



Дисциплина «Материаловедение и ТКМ», лекция 1.1

Физические и химические структуры.

УЧЕБНЫЕ ВОПРОСЫ:

- 1. Химические структуры. Виды химических связей: металлическая, ионная, ковалентная.
- 2. Физические структуры. Межмолекулярные связи.
- 3. Кристаллические структуры. Кристаллические решетки. Полиморфизм. Анизотропия. Аморфная структура
- 4. Дефектность материалов. Виды дефектов. Влияние дефектов на свойства материалов.



Литература

1. Арзамасцев В.Б., А.Н. Волчков, В.А. Головин и др. Материаловедение и технология конструкционных материалов: учебник для студентов высших учебных заведений – М., Издательский центр «Академия», 2009 г., 448 с. С.7-20.
2. Валуев Н.П., Муров В.А., Пушкин И.А. Материаловедение и безопасность материалов. Структура и свойства материалов. Металлические материалы. – Учебник. - Химки: АГЗ МЧС России, 2012 г., 181 с. С. 15-48.
3. https://biblioclub.ru/index.php?page=book_red&id=445841
Конструкционные электротехнические материалы: учебное пособие. Москва, Под редакцией: Горелов В.П. Берлин: Директ-Медиа, 2016, 341 с. С. 20-37.

Химические структуры. Виды химических связей: металлическая, ионная, ковалентная

Виды химической связи

Химическая структура вещества представляет собой взаимное расположение атомов и атомов в молекулах, удерживаемых химическими связями различного вида.

Для большинства материалов энергия химических связей приблизительно на порядок больше, чем энергия механических связей

- Ковалентная (полярная и неполярная)
- Ионная
- Металлическая
- Координационная
- Водородная
- Межмолекулярное взаимодействие электрической природы

В чистом виде перечисленные типы связей проявляются редко. В большинстве соединений имеет место наложение разных типов связей. При этом любая химическая связь образуется только тогда, когда сближение атомов приводит к уменьшению полной энергии системы.

Ковалентная и ионная связь

- **ковалентная связь**, которая осуществляется парой электронов, общих для двух атомов, образующих связь. Атомы в молекуле могут быть соединены неполной ковалентной связью: одинарной (H_2 , H_3C-CH_3), двойной ($H_2C=CH_2$), тройной (N_2 , $HC\equiv CH$) или полярной (HCl , H_3C-Cl) в зависимости от электроотрицательности;
- **ионная связь**, в основе которой лежит электростатическое взаимодействие между противоположно заряженными ионами - электрически заряженными частицами, которые образуются из атома (молекулы) в результате потери или присоединения одного или нескольких электронов. Положительно заряженные ионы называются катионами, отрицательно заряженные — анионами. Примеры ионной связи - молекулы $NaCl$ и KF ;

Металлическая и координационная связь

- **металлическая связь**, которая проявляется при взаимодействии атомов элементов, имеющих избыток свободных валентных орбиталей по отношению к числу валентных электронов; эту связь можно представить так: ионный кристаллический остов погружен в электронный газ - свободные электроны, которые непрерывно перемещаются между положительными ионами и компенсируют электростатическое отталкивание ионов, связывая их в твердое тело;
- **координационная (донорно-акцепторная) связь** характерна для комплексных соединений (гемоглобин, хлорофилл и др.), в молекулах которых выделяют центральный атом (комплексообразователь) и непосредственно связанные с ним молекулы или ионы (лиганды, обычно 4 или 6). Координационная связь обусловлена передачей электронной пары с заполненной орбитали донора на вакантную орбиталь центрального атома (акцептора) с образованием общей связывающей молекулярные орбитали. При этом центральный атом и лиганды образуют внутреннюю сферу. Внешнюю сферу составляют ионы, заряд которых компенсирует заряд внутренней сферы. Например, в $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]\text{Cl}_3$ совокупность атомов в квадратных скобках - внутренняя сфера, Co - центральный атом, NH_3 - лиганды, ионы Cl - внешняя сфера.



Водородная связь и молекулярное взаимодействие электрической природы (взаимодействие Ван-дер-Ваальса)

- **Водородная связь** образуется в результате взаимодействия атома водорода, связанного ковалентной связью, с электроотрицательным атомом и неподеленной парой электронов другого атома. Атомы могут принадлежать как одной, так и разным молекулам. Водородная связь приводит к ассоциации одинаковых или различных молекул в комплексы; она во многом определяет свойства воды и льда, молекулярных кристаллов, структуру и свойства белков, нуклеиновых кислот и др.
- **Межмолекулярные взаимодействия электрической природы** происходят между молекулами с насыщенными химическими связями. Впервые существование такого взаимодействия принял во внимание Я.Д. Ван-дер-Ваальс (1873) для объяснения свойств реальных газов и жидкостей.

Эти виды связи относят Межмолекулярным связям, а образованные ими структуры к физическим.

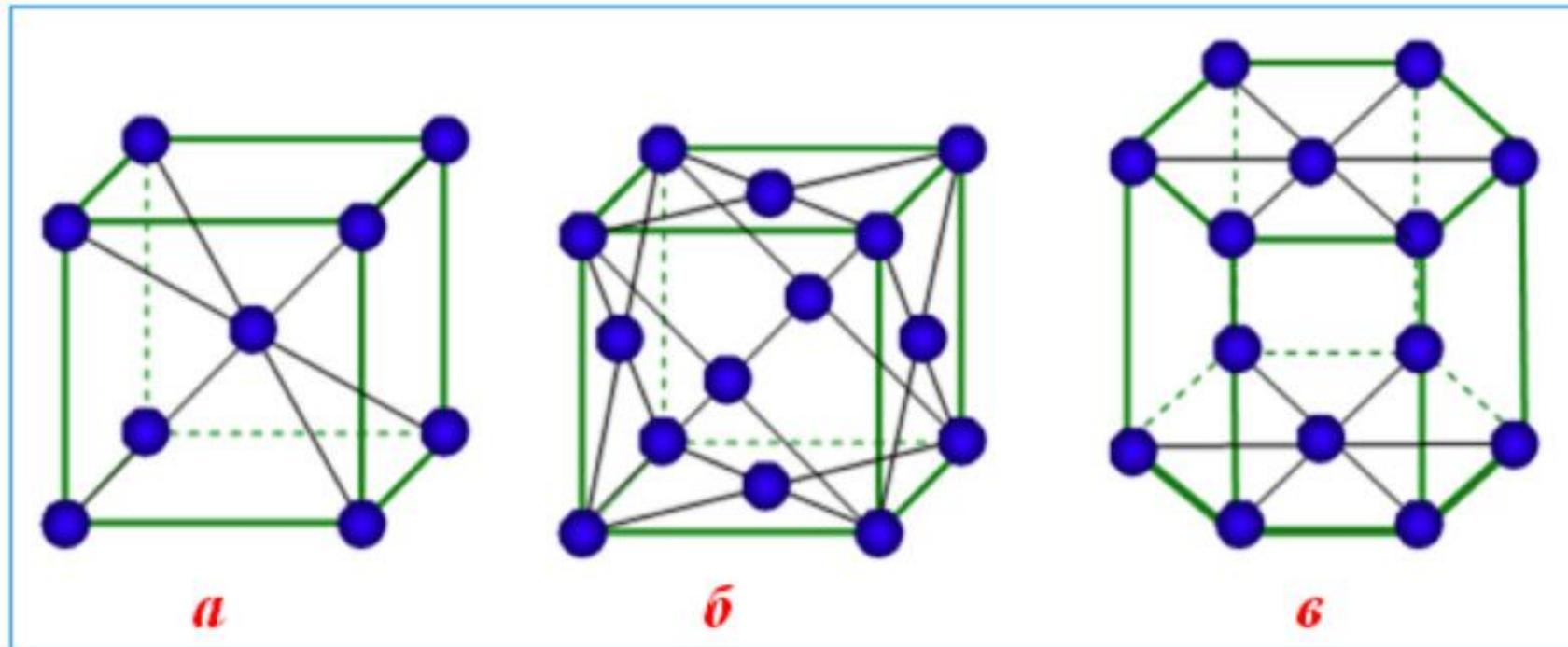
Кристаллические структуры.

Кристаллические решетки.

Полиморфизм. Анизотропия. Аморфная структура

- **Кристаллическая решетка** — это воображаемый геометрический образ для анализа строения кристаллов, который представляет собой объемно-пространственную сетчатую структуру, в узлах которой располагаются атомы, ионы или молекулы вещества.
- Основой кристаллической решетки является элементарная ячейка, которая повторяется в кристалле бесконечное количество раз. **Элементарная ячейка — это наименьшая структурная единица кристаллической решетки, которая обнаруживает все свойства ее симметрии.**

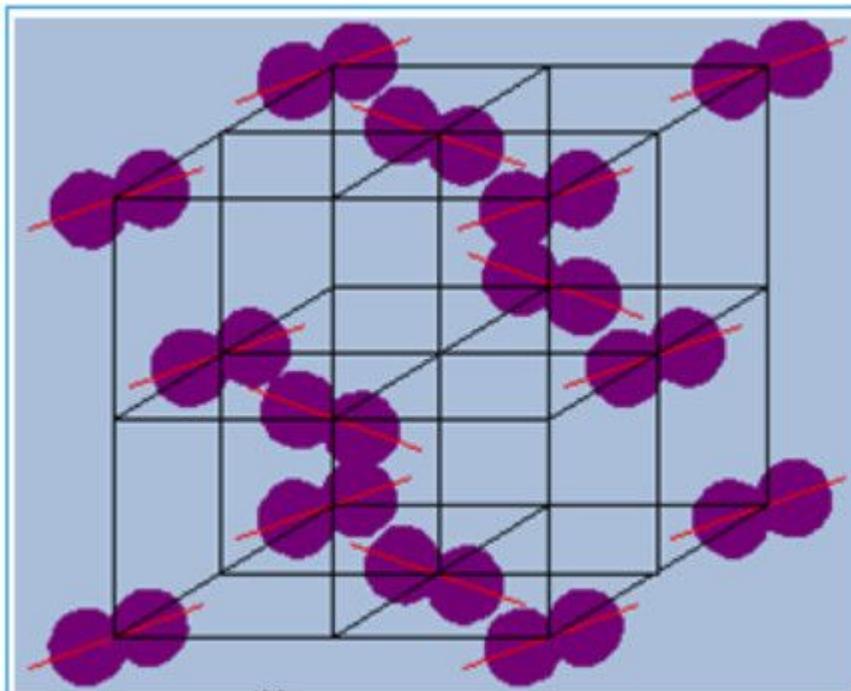
Виды кристаллических решёток у некоторых металлов



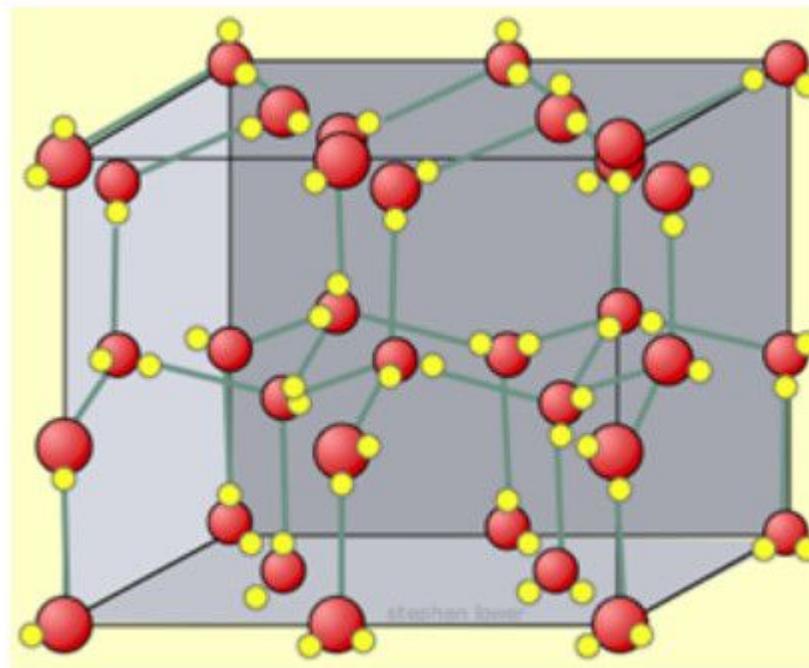
Металлические кристаллические решетки: а) кубическая объемноцентрированная (Fe, V, Nb, Cr) б) кубическая гранецентрированная (Al, Ni, Ag, Cu, Au) в) гексагональная (Ti, Zn, Mg, Cd)

Молекулярные решётки

Молекулярные кристаллические решетки: а) йод; б) лед/вода



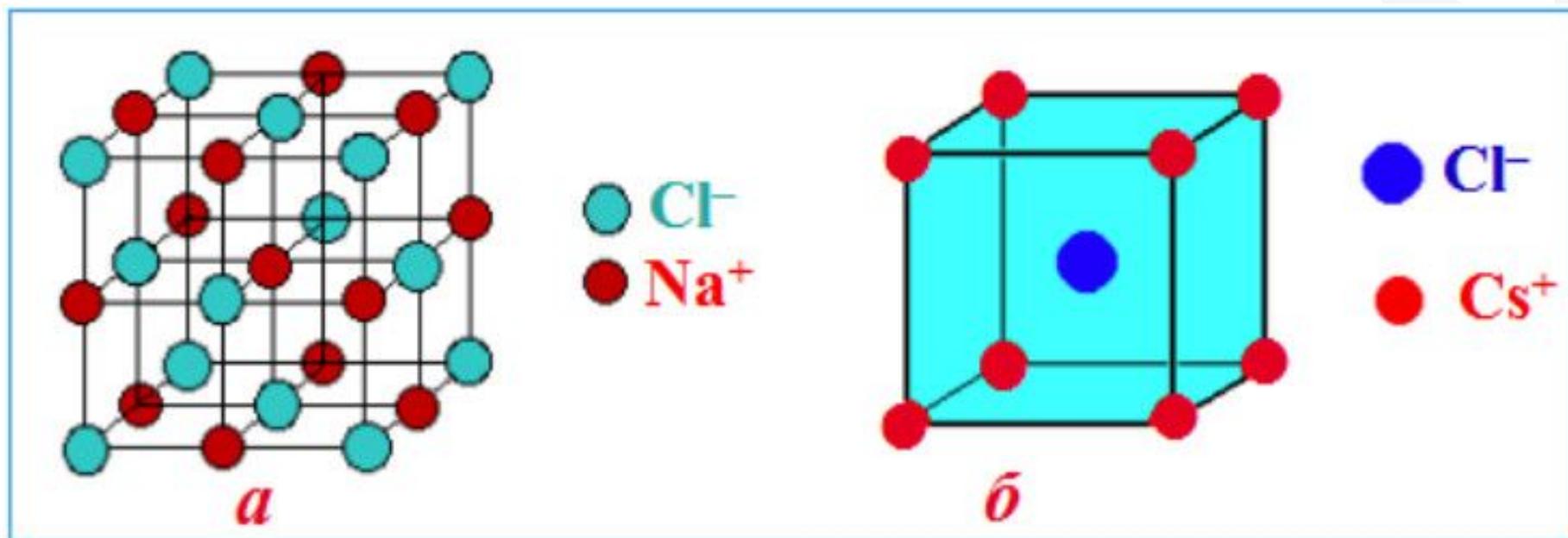
а



б

Ионные решётки

- Примеры ионных кристаллических решеток: а) NaCl; б) CsCl



Полиморфизм. Анизотропия.

- **Полиморфизм кристаллов** (от др.-греч. πολύμορφος «многообразный») - способность вещества существовать в различных кристаллических структурах, называемых полиморфными модификациями (их принято обозначать греческими буквами α , β , γ и т. д.) Характерен для различных классов веществ. Полиморфизм для простых веществ называют аллотропией, но понятие полиморфизма не относят к некристаллическим аллотропным формам (таким, как газообразные O_2 и O_3).
- Частный случай полиморфизма, характерный для соединений со слоистой структурой - **политипизм** (политипия). Такие модификации, политипы, отличаются между собой лишь порядком чередования атомных слоёв.
- **Анизотропия** (от др.-греч. ἄνισος — неравный и τρόπος — направление) — различие свойств среды (например, физических: упругости, электропроводности, теплопроводности, показателя преломления, скорости звука или света и др.) в различных направлениях внутри этой среды; в противоположность изотропии.
- В отношении одних свойств среда может быть изотропна, а в отношении других — анизотропна; степень анизотропии также может различаться.

Аморфная структура

Аморфная структура является одним из физических состояний твердых тел, Аморфные вещества характеризуются двумя особенностями. Во-первых, свойства таких веществ при обычных условиях не зависят от выбранного направления, т.е. они - изотропны. Во-вторых, при повышении температуры происходит размягчение аморфного вещества и постепенный переход его в жидкое состояние. Точное значение температуры плавления отсутствует.

Общим для кристаллического и аморфного состояний веществ является отсутствие поступательного перемещения частиц и сохранение только их колебательного движения около положения равновесия. **Различие** между ними **состоит в наличии геометрически правильной решетки у кристаллов и отсутствии дальнего порядка** в расположении атомов у **аморфных веществ**.

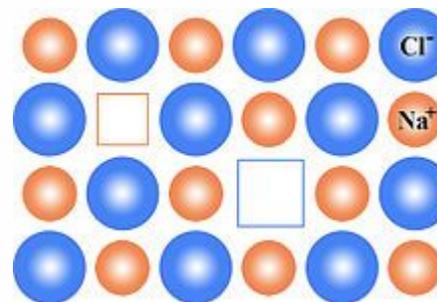
Аморфное состояние вещества, по сравнению с кристаллическим, всегда менее устойчиво и обладает избыточным запасом внутренней энергии. В связи с этим, при определенных условиях, самопроизвольно осуществляется переход из аморфного состояние в кристаллическое.

Дефектность материалов. Виды дефектов. Влияние дефектов на свойства материалов.

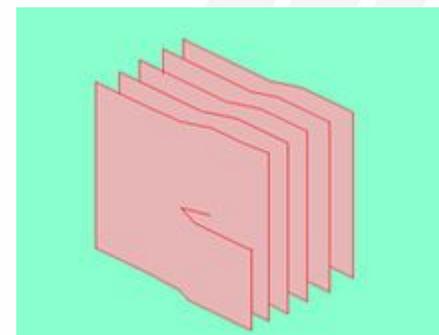
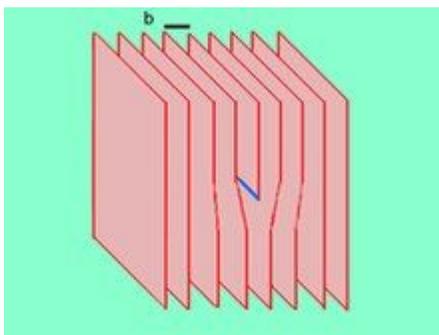
- **Вакансии**
- **Дефекты замещения**
- **Дефекты внедрения**
- **Дислокации и дисклинации**
- **Дефекты снижают прочностные характеристики материалов, что связано с изменением внутренней энергии материала, за счёт изменений, происходящих в его структуре.**

Дефекты в кристаллических материалах (2)

- **Вакансия** (от лат. *vacans* — пустующий, свободный) — дефект кристалла, представляющий собой узел, в котором отсутствует атом (ион). Иначе говоря, вакансия — место, где в случае идеального кристалла должен располагаться атом (ион), но в действительности его в этом положении



- **Дислокация** — линейный дефект или нарушение кристаллической решётки твёрдого тела. Наличие дислокаций существенно влияет на механические и другие физические свойства твердого тела.. Выделяют два основных типа дислокаций: краевые и винтовые. Дислокации смешанного типа являются комбинацией указанных двух типов





Благодарю за внимание!

tvernick@ mail.ru





