Chương II

LIÊN KẾT TRONG TINH THỂ CHẤT RẮN

cuu duong than cong. com

CuuDuongThanCong.com https://fb.com/tailieudientucntt

I. CÁC LOẠI LIÊN KẾT TRONG TINH THỂ

Các nguyên tử khi tiến lại gần nhau để tạo thành tinh thể → Có sự tương tác giữa chúng → Năng lượng của toàn hệ giảm. *Độ giảm năng lượng này xác định năng lượng liên kết của tinh thể.*

Năng lượng liên kết khác nhau giữa các loại tinh thể:

cuu duong than cong. com

Tinh thể khí trơ:

$E_{\text{liên kết}} = 0.02 \rightarrow 0.2$ eV/nguyên tử

cuu duong than cong. com

Tinh thể kim loại kiềm:

$E_{\text{liên kết}} = 1$ eV/nguyên tử

Tinh thể nhóm 4 như Ge, Si:

$E_{\text{liên kết}} = 4 \div 5 \rightarrow 7.36$ eV/nguyên tử

CuuDuongThanCong.com https://fb.com/tailieudientucntt

1. BẢN CHẤT CỦA CÁC LỰC TƯƠNG TÁC TRONG TINH THỂ

Khi các nguyên tử lại gần nhau, giữa các nguyên tử có thể có các tương tác:

+ Tương tác hấp dẫn.

+ Tương tác từ.

+ Tương tác tĩnh điện.

cuu duong than cong. com

Nếu hợp các tương tác đó làm năng lượng hệ giảm → lực hút giữa các nguyên tử sẽ thắng → *tinh thể ổn định.*

cuu duong than cong. com

Nếu hợp các tương tác đó làm năng lượng hệ tăng → lực đẩy thắng → *tinh thể không hình thành.*

Giả sử xét tương tác giữa hai nguyên tử gần nhau nhất cách nhau 3 $\mathring{A}$

+ Với nguyên tử nặng nhất có A = 250 năng lượng hấp dẫn vào khoảng:

$$U_{\text{hấp dẫn}} \sim 2{,}4.10^{-32}\ \text{eV}$$

+Với các nguyên tử có momen từ cơ bản bằng magnetron Born năng lượng tương tác:

$$U_{\text{từ}} \sim -\ 7.10^{-6}\ \text{eV}$$

+ Với các nguyên tử có điện tích e: năng lượng hút tĩnh điện:

$$\mathbf{U_{điện} = U_{hút} \sim -\ \frac{e^2}{r} \sim -5eV}$$

Như vậy:

$$U_{\text{điện}} >> U_{\text{từ}} >> U_{\text{hấp dẫn}}$$

Vậy nguồn gốc liên kết chính trong tinh thể là tương tác tĩnh điện.

CuuDuongThanCong.com https://fb.com/tailieudientucntt

TƯƠNG TÁC TĨNH ĐIỆN

Tương tác tĩnh điện trong tinh thể gồm:

Tương tác hút và tương tác đẩy

- Tương tác hút giữa các điện tích trái dấu:
  electron – hạt nhân

$$U_{hút} \sim -\frac{e^2}{r}$$

- Tương tác đẩy giữa các điện tích cùng dấu:
  hạt nhân – hạt nhân; electron – electron

$$U_{đẩy} = \frac{A}{r^n}$$

Trong đó: A, n = hằng số, n >> 1; r : khoảng cách giữa hai nguyên tử.

cuu duong than cong. com

Vậy: Năng lượng tương tác giữa hai nguyên tử gồm:

$$\mathbf{U(r) = U_{hút} + U_{đẩy}}$$

Khi $r = r_o$, $U(r_o) = U_{min}$

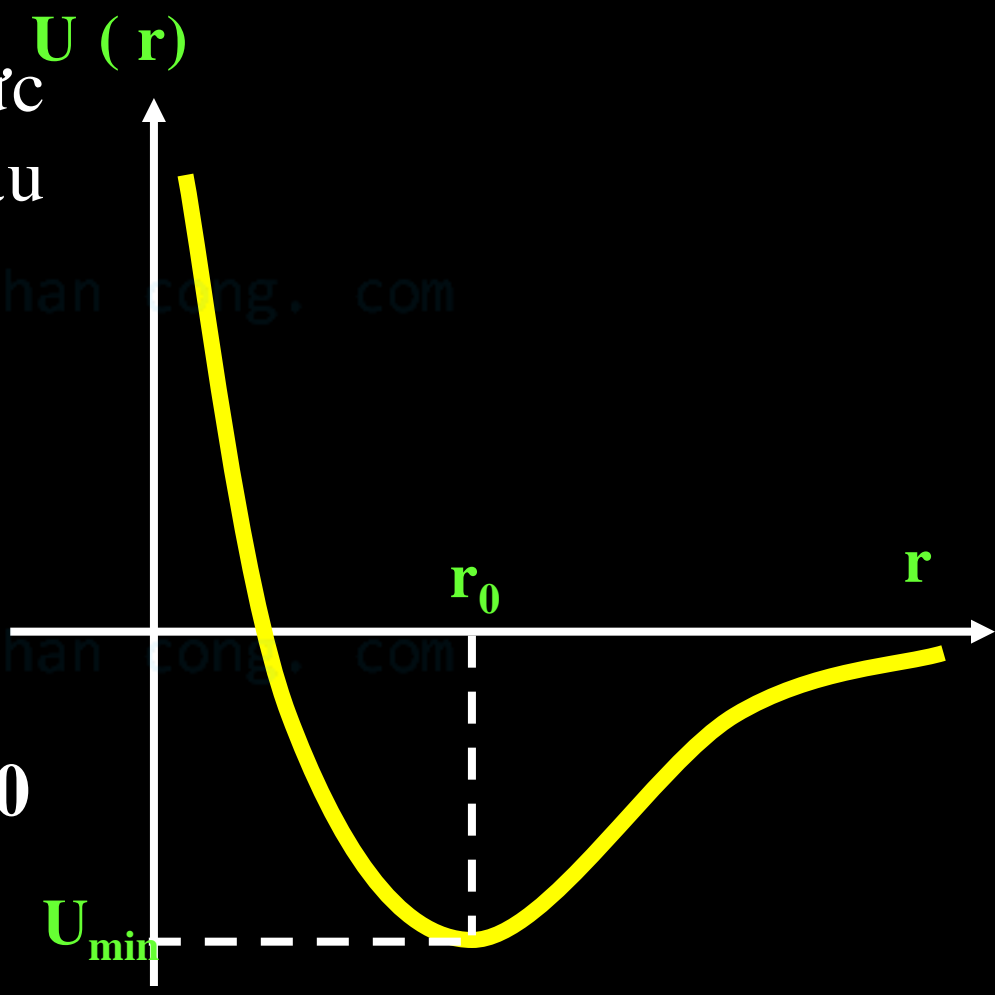
$\Rightarrow$ r_o = khoảng cách thực giữa hai nguyên tử gần nhau nhất trong tinh thể.

Khi $r \to 0$:

$U_{đẩy} >> U_{hút} \Rightarrow U(r) \to \infty$

Khi $r \to \infty$:

$U_{đẩy} << U_h = 0 \Rightarrow U(r) \to 0$



cuu duong than cong. com

2. CÁC LOẠI LIÊN KẾT TRONG CHẤT RẮN

Sự khác biệt giữa các loại liên kết trong chất rắn là do sự phân bố của các điện tử hóa trị của các nguyên tử.

Khi đưa các nguyên tử lại gần nhau để tạo tinh thể chất rắn, chúng có sự phân bố lại các điện tử trong các nguyên tử. Quá trình này thỏa điều kiện:

+ Bảo toàn điện tích của hệ.

+ Xu hướng sao cho các nguyên tử có lớp vỏ ngoài cùng đầy e-.

Tùy theo số electron hóa trị của các nguyên tử mà chúng có thể phân bố lại electron bằng cách: nhường, hay thu, hay góp chung các electron hay chỉ biến dạng các lớp vỏ e^-.

Cuu Duong Than Cong . com https://fb.com/tailieudientucntt

CÁC LOẠI LIÊN KẾT CƠ BẢN TRONG TINH THỂ

1-*Liên kết Van der Waals*

Liên kết yếu giữa các nguyên tử trung hòa bởi tương tác Van der Waals – London do sự thăng giáng trong phân bố điện tích của các nguyên tử.

2-*Liên kết ion*

Các nguyên tử trao đổi điện tử hóa trị với nhau để tạo thành các ion (+) và ion (-) → liên kết bằng lực hút tĩnh điện của các ion trái dấu.

3-*Liên kết đồng hóa trị*

Liên kết giữa các nguyên tử bằng cách góp chung các electron hóa trị → Các nguyên tử trung hòa có sự phân bố electron chùm lên nhau một phần.

4-*Liên kết kim loại*

Các electron hóa trị được giải phóng khỏi nguyên tử và có thể di chuyển tự do trong tinh thể. Các ion (+) được nằm ở vị trí nút mạng.

CuuDuongThanCong.com https://fb.com/tailieudientucntt

II. VÍ DỤ MINH HỌA CHO CÁC LOẠI LIÊN KẾT TRONG CHẤT RẮN

1. TINH THỂ KHÍ TRƠ

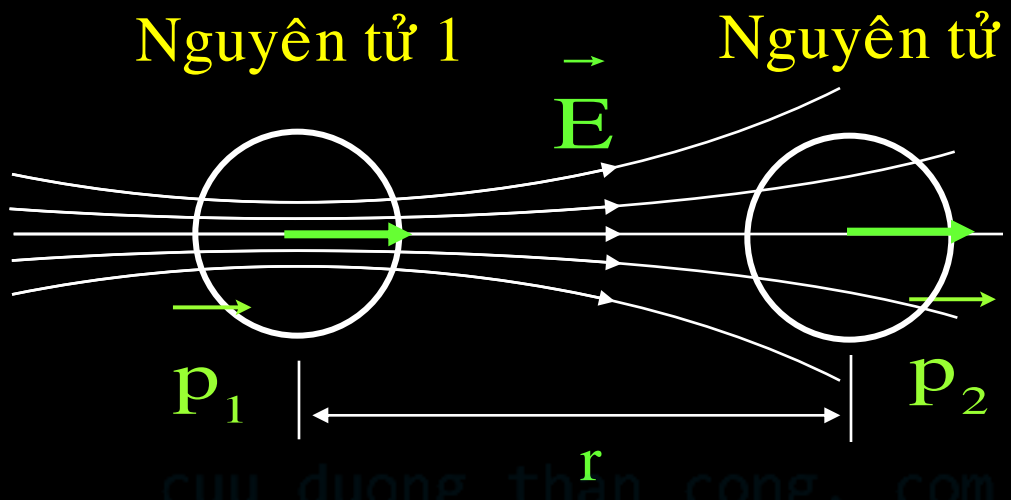
A. ĐIỂN HÌNH

Các tinh thể khí trơ như He, Ne, Ar có lớp vỏ điện tử hóa trị hoàn toàn đầy, năng lượng ion hóa rất lớn, năng lượng liên kết giữa các nguyên tử rất yếu, không đủ làm biến dạng các lớp vỏ electron của chúng

→ *tương tác chủ yếu Van der Waals – London*

cuu duong than cong. com

Xét hai nguyên tử 1 và 2 cách nhau một khoảng r như hình.



cuu duong than cong. com

Tương tác van der Waals – London

Giả sử ở thời điểm t, nguyên tử 1 có momen lưỡng cực điện tức thời là $\vec{p}_1 \rightarrow$ sinh ra một điện trường $\vec{E}$ có độ lớn tại tâm của nguyên tử 2 là:

$$E = \frac{2p_1}{r^3}$$

CuuDuongThanCong.com https://fb.com/tailieudientucntt

Momen lưỡng cực điện cảm ứng tại nguyên tử 2 là P_2:

$$P_2 = \alpha_E = \frac{2^{\alpha} P_1}{r^3}$$

Trong đó α = độ phân cực điện

Thế năng tương tác giữa hai momen $\vec{P}_1$, $\vec{P}_2$ là:

$$U_1(r) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_o}\left[\frac{\vec{P}_1.\vec{P}_2}{r^3} - \frac{3(\vec{P}_1.\vec{r})(\vec{P}_2.\vec{r})}{r^5}\right]$$

Vì $\vec{P}_1$ // $\vec{P}_2$ nên:

$$U_1(r) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_o}\left[\frac{P_1P_2}{r^3} - \frac{3P_1r.P_2r}{r^5}\right] = -\frac{2P_1P_2}{4\pi\varepsilon_o r^3} = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_o}\frac{4^{\alpha}P_1^2}{r^6}$$

$$U_1(r) = U_{hút} = -\frac{C}{r^6} \Rightarrow \text{Tương tác hút}$$

Nguyên tử càng gần nhau liên kết càng mạnh ⇒ Tương tác Van der Waals – Lon don ⇒ đóng vai trò chính trong các liên kết của các tinh thể khí trơ.

cuu duong than cong. com

Khi đưa các nguyên tử lại gần nhau hơn $\rightarrow$ có thêm tương tác đẩy có dạng:

$$U_{đẩy} = \frac{A}{r^{12}}$$

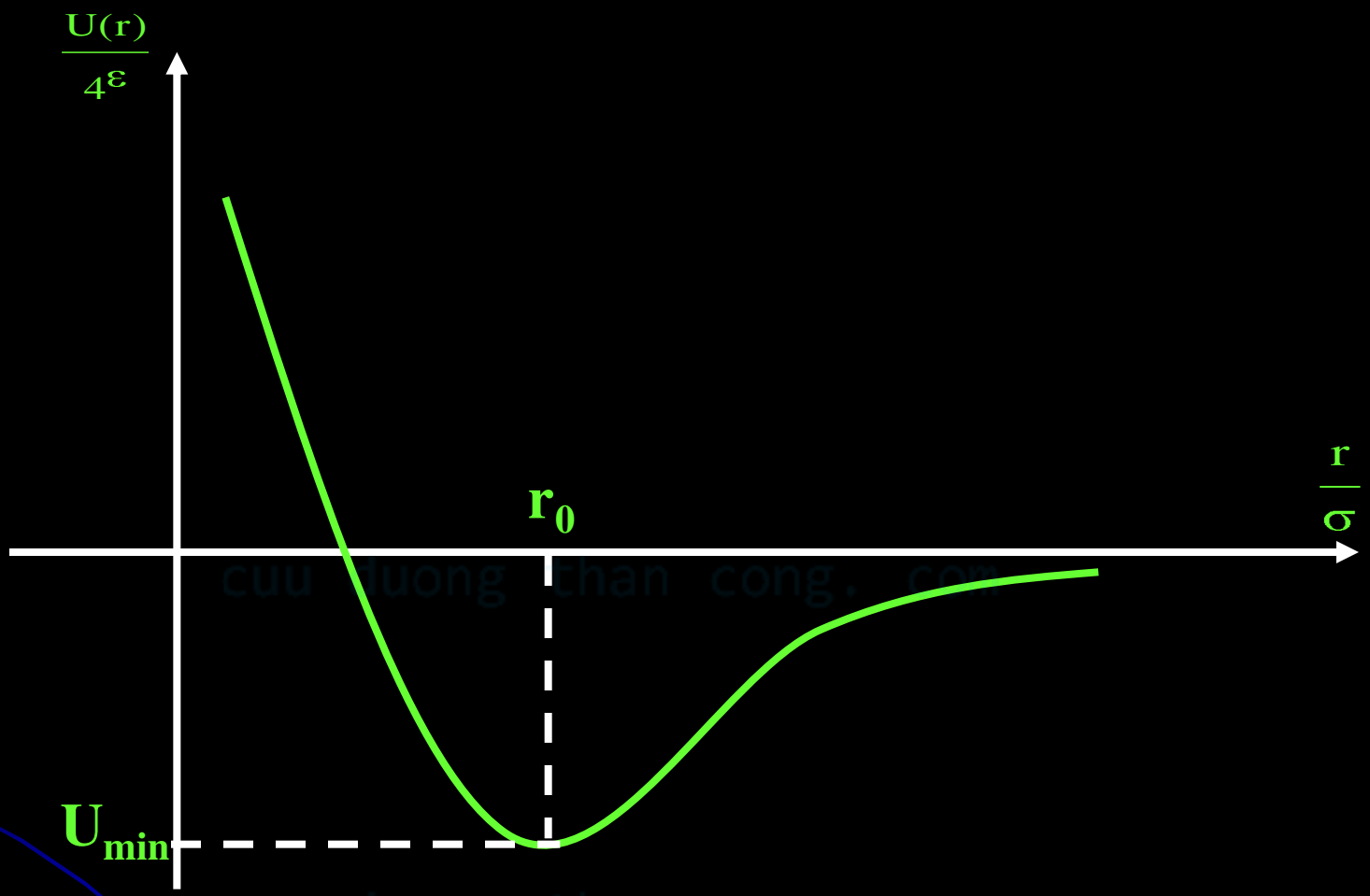
Thế năng tương tác toàn phần:

$$U(r) = U_{hút}(r) + U_{đẩy}(r) = -\frac{C}{r^6} + \frac{A}{r^{12}}$$

Hay : $U(r) = 4\varepsilon\left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{6}\right]$ = *Thế Lennard – Jones*

Trong đó: $C \equiv 4\varepsilon\sigma^6$; $A \equiv 4\varepsilon\sigma^{12}$ là các hằng số dương

CuuDuongThanCong.com https://fb.com/tailieudientucntt



Thế Lennard – Jones

Vậy: ***Tương tác Van der Waals – London đóng vai trò chính trong liên kết của các tinh thể khí trơ.***

CuuDuongThanCong.com https://fb.com/tailieudientucntt

B. MỘT SỐ TÍNH CHẤT CỦA TINH THỂ KHÍ TRƠ

- *Liên kết của tinh thể khí trơ là liên kết Van der Waals* → tương tác hút → xu hướng các nguyên tử kéo về mình số các nguyên tử lân cận tối đa.

→ Tinh thể có cấu trúc xếp chặt: lập phương tâm mặt cho đa số tinh thể khí trơ, và lục giác xếp chặt với tinh thể He.

- *Các tinh thể khí trơ là chất điện môi* trong suốt có *năng lượng liên kết nhỏ và nhiệt độ nóng chảy thấp, dễ nén.*

cuu duong than cong. com

Năng lượng liên kết của các tinh thể khí trơ

Giả sử tinh thể khí trơ là một tập hợp các nguyên tử nằm tại nút mạng, bỏ qua động năng của chúng

→ Năng lượng tương tác của nguyên tử nằm tại gốc tọa độ với các nguyên tử còn lại i trong tinh thể là thế năng:

$$U = \sum_{i=1}^{\infty} U(\vec{r}_i)$$

cuu duong than cong. com

Với: $\vec{r}_i = n_{i1}\vec{a}_1 + n_{i2}\vec{a}_2 + n_{i3}\vec{a}_3$

$r_i \equiv R$: khoảng cách giữa hai nút lân cận gần nhất.

Năng lượng tổng cộng trong tinh thể có N nguyên tử (tức là có $\frac{N}{2}$ cặp nguyên tử) bằng tổng năng lượng tương tác của các cặp nguyên tử $\frac{N.U}{2}$

→ Năng lượng tương tác tính trên một nguyên tử là:

$$u = \frac{1}{N}.\frac{N.U}{2} = \frac{U}{2}$$

CuuDuongThanCong.com https://fb.com/tailieudientucntt

Mặt khác, theo thế Lennard _ Jones ta có:

Đặt $r_i = \gamma_i R$ $\quad U(r) = 4\varepsilon\left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{6}\right]$

$$u = \frac{4\varepsilon}{2}\sum_i\left[\left(\frac{\sigma}{r_i}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_i}\right)^{6}\right] = 2\varepsilon\sum_i\left[\left(\frac{1}{\gamma_i}\right)^{12}\cdot\left(\frac{\sigma}{R}\right)^{12} - \left(\frac{1}{\gamma_i}\right)^{6}\cdot\left(\frac{\sigma}{R}\right)^{6}\right]$$

$$\Rightarrow u = 2\varepsilon\left[A_{12}\left(\frac{\sigma}{R}\right)^{12} - A_6\cdot\left(\frac{\sigma}{R}\right)^{6}\right]$$

Với $A_n = \sum_{i=1}^{\infty}\left(\frac{1}{\gamma_i}\right)^n$

cuu duong than cong . com

A_n phụ thuộc $\rightarrow$ Loại mạng tinh thể và n.

Khi $n \rightarrow \infty$: $A_n \rightarrow$ số lân cận gần nhất.

VD: mạng lập phương tâm mặt $A_n = 12$.

Khi n giảm $\rightarrow$ A_n tăng vì có sự đóng góp của các nguyên tử ở xa hơn.

cuu duong than cong . com

CuuDuongThanCong.com https://fb.com/tailieudientucntt

Khoảng cách cân bằng R_o giữa các lân cận gần nhất được tính từ điều kiện:

$$\left.\frac{\partial U}{\partial R}\right|_{R=R_o} = 0$$

$$\rightarrow \quad \frac{\partial U}{\partial R} = 2\varepsilon\left[-\frac{A_{12}\sigma^{12}.12}{R^{11}} + \frac{A_6\sigma^6.6}{R^5}\right]_{R=R_o} = 0$$

$$\rightarrow \frac{12A_{12}\sigma^{12}}{R_o^{11}} = \frac{6A_6\sigma^6}{R_o^5} \rightarrow \quad R_o = \sqrt[6]{\frac{2A_{12}}{A_6}}.\sigma \approx 1.09\sigma$$

cuu duong than cong. com

cuu duong than cong. com

Kết quả lí thuyết này phù hợp tốt với kết quả thực nghiệm đối với các nguyên tử có khối lượng lớn, còn đối với các nguyên tử có khối lượng nhỏ thì có sự sai khác đáng kể. *Nguyên nhân là do bỏ qua động năng của các nguyên tử.*

CuuDuongThanCong.com https://fb.com/tailieudientucntt

Năng lượng liên kết cân bằng

Thế $R_o = \sqrt[6]{\frac{2A_{12}}{A_6}}.\sigma$ vào công thức: $u = 2\varepsilon\left[A_{12}\left(\frac{\sigma}{R}\right)^{12} - A_6.\left(\frac{\sigma}{R}\right)^{6}\right]$,
ta tính được năng lượng liên kết cân bằng:

$$u_o = 2\varepsilon\left[A_{12}\left(\frac{\sigma}{\sqrt[6]{\frac{2A_{12}}{A_6}}.\sigma}\right)^{12} - A_6.\left(\frac{\sigma}{\sqrt[6]{\frac{2A_{12}}{A_6}}.\sigma}\right)^{6}\right]$$

$$u_o = 2\varepsilon\left[\frac{A_6^2}{4A_{12}} - \frac{A_6^2}{2A_{12}}\right] = -\frac{A_6^2}{2A_{12}}\varepsilon = -8.6\varepsilon$$

Kết quả này cũng phù hợp với kết quả thực nghiệm đối với các nguyên tử có khối lượng lớn.

Khi khối lượng giảm → có sự sai lệch nhiều với kết quả thực nghiệm.

Nguyên nhân là do bỏ qua động năng của các nguyên tử.

cuu duong than cong . com
cuu duong than cong . com
CuuDuongThanCong.com https://fb.com/tailieudientucntt

Độ cứng của tinh thể B

Độ cứng B của tinh thể là số đo của năng lượng cần để làm biến dạng tinh thể. Tinh thể có B càng lớn thì càng cứng. Nghịch đảo của B là độ nén của tinh thể.

Theo định nghĩa: $B = -V.\left.\frac{\partial P}{\partial V}\right|_T$

Với: V là thể tích của tinh thể; P là áp suất.

Ở nhiệt độ $T = 0^oK$, áp suất được tính:

$$P = -\frac{\partial U}{\partial V} \rightarrow B = V.\left.\frac{\partial^2 U}{\partial V^2}\right|_{T=0}$$

Ta có: Năng lượng của một hạt: $u = \frac{U}{N} \rightarrow U = Nu$

Thể tích của một hạt: $v = \frac{V}{N} \rightarrow V = Nv$

$$B = Nv.\frac{\partial}{\partial V}\left(\frac{\partial U}{\partial V}\right) = Nv.\frac{\partial}{\partial (Nv)}.\left[\frac{\partial (Nu)}{\partial (Nv)}\right] \qquad B = v.\frac{\partial}{\partial v}\left(\frac{\partial u}{\partial v}\right)$$

cuu duong than cong . com

Với mạng lập phương tâm mặt, một ô mạng chứa 4 hạt và ta coi thể tích của mỗi hạt gần đúng là bằng $\frac{1}{4}$ thể tích ô mạng:

$$v = \frac{a^3}{4}$$

Mặt khác, khoảng cách giữa 2 hạt gần nhau nhất là:

cuu duong than cong. com

$$R = \frac{a\sqrt{2}}{2} \rightarrow a = R\sqrt{2}$$

$$\Rightarrow v = \frac{a^3}{4} = \frac{R\sqrt{2}^3}{4} = \frac{R^3}{\sqrt{2}} \rightarrow dv = \frac{1}{\sqrt{2}} 3.R^2 dR$$

cuu duong than cong. com

$$\frac{\partial R}{\partial v} = \frac{\sqrt{2}}{3R^2} \rightarrow B = \frac{R^3}{\sqrt{2}} \cdot \frac{\partial}{\partial v}\left(\frac{\partial u}{\partial R} \cdot \frac{\partial R}{\partial v}\right)$$

$$B = \frac{R^3}{\sqrt{2}} \frac{\partial}{\partial v}\left(\frac{\partial u}{\partial R}.\frac{\sqrt{2}}{3R^2}\right)$$

$$= \frac{R^3}{\sqrt{2}}\left\{\frac{\partial}{\partial R}\left(\frac{\partial u}{\partial R}.\frac{\sqrt{2}}{3R^2}\right).\frac{\partial R}{\partial v}\right\}$$

$$= \frac{R^3}{\sqrt{2}}\left\{\left[\frac{\partial^2 u}{\partial R^2}.\frac{\sqrt{2}}{3R^2} + \frac{\partial u}{\partial R}.\frac{\partial}{\partial R}\left(\frac{\sqrt{2}}{3R^2}\right)\right].\frac{\sqrt{2}}{3R^2}\right\}$$

$$= \frac{R}{3}\left\{\frac{\sqrt{2}}{3R^2}\frac{\partial^2 u}{\partial R^2} - \frac{\sqrt{2}}{3}.\frac{2}{R^3}.\frac{\partial u}{\partial R}\right\}$$

$$= \frac{\sqrt{2}}{9R}\frac{\partial^2 u}{\partial R^2} - \frac{2\sqrt{2}}{9R^2}\frac{\partial u}{\partial R}$$

$$\rightarrow B = \frac{\sqrt{2}}{9}\left(\frac{1}{R}\frac{\partial^2 u}{\partial R^2} - \frac{2}{R^2}\frac{\partial u}{\partial R}\right)$$

cuu duong than cong. com

Ở khoảng cách cân bằng, năng lượng là cực tiểu nên ta có:

- Khi $R = R_o$: $\left.\frac{\partial u}{\partial R}\right|_{R=R_o} = 0$

- $B_o = \left.\frac{\sqrt{2}}{9R_o}\frac{\partial^2 u}{\partial R^2}\right|_{R=R_o}$

cuu duong than cong. com

- Với $R_o = \sqrt[6]{\frac{2A_{12}}{A_6}}\sigma$; $u = 2\varepsilon\left[A_{12}\left(\frac{\sigma}{R}\right)^{12} - A_6.\left(\frac{\sigma}{R}\right)^{6}\right]$

cuu duong than cong. com

Do đó: $B = \frac{75^{\varepsilon}}{\sigma^3}$

2. TINH THỂ ION

A. ĐIỂN HÌNH

- Là các Halogen kiềm: NaCl, LiF, CsCl, ...
- Các nguyên tử kim loại kiềm có một electron hóa trị (VD: Na), còn các nguyên tử Halogen có 7 electron hóa trị (VD: Cl).

+ Nguyên tử Na nhường 1 electron hóa trị $\rightarrow$ ion Na^+ có 8 electron ở lớp vỏ ngoài cùng.

+ Nguyên tử Cl nhận 1 electron hóa trị $\rightarrow$ ion Cl^- có 8 electron ở lớp vỏ ngoài cùng.

$\Rightarrow$ **Liên kết ion**

CuuDuongThanCong.com https://fb.com/tailieudientucntt

B. TÍNH CHẤT

Tương tác giữa NaCl là tương tác hút tĩnh điện giữa các ion trái dấu.

→Liên kết mạnh, không có electron tự do.

→Các tinh thể liên kết ion không dẫn điện ở nhiệt độ thấp, ở nhiệt độ cao độ dẫn điện tăng.

→Có điểm nóng chảy cao, độ cứng lớn, hấp thụ hồng ngoại.

cuu duong than cong. com
cuu duong than cong. com
CuuDuongThanCong.com https://fb.com/tailieudientucntt

NĂNG LƯỢNG LIÊN KẾT
NĂNG LƯỢNG MẠNG U_M

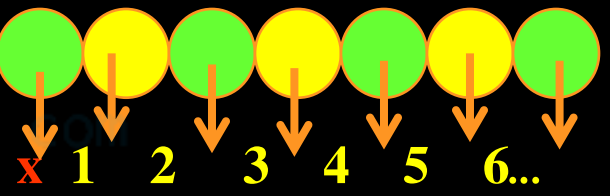
- Để đơn giản , ta dùng mô hình cấu trúc của 1 tinh thể ion hóa trị I : NaCl
- U_M là năng lượng cần chi để tách tất cả các hạt trong mạng ra xa vô hạn.
- U_M là 1 đại lượng đặc trưng trong tinh thể liên quan tới các tính chất của tinh thể: độ nén, độ giãn nở nhiệt, nhiệt độ nóng chảy, độ bền cơ học...

cuu duong than cong . com

THẾ TÁC DỤNG CỦA CHUỖI MẠNG LÊN HẠT X

Thế tác dụng của nửa chuỗi mạng lên hạt x

$$\phi_1 = k\left(-\frac{e^2}{R} + \frac{e^2}{2R} - \frac{e^2}{3R} + \ldots\right)$$



$$\Rightarrow \phi_1 = -k\frac{e^2}{R}\left(1 - \frac{1}{2} + \frac{1}{3} - \ldots\right)$$

$$\Rightarrow \phi_1 = -\varphi_1\frac{e^2}{R} = -0{,}6935\frac{e^2}{R}$$

$\Rightarrow$ thế năng tác dụng của cả chuỗi lên x bằng 2 lần thế năng tác dụng của nửa chuỗi lên x.

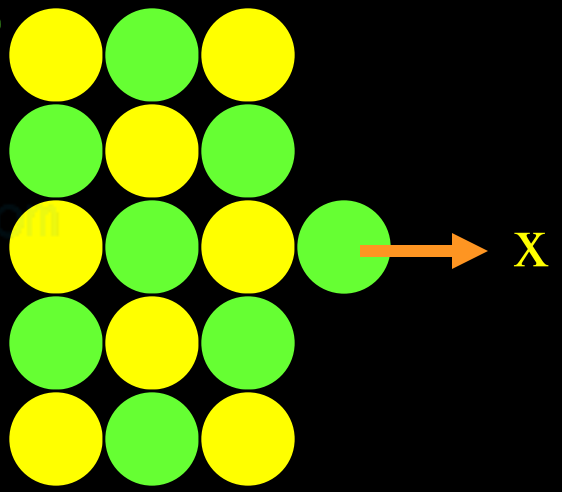
CuuDuongThanCong.com https://fb.com/tailieudientucntt

THẾ TÁC DỤNG CỦA MẶT MẠNG LÊN X

Thế tác dụng của nửa mặt mạng lên x:

$$\phi_2 = k\left(-\frac{e^2}{R} + \frac{2e^2}{R\sqrt{2}} - \frac{2e^2}{R\sqrt{5}} + \ldots\right)$$

$$\Rightarrow \phi_2 = -k\frac{e^2}{R}\left(1 - \frac{2}{\sqrt{2}} + \frac{2}{\sqrt{5}} - \ldots\right)$$



$$\Rightarrow \phi_2 = -\varphi_2\frac{e^2}{R} = -0{,}1144\frac{e^2}{R}$$

cuu duong than cong. com

⇒ *Thế tác dụng của cả mặt mạng lên x bằng 2 lần thế tác dụng của nửa mặt mạng lên x.*

THẾ TÁC CỦA MẠNG KHÔNG GIAN LÊN X

Thế tác của nửa mạng không gian lên x:

$$\Rightarrow \phi_3 = -\varphi_3 \frac{e^2}{R} = -0{,}0662 \frac{e^2}{R}$$

⇒ Thế tác dụng của cả mạng không gian lên x bằng 2 lần thế tác dụng của nửa mạng lên x.

Do đó, thế của toàn mạng tinh thể tác dụng lên x:

$$\phi = 2(\phi_1 + \phi_2 + \phi_3)$$

cuu duong than cong. com
cuu duong than cong. com
CuuDuongThanCong.com https://fb.com/tailieudientucntt

Năng lượng mạng khi mạng có N_A hạt là:

$$U_M = - N_A\phi = 2N_A(\varphi_1 + \varphi_2 + \varphi_3)\frac{e^2}{R}$$

Đặt: $\alpha_M = 2(\varphi_1 + \varphi_2 + \varphi_3) =$ hằng số Madelung

$\Rightarrow$Năng lượng mạng :

$$U_M = \alpha_M N_A \frac{e^2}{R}$$

α_M là một thừa số hình học, các vật chất khác nhau, nhưng có cùng cấu trúc thì có α_M giống nhau.

cuu duong than cong. com

$\Rightarrow$ Năng lượng liên kết trên một ion:

$$u = \alpha_M \frac{e^2}{R} \approx 1,7476 \frac{e^2}{R}$$

+ Năng lượng mạng của 1 hợp chất ion với hóa trị ion bất kỳ Z_1, Z_2 là:

$$U = \alpha_M N_A Z_1 Z_2 \frac{e^2}{R}$$

$\Rightarrow$ Năng lượng liên kết trên một ion:

$$u = \alpha_M Z_1 Z_2 \frac{e^2}{R}$$

CuuDuongThanCong.com https://fb.com/tailieudientucntt

ĐỘ CỨNG CỦA TINH THỂ ION

Tương tự, ta có thể tính được độ cứng của tinh thể ion:

$$B = \frac{\alpha_e^2}{18R_0^4}\left(\frac{R_0}{\rho} - 2\right)$$

Với ρ = const có thứ nguyên là đơn vị chiều dài.

cuu duong than cong. com

3.TINH THỂ ĐỒNG HÓA TRỊ

A. ĐIỂN HÌNH

Các nguyên tố thuộc nhóm IV trong bảng phân loại tuần hoàn như Ge, Si, C ...

Mỗi nguyên tử này có 4 electron hóa trị, khi liên kết với nhau chúng góp 4 electron hóa trị với 4 nguyên tử lân cận tạo thành 4 liên kết đồng hóa trị $\rightarrow$ mỗi liên kết có 2 electron hóa trị.

$\Rightarrow$ **LIÊN KẾT ĐỒNG HÓA TRỊ**

cuu duong than cong. com

Quanh một nguyên tử bất kì có 4 nguyên tử lân cận nằm tại đỉnh của hình tứ diện mà nguyên tử đang xét nằm ở tâm của tứ diện đó $\rightarrow$ kiểu mạng kim cương.

CuuDuongThanCong.com https://fb.com/tailieudientucntt

B. TÍNH CHẤT

- Liên kết đồng hóa trị mạnh.
- E_{lk} khoảng bằng năng lượng liên kết của liên kết ion.
- Đặc điểm nổi bật của liên kết đồng hóa trị là tính định hướng của tinh thể.
- Có nhiệt độ nóng chảy cao, độ rắn và độ bền cao, độ dẻo thấp, độ dẫn điện thấp ở nhiệt độ thấp.

cuu duong than cong . com

4. TINH THỂ KIM LOẠI

A. ĐIỂN HÌNH

- Là các nguyên tố nhóm 1 trong bảng phân loại tuần hoàn. VD: K, Li, Na ...
- Mỗi nguyên tử chỉ có 1 electron hóa trị liên kết yếu với ion.
- Khi các nguyên tử lại gần nhau tạo thành tinh thể, electron hóa trị thoát khỏi nguyên tử (vì hàm sóng phủ nhau) trở thành các electron tự do trong toàn mạng tinh thể $\rightarrow$ Các electron dẫn.

$\Rightarrow$ LIÊN KẾT KIM LOẠI

cuu duong than cong. com

B. TÍNH CHẤT

- Có tính dẫn điện tốt.
- Năng lượng liên kết nhỏ so với năng lượng liên kết ion.
- Khoảng cách giữa các nguyên tử tương đối lớn → các ion ở nút mạng có thể dịch chuyển tương đối xa mà không bị phá vỡ liên kết → độ dẻo cao, dễ uốn, dát, kéo sợi.
- Kim loại nặng có liên kết chắc chắn

  → nhiệt độ nóng chảy cao, độ bền cơ học lớn.
- Cấu trúc: các nguyên tử có xu hướng kéo về mình tối đa các nguyên tử khác

  → hình thành cấu trúc xếp chặt: lập phương

CuuDuongThanCong.com https://fb.com/tailieuduongthucnt

VÍ DỤ

Cu $\Rightarrow$ lập phương tâm mặt

Mg $\Rightarrow$ lục giác xếp chặt.

Mg $\Rightarrow$ lập phương tâm khối

cuu duong than cong. com

CuuDuongThanCong.com https://fb.com/tailieudientucntt