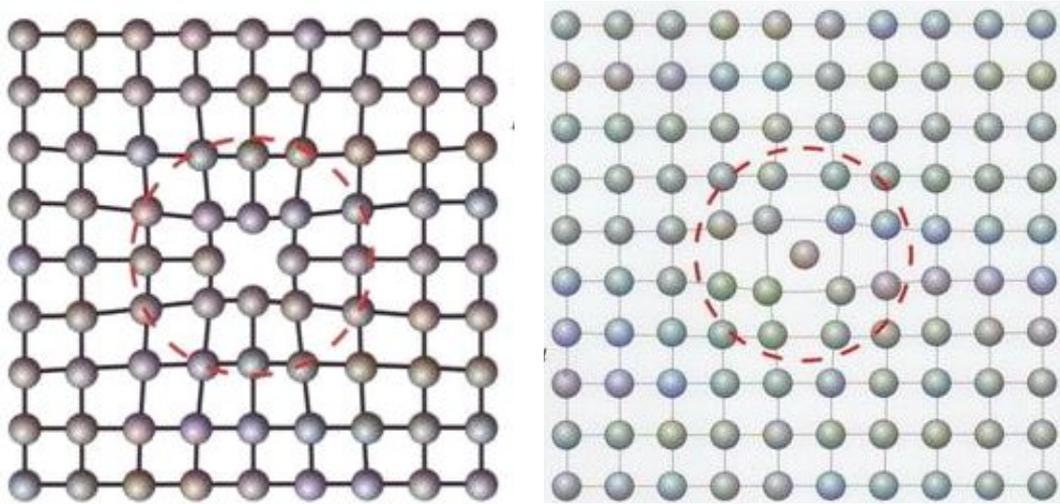
# Реальные кристаллы



Ориентировка кристаллических  
решеток

# Дефекты строения

## *ТОЧЕЧНЫЕ ДЕФЕКТЫ*



характеризуются малыми размерами во всех трех измерениях

Величина их не превышает нескольких атомных диаметров

**К точечным дефектам относятся:**

- а) свободные места в узлах кристаллической решетки — вакансии (дефекты Шоттки)
- б) атомы, сместившиеся из узлов кристаллической решетки в междоузельные промежутки — дислоцированные атомы (дефекты Френкеля)
- в) атомы других элементов, находящиеся как в узлах, так и в междоузлиях кристаллической решетки — примесные атомы

# Дефекты строения

## ***ЛИНЕЙНЫЕ ДЕФЕКТЫ***

Линейные дефекты характеризуются малыми размерами в двух измерениях, но имеют значительную протяженность в третьем измерении

Наиболее важный вид линейных дефектов — **дислокации** (лат. dislocation — смещение)

# Дефекты строения

## *ЛИНЕЙНЫЕ ДЕФЕКТЫ*

