

固体物理

solid state physics

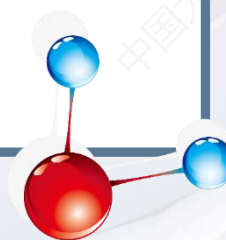


东北大学材料科学与工程学院 材料物理与化学系



2.1

晶体的结合类型





主要内容

一

研究晶体中价键结合类型的意义

二

晶体结构中的价键类型和特点

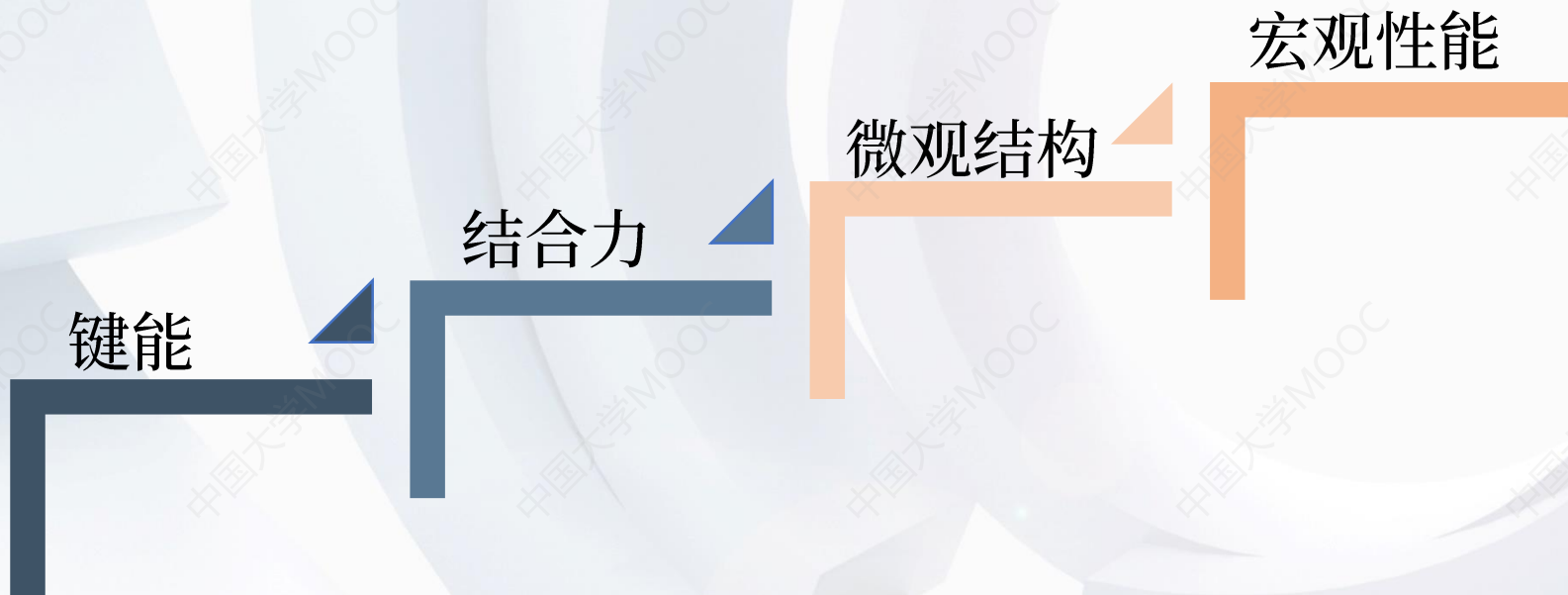
三

混合键

四

小结

一、研究晶体中价键结合性质的意义



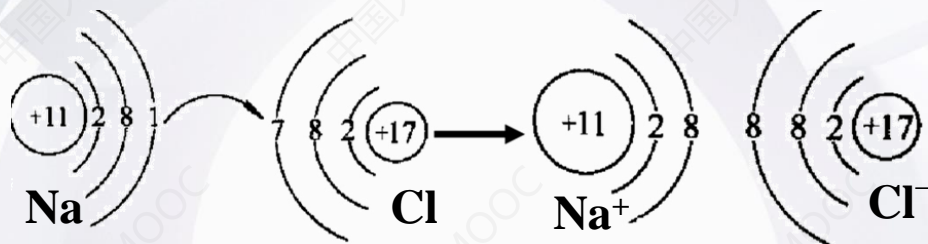
单质 $E_{\text{Cohesive energy}}$

化合物 $E_{\text{Formation energy}}$

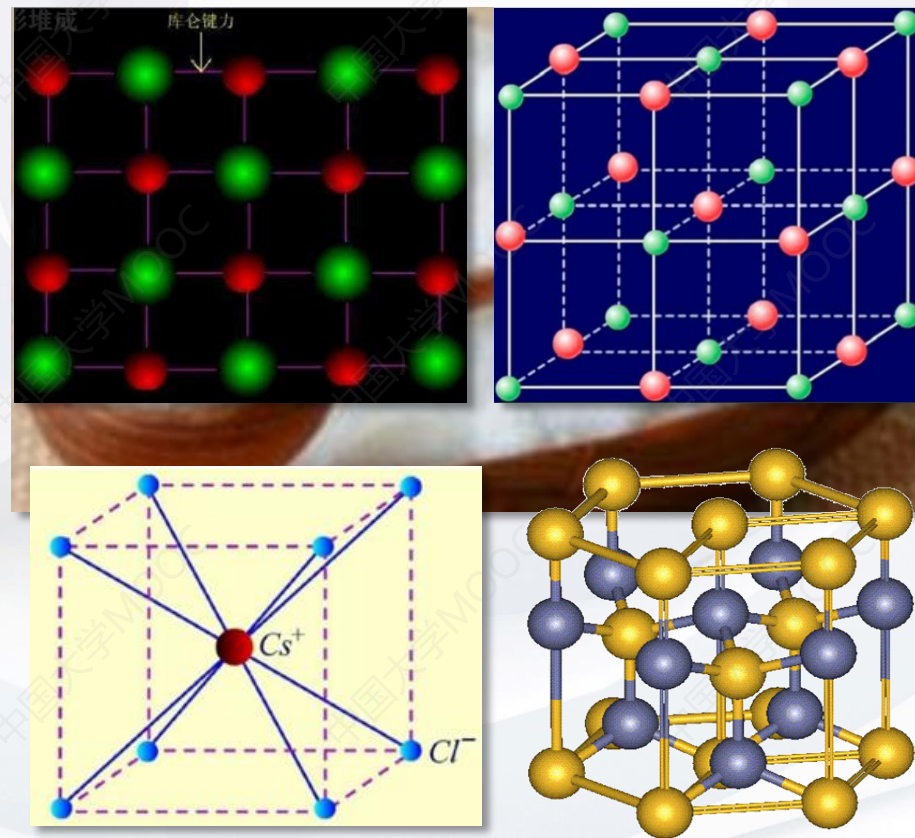
课堂目标

掌握晶体中典型化合物的成键类型、特点及典型性能

离子键 Ionic bonding



键型	离子键
电子结构	圆形的 封闭壳层 ，静电 库伦力
几何结构	无方向性 、正负离子相间作紧密堆积、配位数高 ≤ 8 ， 复式格子
键的强度	中强至强
力学性质	强度高、硬度大、 无延展性
热学性质	熔点 高 、膨胀系数 小 、 熔体内为离子
电子性质	绝缘体 、在 熔体中离子导电
光学性质	折射率较 高 、完整晶体多为 透明
实例	NaCl, CsCl, 半导体PbS, GeS, ZnS等



思考 离子晶体有没有**饱和性**？为什么？

离子键 Ionic bonding

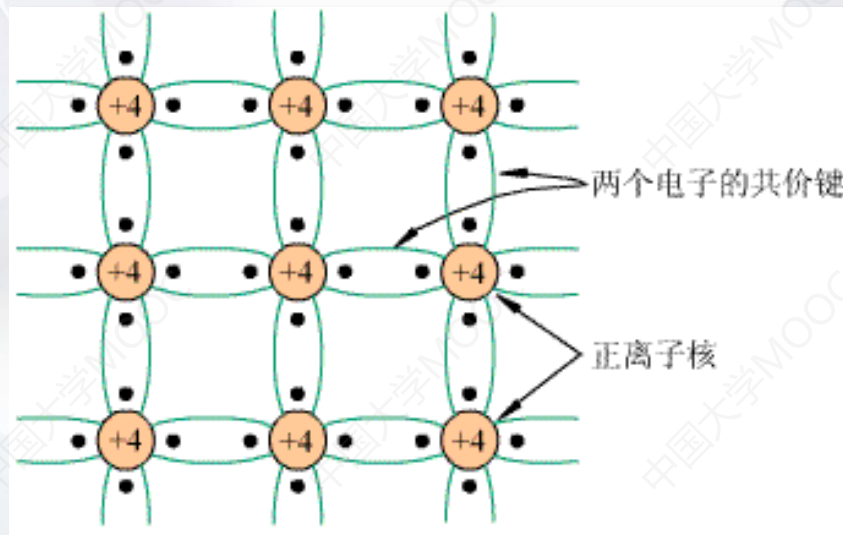
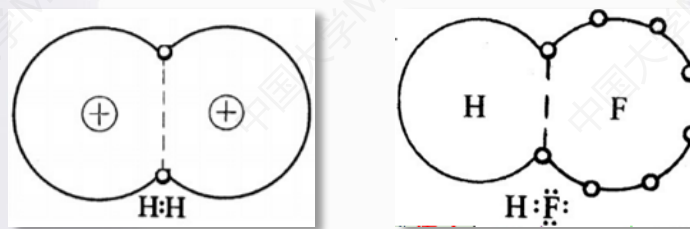
键型	离子键
电子结构	圆形的 封闭壳层 ，静电 库伦力
几何结构	无方向性 、正负离子相间作紧密堆积、配位数高 ≤ 8 ， 复式格子
键的强度	中强至强
力学性质	强度高、硬度大、 无延展性
热学性质	熔点 高 、膨胀系数 小 、 熔体内为离子
电子性质	绝缘体 、在 熔体中离子导电
光学性质	折射率较 高 、完整晶体多为 透明
实例	NaCl, CsCl, 半导体PbS, GeS, ZnS等

键型	物质	键能/ $\text{KJ}\cdot\text{mol}^{-1}$	熔点/ $^{\circ}\text{C}$
离子键	NaCl	640	801
	MgO	1000	2800
共价键	Si	450	1410
	C (金刚石)	713	>3550
金属键	Hg	68	-39
	Al	324	660
	Fe	406	1538
	W	849	3410
分子键	Ar	7.7	-189
	Cl ₂	3.1	-101
氢键	NH ₃	35	-78
	H ₂ O	51	0

共价键 Covalent bonding

键型	共价键
电子结构	共用电子对 (电子云的重叠)
几何结构	方向性, 饱和性, 复式格子, 配位数 ≤ 4
键的强度	强
力学性质	强度高、硬度高、无塑性 (脆)
热学性质	熔点高、膨胀系数小、熔体内为原子挥发性低
电子性质	绝缘体、在熔体中电子导电
光学性质	折射率较高、完整晶体多为透明
实例	金刚石, Si, Ge, SiO ₂ , H ₂ , HF等

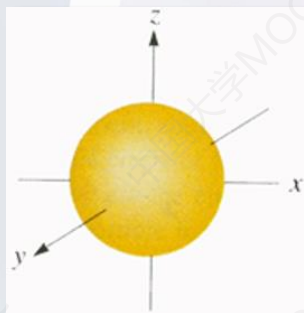
共用电子对



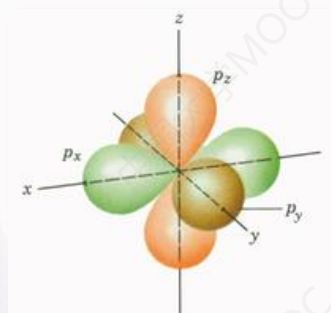
共价键 Covalent bonding

键型	共价键
电子结构	共用电子对 (电子云的重叠)
几何结构	方向性, 饱和性, 复式格子
键的强度	强
力学性质	强度高、硬度高、无塑性 (脆)
热学性质	熔点高、膨胀系数小、熔体内为原子挥发性低
电子性质	绝缘体、在熔体中电子导电
光学性质	折射率较高、完整晶体多为透明
实例	金刚石, Si, Ge, SiO ₂ , H ₂ , HF等

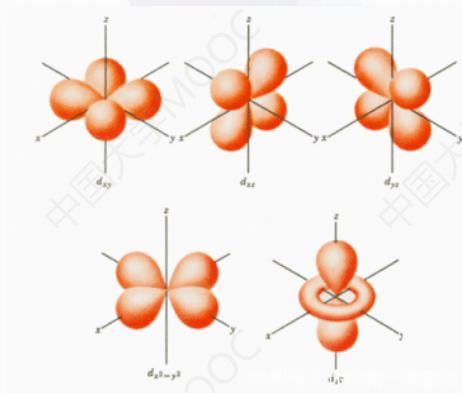
方向性



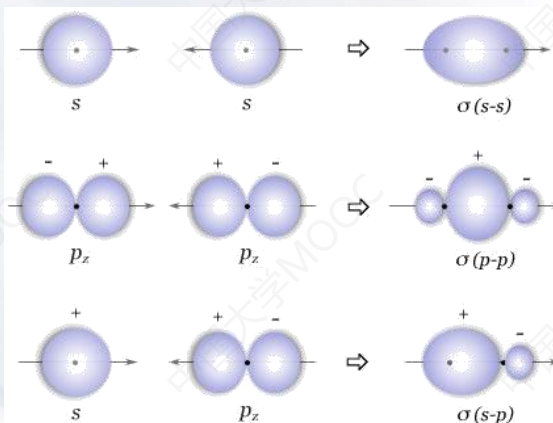
s态: 球形对称



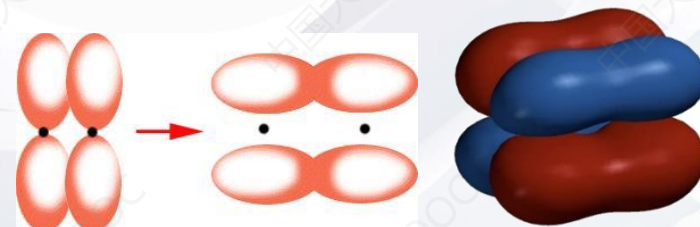
p态: 纺锤形



d态: 花瓣形



π键—“肩并肩”



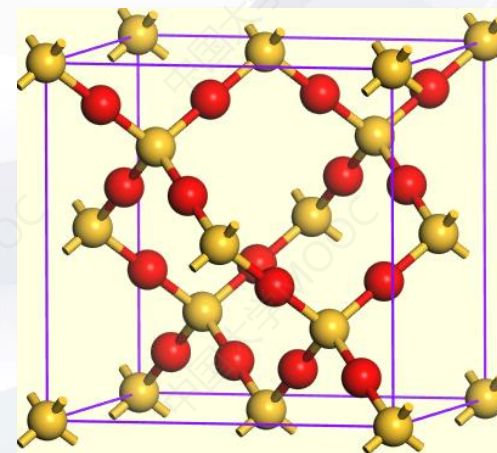
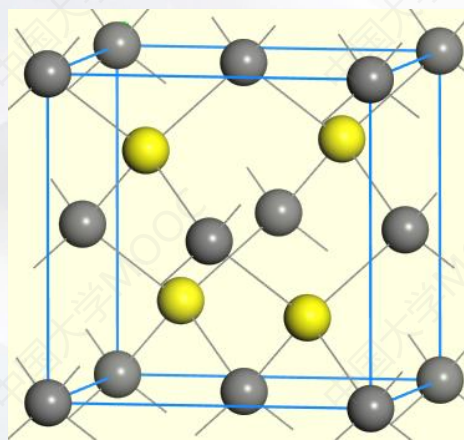
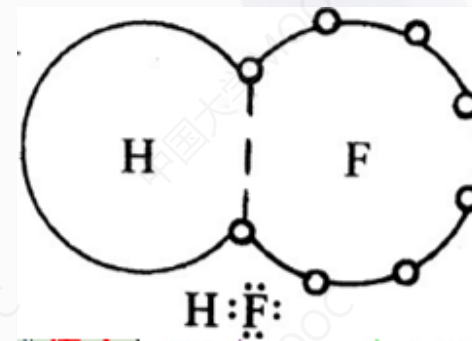
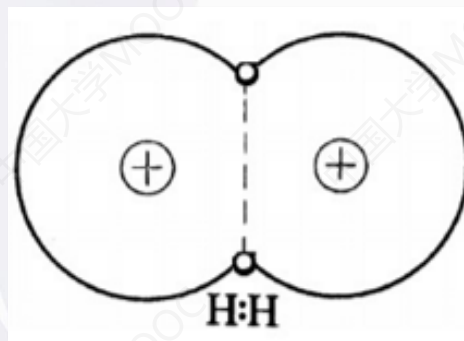
σ键—“头碰头”

δ键—“面对面”

饱和性: 一个原子只能形成一定数目的共价键, 电子位于共价键附近的几率比其他地方高。

共价键 Covalent bonding

键型	共价键
电子结构	共用电子对 (电子云的重叠)
几何结构	方向性, 饱和性, 复式格子
键的强度	强
力学性质	强度高、硬度高、无塑性 (脆)
热学性质	熔点高、膨胀系数小、熔体内为原子挥发性低
电子性质	绝缘体、在熔体中电子导电
光学性质	折射率较高、完整晶体多为透明
实例	金刚石, Si, Ge, SiO ₂ , H ₂ , HF等



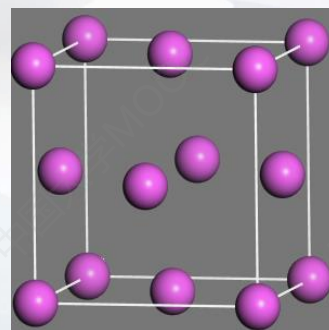
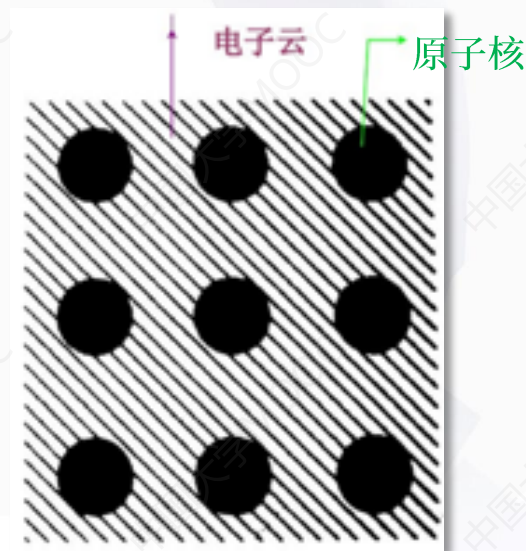
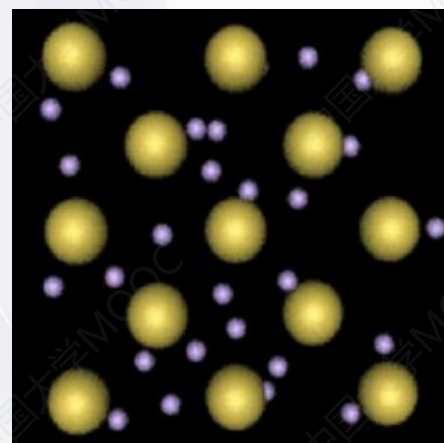
共价键 Covalent bonding

键型	共价键
电子结构	共用电子对 (电子云的重叠)
几何结构	方向性, 饱和性, 复式格子, 配位数 ≤ 4
键的强度	强
力学性质	强度高、硬度高、无塑性 (脆)
热学性质	熔点高、膨胀系数小、熔体内为原子挥发性低
电子性质	绝缘体/半导体、在熔体中电子导电、化学惰性大
光学性质	能透射红外线
实例	金刚石, Si, Ge, SiO ₂ , H ₂ , HF等

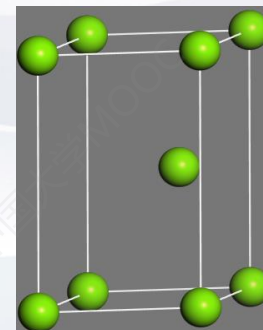
键型	物质	键能/KJ·mol ⁻¹	熔点/°C
离子键	NaCl	640	801
	MgO	1000	2800
共价键	Si	450	1410
	C (金刚石)	713	>3550
金属键	Hg	68	-39
	Al	324	660
	Fe	406	1538
	W	849	3410
分子键	Ar	7.7	-189
	Cl ₂	3.1	-101
氢键	NH ₃	35	-78
	H ₂ O	51	0

金属键 Metallic bonding

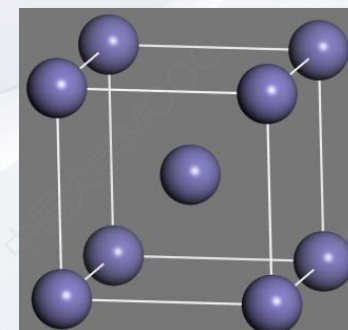
键型	金属键
电子结构	静电作用力，原子核与自由电子（公用电子气）的静电吸引作用
几何结构	无方向性，无饱和性，布拉菲格子，配位数12, 8
键的强度	中强
力学性质	密度大、强韧性好
热学性质	熔点较高，膨胀系数较大
电子性质	导电性良好，电阻随温度升高而增大、
光学性质	有金属光泽，对红外和可见光反射能力强，不能透射，可以透射紫外光
实例	<p>FCC: Al, Cu, Ag, Au</p> <p>HCP: Be, Mg, Zn, Re</p> <p>BCC: Li, Na, K, W, Mo</p>



FCC-Al



HCP-Mg



BCC-Fe

金属键 Metallic bonding

键型	金属键
电子结构	静电作用力, 金属离子与自由电子(公用电子气)的静电吸引作用
几何结构	无方向性, 无饱和性, 布拉菲格子, 配位数12, 8
键的强度	中强
力学性质	密度大、强韧性好
热学性质	导热性好, 熔点较高, 膨胀系数较大
电子性质	导电性良好, 电阻随温度升高而增大、
光学性质	有金属光泽, 对红外和可见光反射能力强, 不能透射可见光, 可以透射紫外光
实例	FCC: Al, Cu, Ag, Au HCP: Be, Mg, Zn, Re BCC: Li, Na, K, W, Mo

键型	物质	键能/KJ·mol ⁻¹	熔点/°C
离子键	NaCl	640	801
	MgO	1000	2800
共价键	Si	450	1410
	C (金刚石)	713	>3550
金属键	Hg	68	-39
	Al	324	660
	Fe	406	1538
	W	849	3410
分子键	Ar	7.7	-189
	Cl ₂	3.1	-101
氢键	NH ₃	35	-78
	H ₂ O	51	0

以上内容仅为本文档的试下载部分，为可阅读页数的一半内容。如要下载或阅读全文，请访问：<https://d.book118.com/948105044062006064>