

Министерство образования и науки РФ
Федеральное государственное бюджетное образовательное
учреждение высшего образования
«Пензенский Государственный Университет»
Факультет приборостроения, информационных технологий и
электроники
Кафедра «Физика»

Курсовая работа по дисциплине:

«Основы кристаллофизики»

на тему: «Типы связей в кристалле»

Выполнила: ст. гр. 14ПФ1

Машкарina А.А.

Проверил: к.ф.-м.н.

Грозная Е.В.

Принято к защите 11.12.2017 Смущ

Дата, подпись преподавателя

Оценка отлично Смущ

Оценка, подпись преподавателя

Пенза 2017 год

Министерство образования и науки РФ
Федеральное государственное бюджетное образовательное
учреждение высшего образования
«Пензенский государственный университет»
Факультет приборостроения, информационных технологий и
электроники
Кафедра «Физика»

«УТВЕРЖДАЮ»

Заведующий кафедрой


М.Б.Семенов
(подпись, инициалы, фамилия)

«11» декабря 2017г.

ЗАДАНИЕ

по курсовой работе студента

Машкарина Анастасия Александровна

по дисциплине «Основы кристаллофизики»

Группа 14ПФ1

1. Тема работы: Проведение сравнения кристаллов с разными типами связи
2. Руководитель к.ф.-м.н. Грозная Е.В.
3. Срок сдачи студентом законченной работы 11.12.2017
4. Перечень подлежащих разработке вопросов:
 - исследование типов связи в кристаллах, а именно молекулярной, ионной, металлической, ковалентной.
 - изучить кристаллы с водородными связями
 - провести сравнение кристаллов с разными типами связи

Подпись студента

Подпись преподавателя




Содержание

Введение.....	4
1.Молекулярные кристаллы.....	6
2.Ковалентные кристаллы	9
3.Металлические кристаллы	12
4.Ионные кристаллы	15
5.Кристаллы с водородными связями	20
Заключение	25
Список использованных источников	26

Введение

Окружающий нас мир содержит множество различных типов твердых тел. Сюда относятся и биологические вещества (дезоксирибонуклеиновая кислота и ферменты), и геологические материалы (гранит и слюда), тысячи металлических сплавов и миллионы органических соединений. Все эти материалы построены из атомов менее ста химических элементов. Однако физика твердого тела к настоящему времени достаточно основательно и глубоко изучила главным образом только монокристаллы элементов и простых соединений. Исследования, проведенные на монокристаллах, всегда намного более ценны и несут в себе намного большую информацию, чем исследования, проведенные на поликристаллических образцах. Огромное и все возрастающее практическое значение имеют, однако, и аморфные материалы.

Наблюдаемые различия между типами твердых тел обуславливаются различиями в характере распределения электронов и ядер в атомах и молекулах и, в особенности, в характере распределения наиболее удаленных от ядра (валентных) электронов и ионных остовов атомов.

Целью курсовой работы является исследование типов связи в кристаллах.

Для достижения цели были поставлены следующие задачи:

- Изучить особенности каждого типа связи в кристаллах;
- Определить характеристики химической связи в кристаллах.

При написании данной курсовой работы были использованы труды ученых, специализирующихся в данной области, таких как Ч.Киттель, Н.Ашкрофт, М.П. Шаскольская.

Связи между частицами в структуре кристалла можно подразделить на четыре предельных типа: ионные, ковалентные, металлические и молекулярные, кристаллы с водородной связью. В большинстве

кристаллических соединений имеются связи нескольких типов, характеризуют как смешанные связи.

1.Молекулярные кристаллы

Кристаллы, в которых преобладает молекулярная связь, возникающая между любыми частицами (ионами, атомами, молекулами), называют молекулярными. Доля этой связи во многих кристаллах незначительна по сравнению с другими, более прочными связями.

Однако, в таких кристаллах, как, например, кристаллы инертных газов эта связь единственная, поэтому она определяет структуру и свойства кристаллов.

Инертные газы при низких температурах могут переходить в жидкое и даже твердое состояние. Однако при сближении атомов инертных газов обмен электронами не возможен, так как они имеют полностью достроенные энергетические уровни. А возникновение сил притяжения между атомами объясняют их мгновенной поляризацией при сближении (рисунок 1)

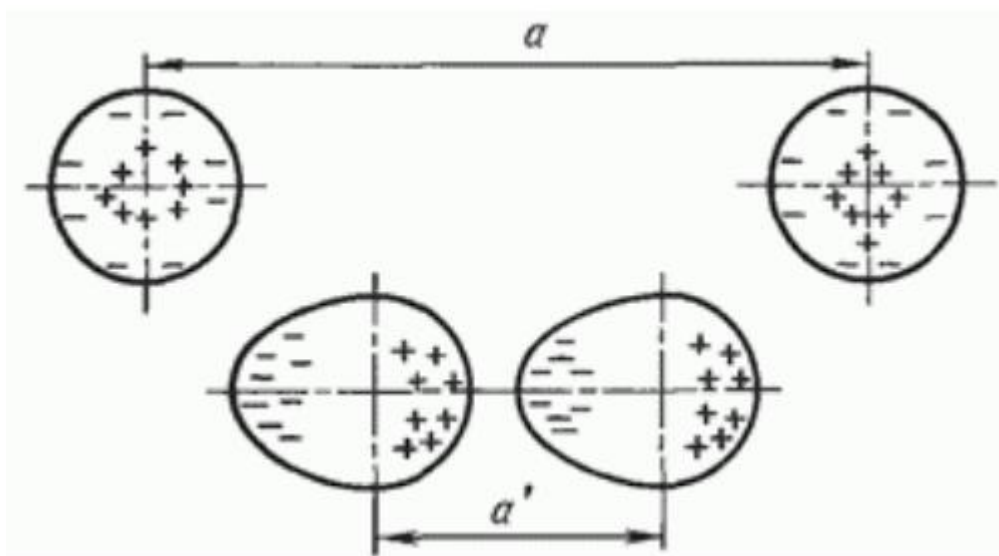


Рисунок 1- Образование диполей при сближении атомов аргона

Аналогичные связи действуют между молекулами с насыщенными связями в кристаллах двухатомных газов H_2 , O_2 , Cl_2 , существование которых возможно только при низких температурах; в кристаллах I_2 , H_2O , CO_2 , а также в кристаллах CH_4 и некоторых органических веществ – при нормальных условиях[1].

Силы Ван-дер-Ваальса, действующие между частицами, не имеют направленного характера, так как мгновенный диполь образуется с каждым из соседних атомов. При этом атомы компактно укладываются в кристаллическую решетку.

Энергия связи сил Ван-дер-Ваальса в молекулярных кристаллах невелика, поэтому они имеют низкие температуры плавления и легко возгоняются. Молекулярные кристаллы являются диэлектриками, так как кристалл состоит из электрически нейтральных частиц, у которых энергетические зоны полностью построены[2].

Строение молекулярных кристаллов определяется принципом максимального заполнения пространства, симметрией молекул и их укладки. Укладку определяют ван-дер-ваальсовы силы (энергия связи $\sim 1-3$ ккал/моль). Максимальное заполнение пространства молекулами произвольной формы достигается выделением отдельных слоев. Молекулы в слоях могут располагаться параллельными и антипараллельными рядами или "ёлочкой" (рисунок 2). При этом обычно достигается координационное число 12 или 14 (реже 8, 10, 16 и др.).

Молекулы располагаются так, что выступы одних молекул (обычно атомы Н) входят в углубления или промежутки соседних. Это способствует возникновению в молекулярных кристаллах скользящих плоскостей или винтовых осей (плоскости симметрии встречаются редко, см. Симметрия кристаллов). Существуют определенные соотношения между симметрией молекул и молекулярных кристаллов.

Чаще всего молекулярные кристаллы имеют моноклинную, ромбоэдрическую или триклинную структуру; реже более высокосимметричную - тетрагональную, гексагональную и кубическую[3].

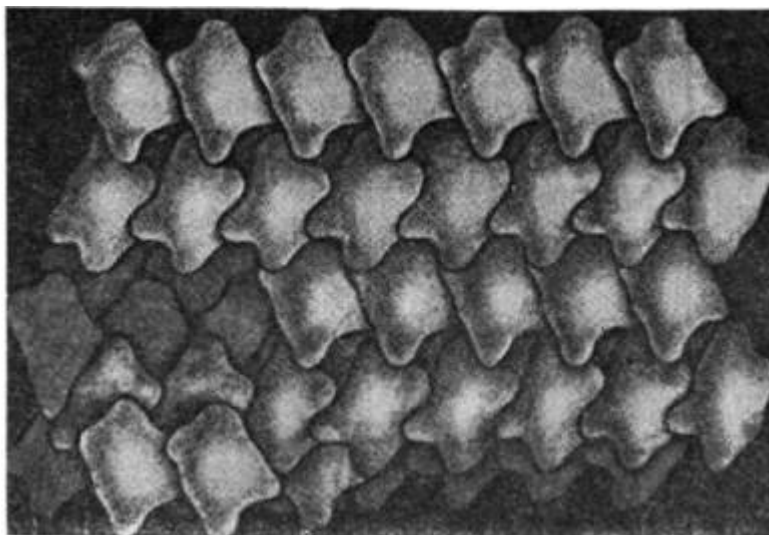


Рисунок 2. Укладка слоев органических молекул.

Вследствие ненаправленности и ненасыщенности ван-дер-ваальсовых сил, образующиеся кристаллы, как правило, имеют плотноупакованную структуру, аналогично ионным кристаллами. Кристаллы инертных газов имеют гранецентрированную кубическую (ГЦК) решетку. Если структурными компонентами кристалла являются асимметричные молекулы, то формируются плотнейшие упаковки с деформированной решетки. Например, йод и диоксид углерода кристаллизуется в деформированную вдоль оси молекулы ГЦК структуру (рисунок 3)[4].

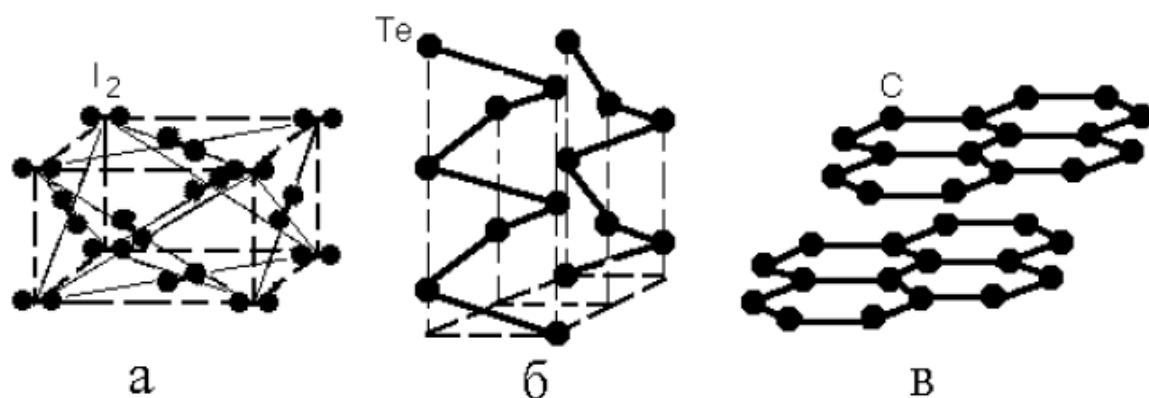


Рисунок 3. Структура а)йод б)теллур в)графит

Ленточные или цепочечные кристаллы, в которых цепи сформированы за счет ковалентных связей, координируются ван-дер-ваальсовскими силами. Так, кристаллический теллур (рисунок 3б) содержит цепочки -Te-Te-Te и образует ромбоэдрическую элементарную ячейку. Такую же структуру имеет и кристаллический полиэтилен, ковалентные цепочки которого состоят из звеньев $-CH_2-$. Хорошо известная структура графита (рисунок 3. в.) формируется при ван-дер-ваальсовом взаимодействии плоских слоев углерода, внутри которых связь также ковалентная. Графит имеет две разновидности - гексагональную и ромбоэдрическую. В первой чередование углеродных слоев идет по закону (*abab...*), во второй - по закону (*abcabc...*). Следует отметить, что как слоистые, так и цепочечные кристаллы по своим свойствам сильно анизотропны[5].

2. Ковалентные кристаллы

Кристаллы, в которых преобладает ковалентный тип связи, называют ковалентными. Данный тип связи устанавливается в результате образования устойчивых соединений путем обобществления электронов определенными атомами.

Ковалентные кристаллы образуют чаще всего элементы IV группы и близкие к ней V и VI группы подгруппы в периодической системе Д.И. Менделеева: углерод, кремний, германий, сурьма и др. При взаимодействии атомов наблюдается обобществление своих валентных электронов с соседними атомами, при этом происходит заполнение валентной зоны. Каждая связь образуется парой электронов, которые движущихся по замкнутым орбитам между двумя атомами.

Число атомов n с которыми происходит обобществление электронов, зависит от валентности элемента и может быть определено по формуле:

$$n = 8 - N,$$

где N – валентность элемента.

В качестве примера можно привести углерод, который в природе существует в двух аллотропных формах (рисунок 4). Обе решетки характеризуются наличием у каждого атома четырех соседей, так как атом углерода имеет четыре валентных атома ($n = 4$), т.е. вступает в обменное взаимодействие с четырьмя соседними атомами.

В решетке графита один из соседних атомов находится на значительном удалении. Между тремя атомами в плоскости основания кристаллической решетки действуют ковалентные силы, однако между атомами основания возникают небольшие по значению силы Ван-дер-Ваальса. Поэтому при деформировании графита в первую очередь разрушаются связи между слоями, чем и объясняется низкая твердость графита. Коэффициент линейного расширения велик в направлении сил Ван-дер-Ваальса, в таблице 1 приведены значения температурных коэффициентов линейного расширения по трем координатным осям.

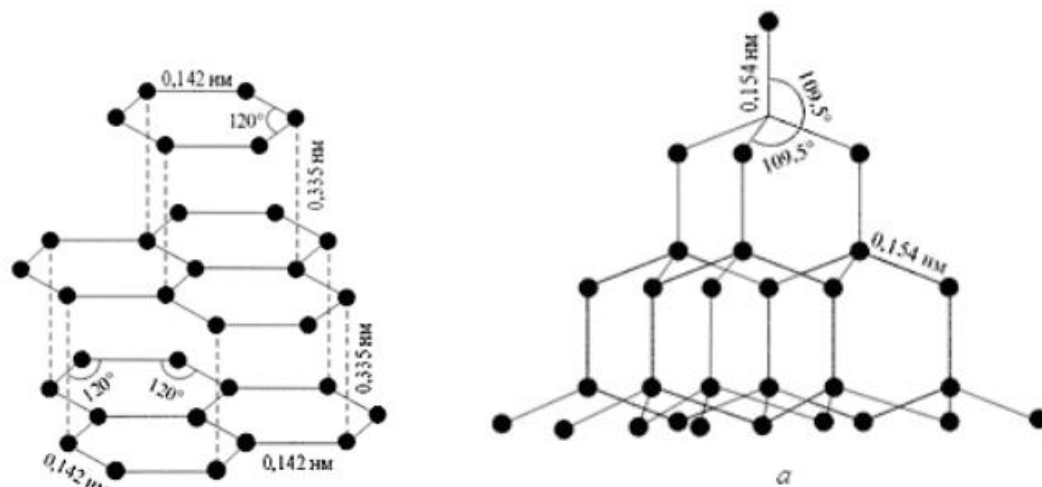


Рисунок 4- Кристаллическое строение алмаза (а) и графита (б)

Так как ковалентная связь характеризуется направленностью, поэтому атомы в ковалентных кристаллах укладываются некомпактно и образуют кристаллические структуры с небольшим координационным числом.

Ковалентные кристаллы характеризуются высокими температурами плавления, поскольку имеют большую энергию связи[1].

Таблица 1

Температурный коэффициент линейного расширения кристаллов [7, с. 14]

Система	Кристалл	$\alpha_1, ^\circ\text{C}^{-1}$	$\alpha_2, ^\circ\text{C}^{-1}$	$\alpha_3, ^\circ\text{C}^{-1}$
Моноклинная	Нитроанилин	150	8	24
Ромбическая	U_α	82	-1,5	23
Гексагональная	Графит	-1,5	-1,5	28
	Zn	8	8	65
Кубическая	Алмаз	0,6	0,6	0,6
	Cu	17	17	17

Ковалентные кристаллы являются полупроводниками и даже диэлектриками, так как наблюдается заполнение валентных зон при таком виде связи. Алмаз является диэлектриком, а графит хорошо проводит электрический ток. Хорошая электропроводимость графита объясняется тем, что не все связи ковалентные, и даже наличие одной металлической связи из четырех связей может обеспечивать наличие свободных носителей электрического тока.

При нагреве электрическое сопротивление снижается, т.е. температурный коэффициент электрического сопротивления у ковалентных кристаллов имеет отрицательное значение. К ковалентным кристаллам относятся многие сложные кристаллические вещества, состоящие из разнородных атомов, например, нитрид алюминия, карбид кремния и руд других веществ[5].

Под строением ковалентных кристаллов будем понимать взаимное расположение атомов в их кристаллической решетке. Так как ковалентная связь направлена и образуется в тех направлениях где локализуется электронная плотность, то она характеризуется определенным углом(φ) и

длиной (l), а координатное число зависит уже не от соотношения радиусов атомов, а от типа связывающих орбиталей, точнее, от их конфигурации.

Длина ковалентной связи есть среднее расстояние между соседними атомами в остове. Поскольку в образовании связи могут принимать участие разные орбитали, то длина связи зависит от их количества, то есть кратности связи.

Одномерный ковалентный остов характерен для s и sp-связывающих орбиталей, когда образуется линейная и цепочечная структуры. Представителями таких твердых веществ являются, например, сера, селен, теллур, а структуре которых цепи и кольца (характерные для серы) с ковалентной связью связаны между собой ван-дер-ваальсовым взаимодействием[5].

3.Металлические кристаллы

Металлические кристаллы – это кристаллы, в которых преобладает металлический тип связи. Данный вид кристаллов образуют элементы всех подгрупп А и I – III подгрупп в периодической системы. В таких кристаллах при взаимодействии с элементами других групп атомы легко отдают свои валентные электроны и превращаются в положительные ионы. Это объясняется тем, что атомы металлов небольшое количество валентных электронов, которые слабо связаны с ядром[6].

При взаимодействии валентные энергетические зоны атомов теряют связь со своими атомами, они перекрываются, образуя общую зону со свободными подуровнями, что дает возможность валентным электронам свободно перемещаться в пределах этой зоны, обеспечивая хорошую электрическую проводимость. При этом валентные электроны обобществляются атомами, поскольку они принадлежат не какому-то конкретному атому, а являются общими для всех атомов. Температурный коэффициент электрического сопротивления у металлических кристаллов

имеет положительное значение, т.е. электрическое сопротивление при нагреве растет.

Металлическая связь является ненаправленной связью. Поэтому для кристаллических структур металлов характерно высокое координационное число и большая компактность. Отсутствие сильных направленных связей и образование плотноупакованных структур определяют способность пластически деформироваться, изменяя форму без разрушения, т.е. металлические кристаллы более пластичные и менее твердые, чем ковалентные. Поэтому при изготовлении металлопродукции широко применяют методы пластического деформирования – ковку, прокат, волочение, штамповку.

Поскольку энергия металлической связи в металлических кристаллах несколько ниже, чем ковалентной, поэтому металлы в большинстве случаев по сравнению с ковалентными кристаллами имеют более низкие температуры плавления, модуль упругости, но более высокий температурный коэффициент линейного расширения.

Для большинства случаев с увеличением энергии связи растут температура плавления, модуль упругости, энергия активации самодиффузии, а коэффициент линейного расширения, наоборот уменьшается[2].

Структура металлов.

Свободные электроны металла определяют не только электрические и другие свойства, но и кристаллическую структуру. Благодаря ненасыщенности и ненаправленности металлической связи, металлы кристаллизуются в структурах, отвечающих плотнейшим упаковкам с большими координационными числами- 8 и 12, и формируют относительно простые структуры: кубическую (объемно- и гранецентрированную) и гексагональную (рисунок 5). Лишь небольшое число металлов имеет более сложные типы решеток.

В объемно-центрированную кубическую (ОЦК) структуру (рисунок 5.а) кристаллизуется щелочные некоторые щелочноземельные металлы, а также Мо, Та.

Гранецентрированную кубическую (ГЦК) (рисунок 5.б) решетку имеют Al, Fe, Cu, Ag, Au, Pt и другие металлы. Гексагональную плотнейшую упаковку (ГПУ) (рисунок 5.в) формируют Be, Mg, Ti, Cd, Hf и др.

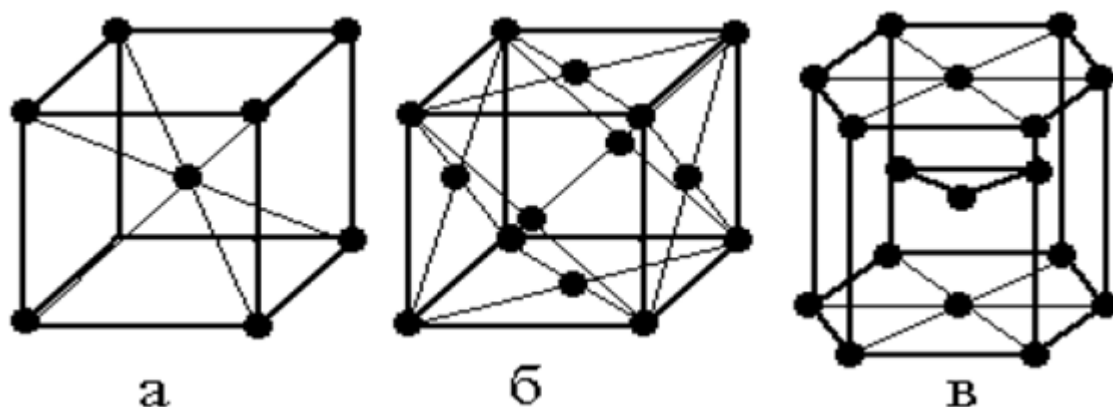


Рисунок 5- Кристаллические решетки металлов. а- объемно-центрированная кубическая, б- гранецентрированная кубическая, в- гексагональная плотнейшая упаковка

Один и тот же элемент в зависимости от внешних условиях может кристаллизоваться в различных структурах. Это явление получило название полиморфизм. Практически все металлы обладают полиморфизмом. Например, Na и Li в обычных условиях образуют кристаллы с кубической объемноцентрированной решеткой, а при низких температурах- с гексагональной. Полиморфные превращения приводят иногда к потере металлических свойств, например при превращении белого олова в серое.

В некоторых металлах, особенно благородных, в атомах которых d-оболочки не очень сильно связаны с ядром, проявляются черты ковалентной и даже молекулярной связи[5].

4.Ионные кристаллы

Образование ионного типа связи наблюдаются в сложных кристаллах, состоящих из элементов различной валентности. Такие кристаллы называют ионными.

При сближении атомов и перекрытии валентных энергетических зон между элементами происходит перераспределение электронов. При этом электроположительный элемент теряет валентные электроны, превращаясь в положительный ион, а электроотрицательный – приобретает их, достраивая свою валентную зону до устойчивой конфигурации, как у инертных газов. Таким образом, в узлах кристаллической решетки ионного кристалла располагаются ионы.

Типичным представителем ионных кристаллов являются кристаллы поваренной соли (NaCl). Натрий имеет на внешней орбите один электрон, хлор – семь электронов. При переходе одного электрона атома натрия на орбиту хлора приводит к образованию двух разнозаряженных ионов с устойчивой конфигурацией (рисунок 6).

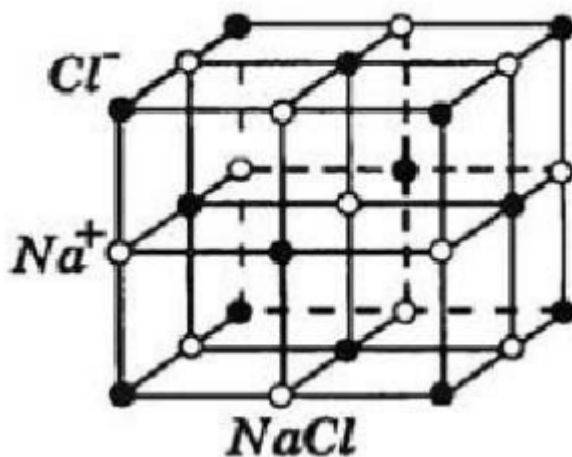


Рисунок 6-Ионная решетка каменной соли NaCl

Строение твердого вещества с ионным типом связи характеризуется тем, что каждый положительно заряженный ион в веществе окружен

отрицательно заряженным ионом, т.е. атомы в веществе располагаются строго упорядоченно.

Координационное число для ионных кристаллов определяется соотношением радиусов металлического и неметаллического ионов, поскольку каждый ион стремится притянуть к себе как можно больше ионов противоположного знака.

При нагреве соотношение ионных радиусов может изменяться, так как у неметалла он возрастает интенсивнее, чем у металла, что приводит к изменению типа кристаллической структуры, т.е. к полиморфизму[7].

Энергия связи ионного кристалла близка к энергии связи ковалентного кристалла, поэтому ионные кристаллы имеют высокие модуль упругости и температуру плавления, но низкие коэффициенты линейного расширения и сжимаемости. Вследствие перераспределения электронов заполнение энергетических зон делает ионные кристаллы полупроводниками или диэлектриками. Наличие сильной связи определяет высокую твердость[8].

Энергия ионного кристалла.

Выражение для энергии взаимодействия пары ионов (Z_1, Z_2) , находящихся на расстоянии a_{1-2} , согласно теории Борна-Ланде, имеет два члена:

$$E_{1-2} = -\frac{Z_1 Z_2 e^2}{a_{1-2}} + \frac{b}{a_{1-2}^n} \quad (1)$$

где e – заряд электрона, b – постоянная сил отталкивания.

Первый член в уравнении (1) соответствует потенциалу сил притяжения, а второй сил отталкивания (рисунок 7).

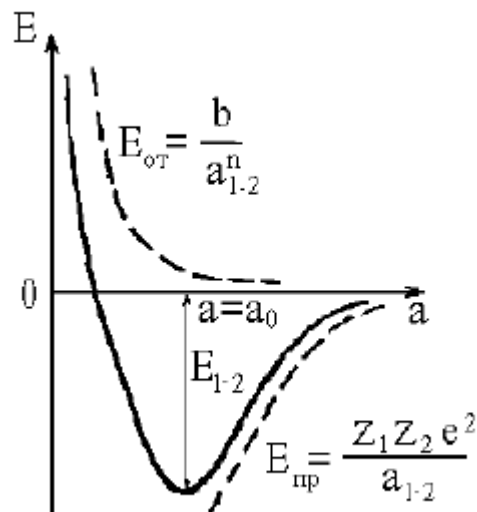


Рисунок 7-Зависимость энергии взаимодействия двух ионов на расстоянии между ними

В устойчивом состоянии значение энергии соответствует энергии связи. Полная энергия решетки есть энергия, необходимая для разделения кристалла на отдельные ионы и удаление их друг на друга на бесконечно большое расстояние:

$$E = -\frac{ANZ_1Z_2e^2}{a}\left(1 - \frac{1}{n}\right) \quad (2)$$

Структура ионных кристаллов.

При расчете энергии ионного кристалла в соответствии с кулоновским приближением в значении постоянной Маделунга учитывается число взаимодействующих атомов, и наибольший вклад вносят ближайшие соседние атомы, число которых называется координационным числом. Так, в структурах хлористого натрия оно равно шести, то есть каждый ион натрия окружен шестью ионами хлора и наоборот.

В силу того, что кулоновское взаимодействие, преобладающее в ионных кристаллах, не обладает направленностью и насыщенностью, каждый ион будет стараться окружить себя максимальным числом ионов противоположного знака. Атомы или ионы большинства химических

элементов обладают сферической симметрией, поэтому строение таких твердых тел можно представить как пространственную упаковку шаров. Очевидно, что при наличии атомов двух типов их взаимное расположение будет определяться соотношением их радиусов и наиболее плотная упаковка будет из шаров одинакового радиуса. В пространстве между шарами будут пустоты, вид которых определяется количеством окружающих их шаров. Так, четыре компланарно соприкасающихся шара образуют тетраэдрическую пустоту, а шесть- октаэдрическую. Каждый шар окружен шестью октаэдрическими пустотами и восемью тетраэдрическими, то есть число тетраэдрических пустот в два раза больше числа октаэдрических. Если в пустоты между шарами радиусом R поместить шары меньшего радиуса r так, что бы они касались окружающих шаров, то несложно показать, что при тетраэдрическом окружении отношение $r/R=0,22$, а при октаэдрическом- $0,41$. Поскольку плотнейшие упаковки являются основой строения большинства твердых тел, то соотношение эффективных радиусов структурных единиц предопределяет их взаимное расположение, а следовательно, и координационное число. Особенно это характерно для ионных кристаллов, структуру которых можно предопределить по соотношению радиусов составляющих ионов[3].

Важным параметром любой структуры является плотность упаковки атомов в кристаллической решетке, или коэффициент компактности (K), под которым понимают отношение объема, занимаемого атомами в кристаллической решетке (V_a), к ее полному объему (V). Расчет K проводят в приближении шаров для элементарной ячейки.

$$K = \frac{V_a}{V} = \frac{4\pi n R^3}{3a^3} \quad (3)$$

Знание коэффициента компактности позволяет рассчитать теоретическую плотность атомного кристалла. Для этого достаточно плотность атома умножить на коэффициент компактности. Расчетная формула имеет вид

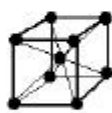
$$\rho = \frac{3MK}{4\pi NR^3} \quad (4)$$

где M - молекулярный вес, N - число Авогадро.

В таблице 2 приведены типы координационных полиэдров для некоторых структур с известными координационными числами[9].

Таблица 2

Типы координационных полиэдров и их характеристики для различных координационных чисел

Координационное число, k	Отношение радиусов, r/R	Коэффициент компактности, K	Тип структуры	Пример	Конфигурация
3	0,1	-	Плоская тригональная	BN	
4	0,22	0,34	Тетраэдрическая	C, Si, Ge	
6	0,41	0,52	Октаэдрическая, простая кубическая	NaCl	
8	0,73	0,68	Кубическая объемноцентрированная	CsCl	
12	1,0	0,73	Плотнейшая упаковка: Гексагональная (г.п.у.) Кубическая гранецентрированная (к.п.у.)	Металлы	 

5. Кристаллы с водородными связями

При анализе тепловых эффектов реакций и некоторых свойств таких, как температуры плавления и кипения, соединений, имеющих в составе группы -ОН, NH, -FН и некоторые другие, в состав которых входит водород было установлено, что энергия взаимодействия между такими молекулами больше, чем рассчитанная для эффектов Кисома, Дебая и Лондона. Так, энергия связи в ионе (HF_2^-) около 37 ккал/моль что близко уже к значениям ионной и даже ковалентной связей. Таким образом, существует особый вид взаимодействия между протонсодержащими группами, который и был назван водородной связью. Это особый вид взаимодействия, характерный для водорода и достаточно электроотрицательного элемента (F, ON, реже Cl, S). Водородная связь бывает внутримолекулярной и меж молекулярной, причем линейная конфигурация ядер X, H, Y обычно наиболее выгодна.

Природа водородной связи может рассматриваться с позиции электростатического (ионного) и ковалентного приближения. В первом случае, за счет высокой электроотрицательности элемента, образующего связь с водородом, последний практически лишается своего единственного электрона, и образуется молекула с большим дипольным моментом.[1]

С другой стороны, практически "голый" протон, обладая большой поляризующей способностью, поляризует электроотрицательный атом соседней молекулы, создавая сильное электростатическое взаимодействие.

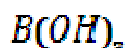
Однако некоторые черты водородной связи такие, как направленность и способность образовывать структуры с координационными числами 2, 3, и 4, указывают на ее близость к ковалентной связи. Действительно, практически свободные $1s$ орбитали иона водорода способны принять неподеленную пару электронов соседнего электроотрицательного атома, образуя донорно-акцепторный тип связи. Ковалентная составляющая водородной связи оказывает определяющее влияние на формирование

твердых кристаллических структур некоторых соединений, содержащих указанные группы. Рассмотрим несколько примеров.

1. Кристаллическая HF образуется за, где чередуются ковалентная и водородная связи между водородом и фтором.

Цепи связаны между собой уже силами Ван-дер-Ваальса. Атомы водорода расположены почти посередине прямых, соединяющих соседние атомы фтора. Водород несколько смещен к одному из атомов фтора, так как длина ковалентной связи $H-F$ 0.092-0.095 нм, а водородной связи $H\cdots F$ 0.10-0.15 нм, угол $F-H\cdots F$ составляет 120.1°

2. Примером слоистых или двумерных структур является твердая



борная кислота: H_3BO_3 , или Водородная связь слоях довольно прочная, сами слои связаны между собой более слабыми силами Ван-дер-Ваальса. Следует отметить, что значительная прочность водородных связей в борной кислоте обуславливает ее достаточно высокую температуру плавления (более $100^\circ C$) и делает ее чуть ли не единственной твердой неорганической кислотой при обычных условиях.

3. Типичными представителями трехмерных кристаллов с водородной



связью являются , образующий структуру вюрцита и кристаллическая H_2O (лед, также имеющая алмазоподобную структуру). Молекулы H_2O в кристаллах льда образуют искаженные тетраэдры, в которых кислород образует с водородом две ковалентные связи (длина связи 0.1 нм) и две связи водородные (0.17 нм). Коэффициент компактности такой структуры меньше, чем у обычной алмазоподобной, поэтому плотность льда меньше плотности воды. Плавление льда сопровождается сначала

разрушением дальнего порядка с сохранением тетраэдрической конфигурации кластеров, которая полностью разрушается только при $+4^{\circ}\text{C}$, когда вода имеет наибольшую плотность. Заметим, что водородная связь играет важную роль в строении и синтезе многих белковых структур, обуславливая даже механизм наследственности.

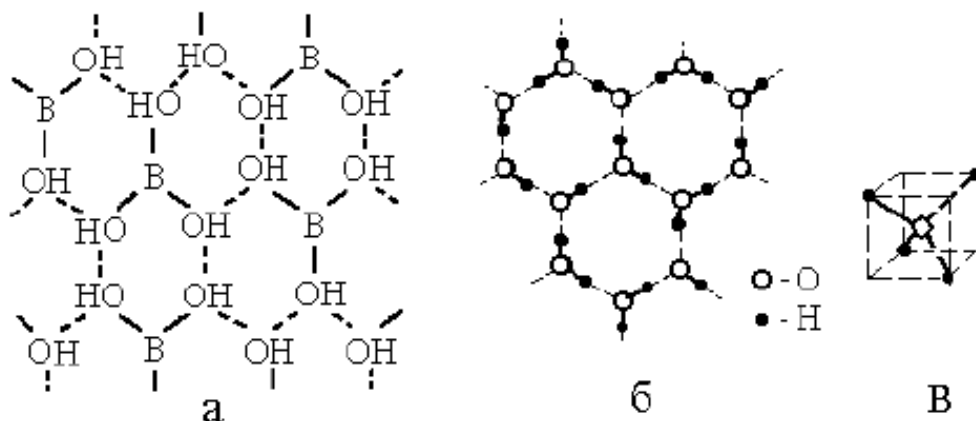
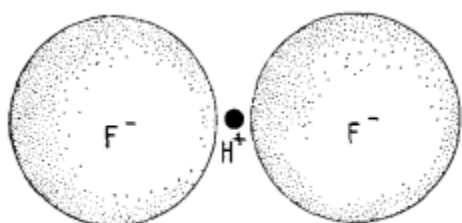


Рисунок 9-Схема связей в слоях твердой борной кислоты (а) и изображение структуры льда (б- плоское; в- пространственное расположение связей) Пунктиром показаны водородные связи

Поскольку нейтральный водород имеет только один электрон, он должен обладать одной связью, позволяющей ему вступать в соединение лишь с каким-либо одним атомом другого сорта. Однако известно, что при некоторых условиях атом водорода может быть связан значительными силами притяжения одновременно с двумя атомами, образуя тем самым так называемую водородную связь между ними [6]; энергия такой связи— примерно 0,1 эВ. Считают, что водородная связь имеет в основном ионный характер, поскольку она возникает лишь между наиболее электроотрицательными атомами, в частности между атомами F, O и N. В предельном случае, когда водородная связь носит чисто ионный характер, атом водорода теряет свой единственный электрон и, отдавая его одному из двух атомов молекулы, превращается в протон, который и осуществляет связь между атомами. Малые размеры протона не позволяют ему иметь

ближайшими соседями более чем два атома; атомы столь сильно сближены, что на таком коротком участке не могут поместиться более чем два атома. Таким образом, водородная связь осуществляется только между двумя атомами (рисунок 9а). Водородная связь является важнейшей формой взаимодействия между молекулами H_2O и обуславливает вместе с электростатическим притяжением электрических дипольных моментов удивительные физические свойства воды и льда [10]. Водородная связь ограничивает размеры белковых молекул и обуславливает их обычно наблюдаемую геометрическую структуру. Она играет также важную роль в таких явлениях, как, например, полимеризация фтористоводородных соединений и муравьиной кислоты. Она существенна для объяснения свойств



некоторых сегнетоэлектрических кристаллов, например дигидрофосфата калия (KDP), и играет важную роль в молекулярной генетике, обуславливая отчасти возможность такого процесса, как спаривание двух спиралей молекулы ДНК (рис. 8.6).

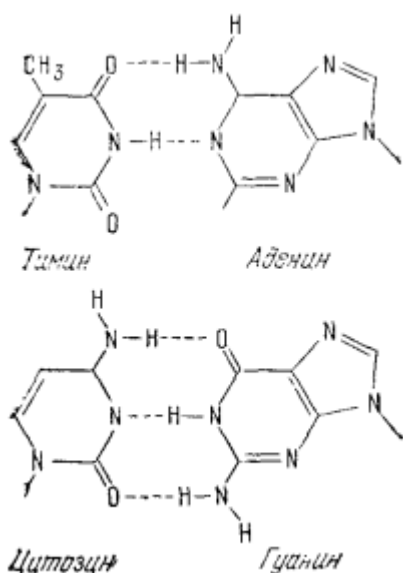


Рисунок 9а- Пример водородной связи между ионами фтора в HF_2^- . Показан предельный случай, когда связь осуществляется с помощью протона

Рисунок 9б-Водородная связь, осуществляемая между органическими основаниями, что характерно, например, для молекулы ДНК

В таблице 3 представлена краткая характеристика типов связи в кристалле.

Тип связи	Типичные примеры				Некоторые характерные свойства
	Вещество	Кристаллическая структура	$U_{\text{св}}$, эВ/молекулу	a , Å	
Ван-дер-ваальсова	Ag	ГЦК	0,1	3,76	Низкие температуры плавления и кипения
	Cl ₂	Тетрагональная	0,3	4,34	Высокая сжимаемость
	H ₂	ГПУ	0,01	3,75	Малые диэлектрические потери
Ковалентная	Si	Кубическая	3,7	2,35	Высокая температура плавления
	InSb	Кубическая	3,4	2,80	Низкая сжимаемость и высокая прочность
	Mg ₂ Sn	Кубическая	1,0	2,92	Диэлектрики или полупроводники Сильное поглощение света с энергиями выше края поглощения
Ионная	KCl	Кубическая	7,3	3,14	Пластичны. Диссоциируют при нагревании
	AgBr	Кубическая	5,4	2,88	Диэлектрики при низких и комнатных температурах
	BaF ₂	Кубическая	17,3	2,69	Ионная проводимость при высоких температурах Поглощение света в ИК области. Прозрачны в видимой части спектра
Металлическая	Na	ОЦК	1,1	3,70	Большое межатомное расстояние и высокое координационное число
	Ag	ГЦК	3,0	2,88	Хорошая электропроводность
	Ni	ГЦК	4,4	2,48	Отсутствие прозрачности и высокая отражательная способность в ИК и видимой части спектра. Прозрачны в УФ части спектра
Водородная	Лед	Гексагональная	0,5	1,75	Множество аллотропных форм. Диэлектрики. Оптическая прозрачность

Заключение

Классификация кристаллов по типам связи весьма условна. Многие тела трудно отнести к тому или иному классу кристаллов по типу связи. Говоря о типе связи в кристалле, необходимо иметь в виду, что связь между двумя атомами никогда полностью не соответствует одному из описанных типов, в ионной связи всегда присутствует элемент ковалентной связи, в сложных веществах связь между разными атомами может быть разного типа.

Ионная связь является типичной химической связью, широко распространенной среди неорганических соединений. Ионная связь также присуща многим интерметаллическим соединениям.

Твердые тела с ионной связью имеют высокие точки плавления.

Энергия ковалентной связи также высока о чем свидетельствует высокая температура плавления и большая теплота сублимации тел с этим видом связи.

Металлическая связь, возникающая в результате обобществления валентных электронов, характерна для типичных металлов и многих интерметаллических соединений. Энергия этой связи по порядку величины сравнима с энергией валентной связи.

Наиболее универсальной является связь Ван-дер-Ваальса. Она возникает между любыми частицам. В чистом виде она проявляется при взаимодействии нейтральных атомов и молекул, имеющих заполненные внутренние электронные оболочки. В частности силы Ван-дер-Ваальса обуславливают существование жидкого и твердого состояний инертных газов, водорода, кислорода, азота и многих органических и неорганических соединений, обеспечивают связь в широкой группе валентно-молекулярных кристаллов. Вследствие того что энергия ван-дер-ваальсовой связи низка, все структуры, обусловленные ею, мало устойчивы, легко летучи и имеют низкие точки плавления.

Список использованных источников

1. Бонч-Бруевич В.Л., Калашников С.Г. Физика полупроводников.- М.:Наука,1977.-672с.
2. Арзамасов Б. Н. Материаловедение : учеб. пособие для вузов. Изд. 3-е,. – М.: МГТУ им. Н. Э. Баумана, 2001. – 646 с.
3. Картонова Л.В. Основы кристаллографии: учеб.пособие для технических вузов- Владимир:ВГУ им.А.Г. и Н.Г. Столетовых, 2015. – 80 с.
4. Энциклопедия Физики и техники
http://www.femto.com.ua/articles/part_1/2341.html
5. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела./ Пер. с англ.; Под ред. А. А. Гусева. – М.: Наука, 1978.-789с.
6. Шаскольская, М. П. Кристаллография : учебник для технических вузов / М. П. Шаскольская . – М.: Высшая школа, 1976 . – 392 с.
7. Ашкрофт Н., Мермин Н.Физика твердого тела Т2/Пер. с англ.; Под ред. М. И. Каганова – М.: Мир, 1979. - 422 с.
8. Келли А., Гровс Г.Кристаллография и дефекты в кристаллах.- М.:Мир,1974.-496с.
9. Маделунг О. Физика твердого тела: локализация состояния. – М.: Наука, 1985. – 184с.
10. Учебные материалы <http://works.doklad.ru/view/8NjQNXk5824/all.html>