

[www.mientayvn.com](http://www.mientayvn.com)

Dịch tiếng anh chuyên ngành khoa học tự nhiên và kỹ thuật.

Dịch các bài giảng trong chương trình học liệu mở của học viện MIT, Yale.

Tìm và dịch tài liệu phục vụ cho sinh viên làm seminar, luận văn.

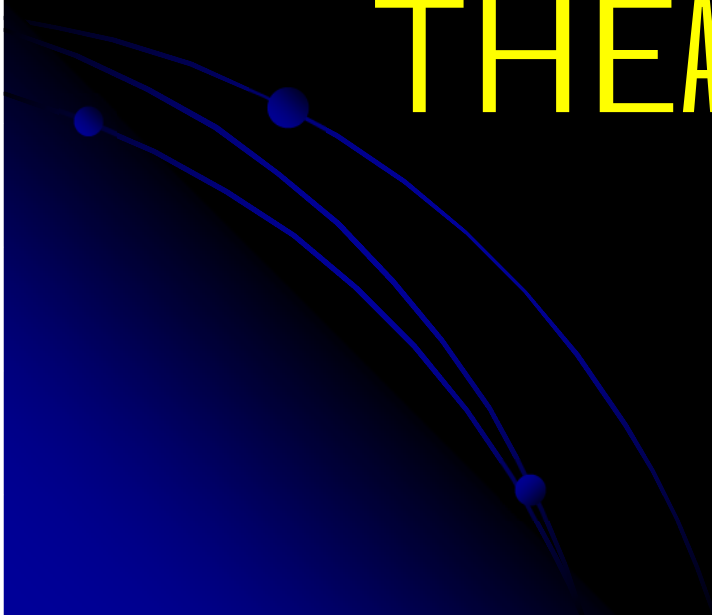
Tại sao mọi thứ đều miễn phí và chuyên nghiệp ???

Trao i tr c tuy n t i:

[http://www.mientayvn.com/chat\\_box\\_li.html](http://www.mientayvn.com/chat_box_li.html)

# Chương II

## LIÊN KẾT TRONG TINH THỂ CHẤT RẮN



# I. CÁC LOẠI LIÊN KẾT TRONG TINH THỂ

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

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

**Tinh thể khí trơ:**

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

**Tinh thể kim loại kiềm:**

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

**Tinh thể nhóm 4 như Ge, Si:**

$$E_{\text{liên kết}} = 4 ; 5 \rightarrow 7,36 \text{ eV/nguyên tử}$$

## 1. BÀN CHẤT CỦA CÁC LÖC TÖÔNG TÁC TRONG TINH THEÁ

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

- + Tác hấp dẫn.
- + Tác đẩy
- + Tác tính ñiễn.

Nếu hợp các tác ñó làm năng lượng hệ giảm  
→ lực hút giữa các nguyên tử sẽ thắng → **tinh thể ñàn hình.**

Nếu hợp các tác ñó làm năng lượng hệ tăng  
→ lực ñẩy thắng → **tinh thể ñông hình thành.**

• Gia số xét tổng tác giữa hai nguyên tử gần nhau nhất cách nhau  $3 \text{ \AA}$

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

$$U_{h \text{ p d n}} \sim 2,4 \cdot 10^{-32} \text{ eV}$$

+ Với các nguyên tử có momen từ có bán bằng magnetron Born năng lượng tổng tác:

$$U_{\text{t\ddot{o}\ddot{o}}} \sim -7 \cdot 10^{-6} \text{ eV}$$

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

$$U_{\text{ñi\~{e}n}} = U_{\text{h\ddot{u}t}} \sim -\frac{e^2}{r} \sim -5 \text{ eV}$$

• Nhờ vậy:

$$\bullet U_{\text{ñi\~{e}n}} \gg U_{\text{t\ddot{o}\ddot{o}}} \gg U_{\text{h\ddot{a}p \text{ đ\ddot{a}n}}$$

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

# TỔNG TÁC DỤNG TÍNH NHIỆM

Tổng tác dụng tính nhiệt trong tinh thể gồm:

Tổng tác dụng hút và tổng tác dụng đẩy

- Tổng tác dụng hút giữa các điện tích trái dấu:  
**electron – hạt nhân**

$$U_{\text{hút}} \sim -\frac{e^2}{r}$$

- Tổng tác dụng đẩy giữa các điện tích cùng dấu:  
**hạt nhân – hạt nhân; electron – electron**

$$U_{\text{đẩy}} = \frac{A}{r^n}$$

Trong đó  $A, n =$  hằng số  $n \gg 1$ ;  $r$ : khoảng cách giữa hai nguyên tử

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

$$U(r) = U_{\text{hút}} + U_{\text{đẩy}}$$

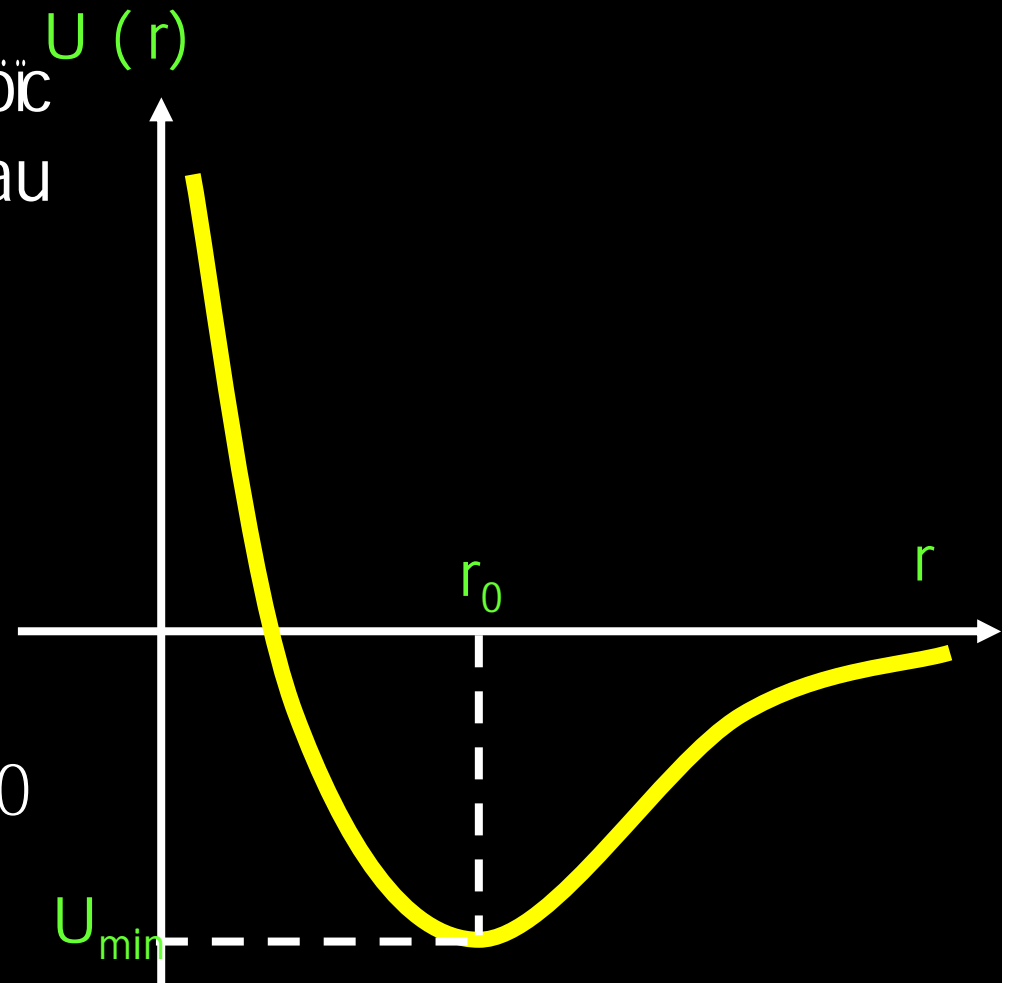
Khi  $r = r_0$ ,  $U(r_0) = U_{\text{min}}$   
 $\Rightarrow r_0 =$  khoảng cách thời  
giữa hai nguyên tử gần nhau  
nhất trong tinh thể

Khi  $r \rightarrow 0$ :

$$U_{\text{đẩy}} \gg U_{\text{hút}} \Rightarrow U(r) \rightarrow \infty$$

Khi  $r \rightarrow \infty$ :

$$U_{\text{đẩy}} \ll U_{\text{h}} = 0 \Rightarrow U(r) \rightarrow 0$$



## 2. CÁC LOẠI LIÊN KẾT TRONG CHẤT RẮN

Sẽ khác biệt giữa các loại liên kết trong chất rắn là do sự phân bố của các mức năng lượng của các nguyên tử

Khi nào các nguyên tử lại gần nhau nên tạo tinh thể chất rắn, chúng có sự phân bố lại các mức năng lượng trong các nguyên tử. Quá trình này thỏa mãn nhiều điều kiện:

- + Bảo toàn năng lượng của hệ
- + Xu hướng sao cho các nguyên tử có lớp vỏ ngoài cùng này  $e^-$ .

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 chuyển dạng các lớp vỏ  $e^-$ .



# CAI LOAI LIEN KEAT CO BAN TRONG TINH THEA

## 1-Lien ket Van der Waals

Lien ket yeu giua cai nguyen tou trung hoa boi tong tai Van der Waals – London do soi thang giang trong phan boanien tích cua cai nguyen tou

## 2-Lien ket ion

Cai nguyen tou trao noi nien tou hoa tro voi nhau nea tao thanh cai ion (+) va ion (-) → lien ket bang loc hut tinh nien cua cai ion trai dau.

## 3-Lien ket none hoa tro

Lien ket giua cai nguyen tou bang cach gop chung cai electron hoa tro → Cai nguyen tou trung hoa co soi phan bo electron chung len nhau mot phan.

## 4-Lien ket kim loai

Cai electron hoa tro nooc giai phong khi nguyen tou va co the di chuyen toi do trong tinh thea Cai ion (+) nooc nam o vu tri nut mang.

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

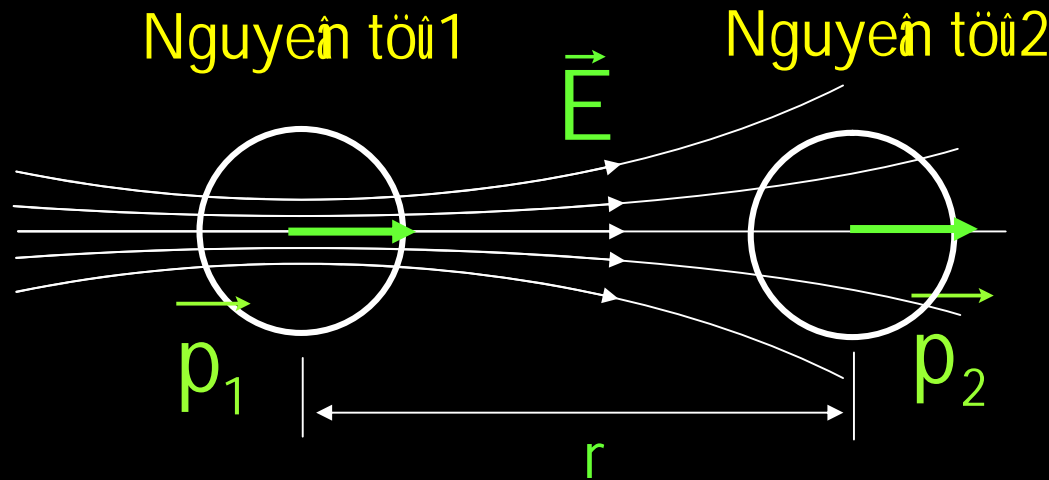
### 1. TINH THỂ KHÍ TRÔ

#### A. NIÊN HÌNH

Các tinh thể khí trô như He, Ne, Ar có **lớp vỏ niên tử** hoàn toàn này, 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

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

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



Tương tác van der Waals – London

Giả sử ở thời điểm  $t$ , nguyên tử 1 có momen lưỡng cực vĩnh cửu theo thời gian  $\vec{p}_1 \rightarrow$  sinh ra một trường điện  $\vec{E}$  có hướng luôn tại tâm của nguyên tử 2 là

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

Momen lưỡng cực ãiệñ cáĩm òĩng tại nguyêĩn tử 2 là  $P_2$ :

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

Trong ãĩ ã  $\alpha =$  ãĩĩpháĩn cáĩ ãiệñ

Theáĩĩĩng tĩĩĩng tại giĩĩĩ hai momen  $\vec{P}_1, \vec{P}_2$  là

$$U_1(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left[ \frac{\vec{P}_1 \cdot \vec{P}_2}{r^3} - \frac{3(\vec{P}_1 \cdot \vec{r})(\vec{P}_2 \cdot \vec{r})}{r^5} \right]$$

Vĩ  $\vec{P}_1 // \vec{P}_2$  ãĩĩĩ:

$$U_1(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left[ \frac{P_1 P_2}{r^3} - \frac{3P_1 r \cdot P_2 r}{r^5} \right] = -\frac{2P_1 P_2}{4\pi\epsilon_0 r^3} = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{4\alpha P_1^2}{r^6}$$

$$U_1(r) = U_{\text{hũĩĩ}} = -\frac{C}{r^6} \Rightarrow \text{Tĩĩĩng tại hũĩĩ}$$

Nguyêĩn tử cáĩĩng gần nhau liêĩĩ kêt cáĩĩng mảĩĩĩ  $\Rightarrow$  Tĩĩĩng tại Van der Waals – Lon don  $\Rightarrow$  ãĩĩĩng vai trũĩĩĩ chính trong cáĩĩĩ liêĩĩ kêt củã cáĩĩĩ tinh thể khí trũĩĩĩ.

Khi ñũa các nguyên tử lại gần nhau hơn  $\rightarrow$  còn thêm tổng tác ñẩy còn ñang:

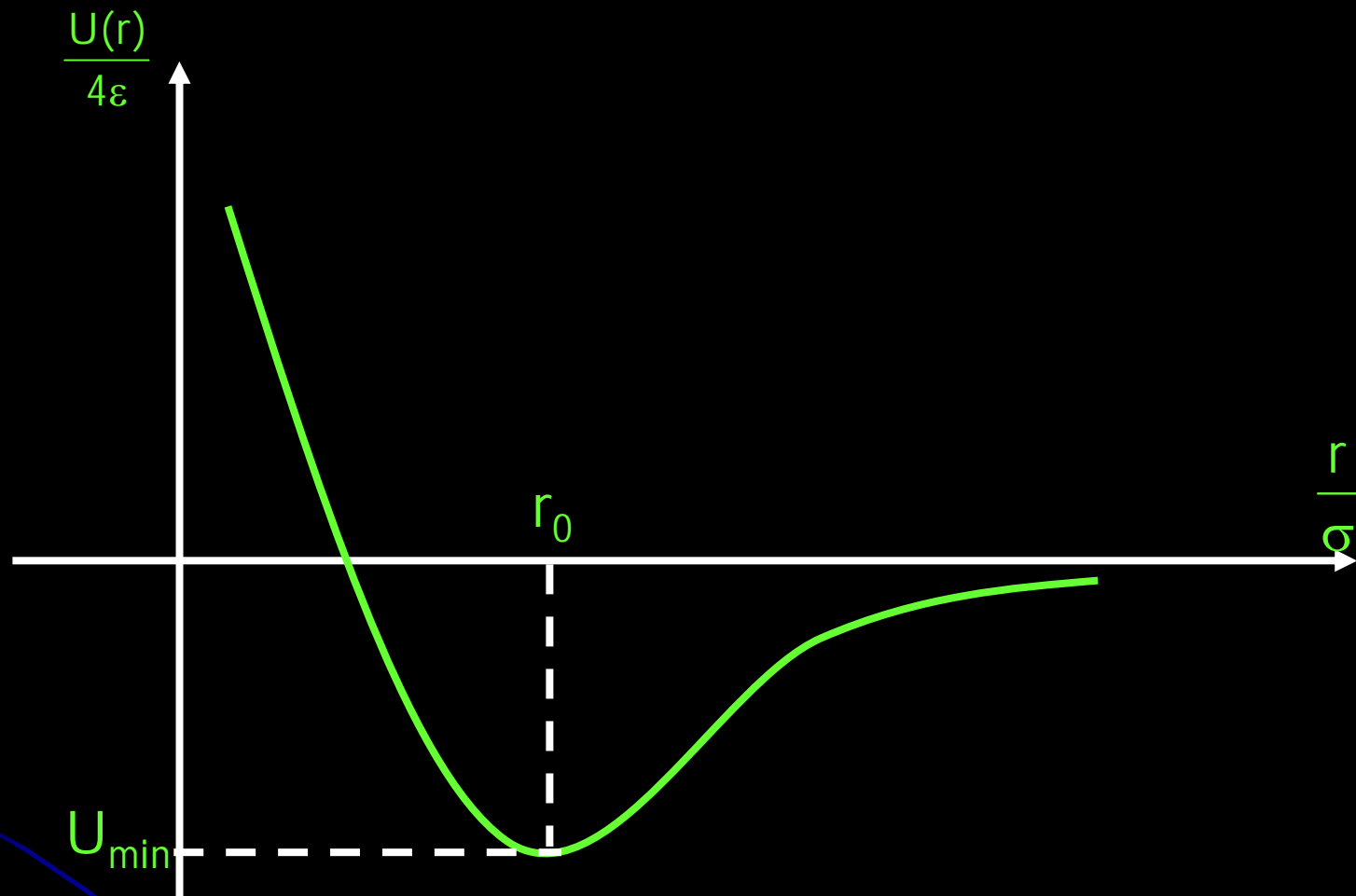
$$U_{\text{ñẩy}} = \frac{A}{r^{12}}$$

The ñang tổng tác toán phần:

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

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

Trong ñoù  $C \equiv 4\varepsilon\sigma^6$  ;  $A \equiv 4\varepsilon\sigma^{12}$  là các hằng số ñang



Theá Lennard – Jones

Vậy: Tổng tác Van der Waals – London ñóng vai trò chính trong liên kết của các tinh thể khí trô.

## B. MỘT SỐ TÍNH CHẤT CỦA TINH THỂ KHÍ TRÔ

- Liên kết của tinh thể khí trô là liên kết Van der Waals → tổng tác dụng → xu hướng các nguyên tử kéo về mình so với các nguyên tử lân cận tới nữa.
  - Tinh thể có cấu trúc xếp chặt: lập phương tâm mặt cho nữa số tinh thể khí trô, và lực giữa các xếp chặt với tinh thể He.
- Các tinh thể khí trô là chất rắn mềm trong suốt có năng lượng liên kết nhỏ và nhiệt nóng chảy thấp, dễ nén.

## Năng lượng liên kết của các tinh thể khí trơ

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

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

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

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

$r_i \equiv R$  : 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 tổng tác của các cặp nguyên tử  $\frac{N \cdot U}{2}$

→ Năng lượng tổng tác tính trên một nguyên tử là

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



Mặt khác, theo thế Lennard-Jones ta có

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

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

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

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



Khoảng cách cân bằng  $R_0$  giữa các lân cận gần nhất ñược tính ñiều kiện:

$$\left. \frac{\partial U}{\partial R} \right|_{R=R_0} = 0$$

$$\rightarrow \frac{\partial U}{\partial R} = 2\varepsilon \left[ -\frac{A_{12}\sigma^{12} \cdot 12}{R^{11}} + \frac{A_6\sigma^6 \cdot 6}{R^5} \right]_{R=R_0} = 0$$

$$\rightarrow \frac{12 A_{12} \sigma^{12}}{R_0^{11}} = \frac{6 A_6 \sigma^6}{R_0^5} \rightarrow R_0 = \sqrt[6]{\frac{2 A_{12}}{A_6}} \cdot \sigma \approx 1.09 \sigma$$

Kết quả lí thuyết này **phù hợp** tốt với kết quả thực nghiệm ñó nói với các **nguyên tử có khối lượng lớn**, còn ñó nói với các nguyên tử có khối lượng nhỏ thì có sai khác ñáng kể **Nguyên nhân là do bỏ qua ñiêng năng của các nguyên tử**

## Năng lượng liên kết cân bằng

Thế  $R_0 = \sqrt[6]{\frac{2A_{12}}{A_6}} \cdot \sigma$  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:

$$u_0 = 2\varepsilon \left[ A_{12} \left( \frac{\sigma}{\sqrt[6]{\frac{2A_{12}}{A_6}} \cdot \sigma} \right)^{12} - A_6 \left( \frac{\sigma}{\sqrt[6]{\frac{2A_{12}}{A_6}} \cdot \sigma} \right)^6 \right]$$

$$u_0 = 2\varepsilon \left[ \frac{A_6^2}{4A_{12}} - \frac{A_6^2}{2A_{12}} \right] = -\frac{A_6^2}{2A_{12}} \varepsilon = -8.6\varepsilon$$

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

Khi **khối lượng giảm**  $\rightarrow$  có sai lệch nhiều với kết quả thực nghiệm.

**Nguyên nhân** là do bỏ qua năng lượng của các nguyên tử

## Ñoäcöng của tinh thể B

Ñoäcöng 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 ñoäcöng của tinh thể

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

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

Ở nhiệt độ  $T = 0^\circ\text{K}$ , áp suất ñiều chỉnh:

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

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

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

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

Với mạng lập phương tâm mặt, một ô mạng chứa 4 hạt và coi thể tích của mỗi hạt gần như bằng thể tích ô mạng:

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

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

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

$$\Rightarrow V = \frac{a^3}{4} = \frac{(R\sqrt{2})^3}{4} = \frac{R^3}{\sqrt{2}} \rightarrow dV = \frac{1}{\sqrt{2}} 3 \cdot R^2 dR$$

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

$$\begin{aligned}
\mathbf{B} &= \frac{\mathbf{R}^3}{\sqrt{2}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \left( \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{R}} \cdot \frac{\sqrt{2}}{3\mathbf{R}^2} \right) \\
&= \frac{\mathbf{R}^3}{\sqrt{2}} \left\{ \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} \left( \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{R}} \cdot \frac{\sqrt{2}}{3\mathbf{R}^2} \right) \cdot \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \mathbf{v}} \right\} \\
&= \frac{\mathbf{R}^3}{\sqrt{2}} \left\{ \left[ \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial \mathbf{R}^2} \cdot \frac{\sqrt{2}}{3\mathbf{R}^2} + \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{R}} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} \left( \frac{\sqrt{2}}{3\mathbf{R}^2} \right) \right] \cdot \frac{\sqrt{2}}{3\mathbf{R}^2} \right\} \\
&= \frac{\mathbf{R}}{3} \left\{ \frac{\sqrt{2}}{3\mathbf{R}^2} \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial \mathbf{R}^2} - \frac{\sqrt{2}}{3} \cdot \frac{2}{\mathbf{R}^3} \cdot \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{R}} \right\} \\
&= \frac{\sqrt{2}}{9\mathbf{R}} \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial \mathbf{R}^2} - \frac{2\sqrt{2}}{9\mathbf{R}^2} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{R}} \\
\rightarrow \mathbf{B} &= \frac{\sqrt{2}}{9} \left( \frac{1}{\mathbf{R}} \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial \mathbf{R}^2} - \frac{2}{\mathbf{R}^2} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{R}} \right)
\end{aligned}$$

Ôi khoàng cách cân bằng, năng löông laïc tieu neân ta coi

- Khi  $R = R_0$  :  $\left. \frac{\partial u}{\partial R} \right|_{R=R_0} = 0$

- $B_0 = \left. \frac{\sqrt{2}}{9R_0} \frac{\partial^2 u}{\partial R^2} \right|_{R=R_0}$

- Vôùi  $R_0 = \sqrt[6]{\frac{2A_{12}}{A_6}} \sigma$  ;  $u = 2\varepsilon \left[ A_{12} \left( \frac{\sigma}{R} \right)^{12} - A_6 \cdot \left( \frac{\sigma}{R} \right)^6 \right]$

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



## 2. TINH THỂ ION

### A. NIỀM HÌNH

- Là các Halogen kiềm: NaCl, LiF, CsCl, ...
  - Các nguyên tử kim loại kiềm có một electron ngoài trò (VD: Na), còn các nguyên tử Halogen có 7 electron ngoài trò (VD: Cl).
  - + Nguyên tử Na nhường 1 electron ngoài trò  $\rightarrow$  ion  $\text{Na}^+$  có 8 electron ô-lô-p ngoài cùng.
  - + Nguyên tử Cl nhận 1 electron ngoài trò  $\rightarrow$  ion  $\text{Cl}^-$  có 8 electron ô-lô-p ngoài cùng.
- $\Rightarrow$  Liên kết ion

## B. TÍNH CHẤT

Tổng tác giữa NaCl là tổng 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 dẫn điện tăng.
- Có điểm nóng chảy cao, nổ cứng giòn, hấp thụ hồng ngoại.

# NAÏNG LÖÖING LIËN KEÁT NAÏNG LÖÖING MAÏNG $U_M$

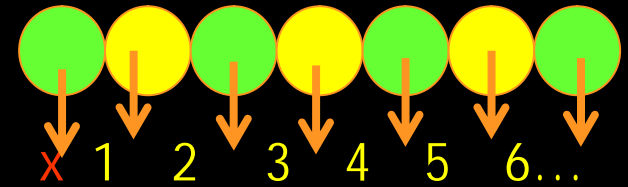
- Ñeã ñôn giañ , ta dung mô hình cáu trúc của 1 tinh thể ion hoã trö 1 :  $\text{NaCl}$
- $U_M$  là năng lööing cần chi ñeã tách tất cả các hạt trong maïng ra xa vô hạn.
- $U_M$  là 1 ñại lööing ñặc trưng trong tinh thể liên quan tới các tính chất của tinh thể ñoã ñen, ñoã giañ ñôu nhiệt, nhiệt ñoã nóng chảy, ñoã bền cô hoïc...

## THÉÁTÁIC DƯNG CỬÁ CHUỒI MÃNG LÊN HÃT X

Theá táic dưng cửá nũa chuoá mãng lên hãt x

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

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



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

$\Rightarrow$  theá năng táic dưng cửá cũ chuoá lên x bằng 2 lần theá năng táic dưng cửá nũa chuoá lên x.

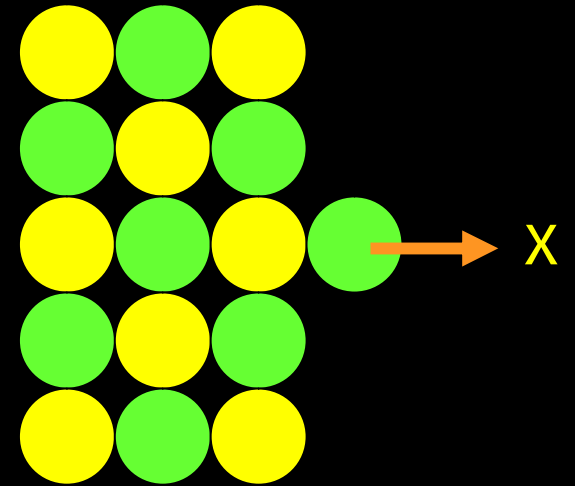
# THEÁTÁIC DUÏNG CUIÁ MAÏT MAÏNG LEÂN X

Theátaic duïng cuiá nõiá maÏt maïng leân x:

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

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

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



$\Rightarrow$  Theátaic duïng cuiá caú maÏt maïng leân x baïng 2 laïn theátaic duïng cuiá nõiá maÏt maïng leân x.

## THEÁ TÁC CỦA MẠNG KHÔNG GIAN LÊN X

Theá tác của nĩa mạng không gian lên x:

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

$\Rightarrow$  Theá tác dùng của cuộn mạng không gian lên x bằng 2 lần theá tác dùng của nĩa mạng lên x.

Do ñó theá tác của toàn mạng tinh thể tác dùng lên x:

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

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 :

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

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

⇒ 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 hộp chất ion với hai  
trò ion bất kỳ  $Z_1, Z_2$  là

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

⇒ Năng lượng liên kết trên một ion:

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



# ÑOÄCÖÖNG CƯA TINH THEÄION

Töông töi, ta cöu theätính ñöôc ñoäcöông cūa tinh theäion:

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

Vöü  $\rho = \text{const}$  cöu thöu nguyêñ laø ñôn vö chieäu dài.

# 3. TINH THEÃĨOÃNG HOÃ TRÒ

## A. ÑIÃN HÃNH

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 ñồng hóa trị → mỗi liên kết có 2 electron hóa trị.

⇒ LIÃN KÃT ÑOÃNG HOÃ TRÒ

Quanh một nguyên tử bất kỳ có 4 nguyên tử lân cận nằm tại ñỉnh của hình tứ diện mà nguyên tử ñang xét nằm ở tâm của tứ diện ñó → kiểu mạng kim cương.

## B. TÍNH CHẤT

- Liên kết ñồng hoà trò mạnh.
- $E_{IK}$  khoảng bằng năng lượng liên kết của liên kết ion.
- Ñặc ñiểm nổi bật của liên kết ñồng hoà trò là **tính ñồng hoà của tinh thể**
- Có ñiểm ñông chảy cao, ñiểm sôi và ñiểm sôi cao, ñiểm ñông thấp, ñiểm ñông ñiểm thấp ở ñiểm ñông thấp.

## 4. TINH THỂ KIM LOẠI

### A. NIỀM 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 ham sống phụ thuộc) trở thành các electron tự do trong toàn mạng tinh thể → Các electron dẫn.

⇒ LIÊN KẾT KIM LOẠI

## 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 ô nư t m ả ng có thể d ỏ ch chuyển t ỏ ng n ỏ ả xa mà không bị phá vỡ liên kết → n ỏ đ ỏ cao, đ ỏ u ỏ n, đ ỏ t, k ỏ s ỏ i.
- Kim loại nặng có liên kết chắc chắn
  - n ỏ i ỏ t n ỏ n ỏ ng ch ỏ t y cao, n ỏ ỏ b ỏ n c ỏ h ỏ i c ỏ l ỏ n.
- **Cấu trúc:** các nguyên tử có xu hướng kết về mình tạo nên các nguyên tử khác
  - hình thành cấu trúc xếp chặt: lập phương tâm mặt

## VÍ DỤ

Cu  $\Rightarrow$  lập phương tâm mặt

Mg  $\Rightarrow$  lục giác xếp chặt.

Mg  $\Rightarrow$  lập phương tâm khối

