



ENERGIJE KRISTALNE REŠETKE

Energija kristalne rešetke

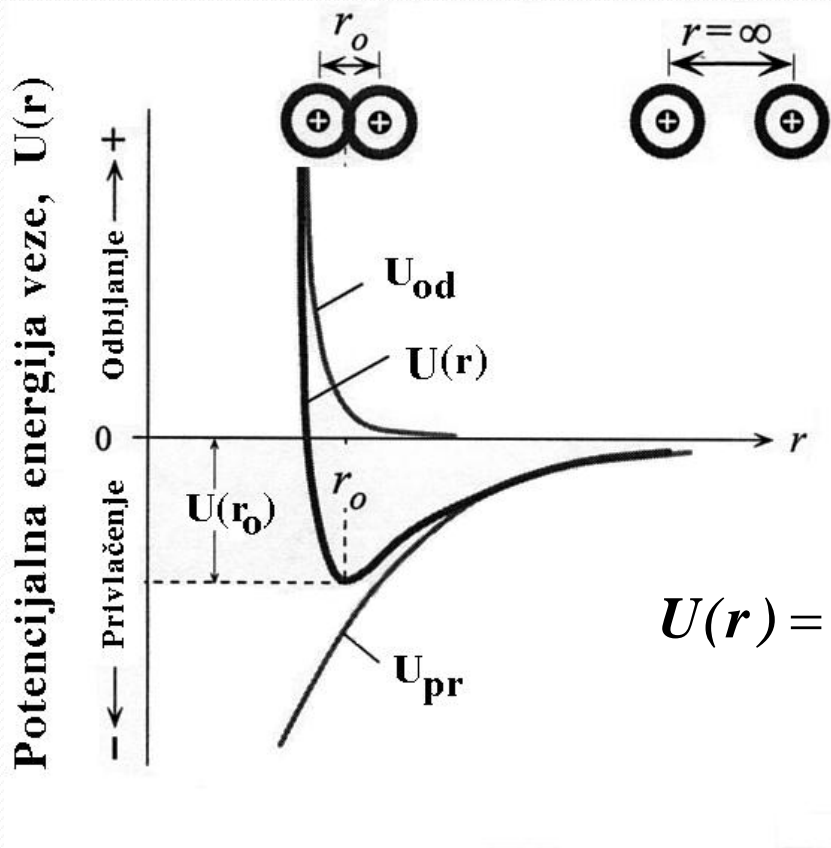
Klasifikacija kristala prema vrsti hemijske veze:

1. **Kovalentni kristali** (kovalentna veza)
2. **Metalni kristali** (metalna veza)
3. **Jonski kristali** (jonska veza)
4. **Molekularni kristali i kristali inertnih gasova** (van der Waals-ova veza)

Energija veze kristala,  energija koja se oslobađa pri stvaranju kristala polazeći od izgrađivača koji su beskonačno udaljeni jedan od drugoga. Ova energija ima znak (-) jer se energija oslobađa.

Energija kristalne rešetke  energija koju treba dovesti kristalu da bi se razgradio na izgrađivače i ovi udaljili na beskonačno rastojanje tako da među njima ne postoji interakcija. Ova energija naziva se i *kohezionom energijom*.

Potencijalna energija veze izmedju dva izgradjivača:



$$U(r) = U_{pr} + U_{od} = -\frac{a}{r^m} + \frac{b}{r^n}$$

Energija kristalne rešetke

$$U_{ij} = -\frac{z_1 \cdot z_2 \cdot e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}} + \frac{b}{r_{ij}^n}$$

$$U_i = U_{priv} + U_{odb} = -\frac{Ae^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \frac{B}{r^n}$$

energija privlačenja *energija odbijanja*

$$A = \sum_{j \neq i} \pm \frac{1}{\alpha_{ij}}$$

Madelungova konstanta

$$B = b \sum_{j \neq i} \alpha_{ij}^{-n}$$

Bornova konstanta

Energija kristalne rešetke

$$U(r) = NE_i = -N \left(\frac{Ae^2}{4\pi\epsilon_0 r} - \frac{B}{r^n} \right) \quad B = \frac{Ae^2 r_0^{n-1}}{4\pi\epsilon_0 n}$$

$$U_{kr}(r_0) = N \frac{Ae^2}{4\pi\epsilon_0 r_0} \left(1 - \frac{1}{n} \right) \quad [\text{kJ/m}^3].$$

$$U_{kr}(r_0) = N_A \frac{Ae^2}{4\pi\epsilon_0 r_0} \left(1 - \frac{1}{n} \right) \quad [\text{kJ/mol}]$$

Jangov modul elastičnosti

- Od energije kristalne rešetke zavise osobine kristala: koeficijent termičkog širenja, Young-ov moduo elastičnosti, kompresibilnost.
- Jangov modul elastičnosti (Y) čvrstih materijala odnosi se na sposobnost ovih materijala da se elastično deformišu pod dejstvom spoljašnje sile.
- Ukoliko je veći modul elastičnosti utoliko treba veća sila da se kristal elastično deformiše.

Modul elastičnosti dat je izrazom:

gde je σ naprezanje na smicanje (V/m^2), a ϵ deformacija ($\partial l/l$)

- Pri delovanju spoljašnje sile (F) dolazi do povećanja rastojanja između jona (atoma) u kristalnoj rešetki tako da deformacija ($\partial l/l$) odgovara deformaciji ($\partial r/r$).

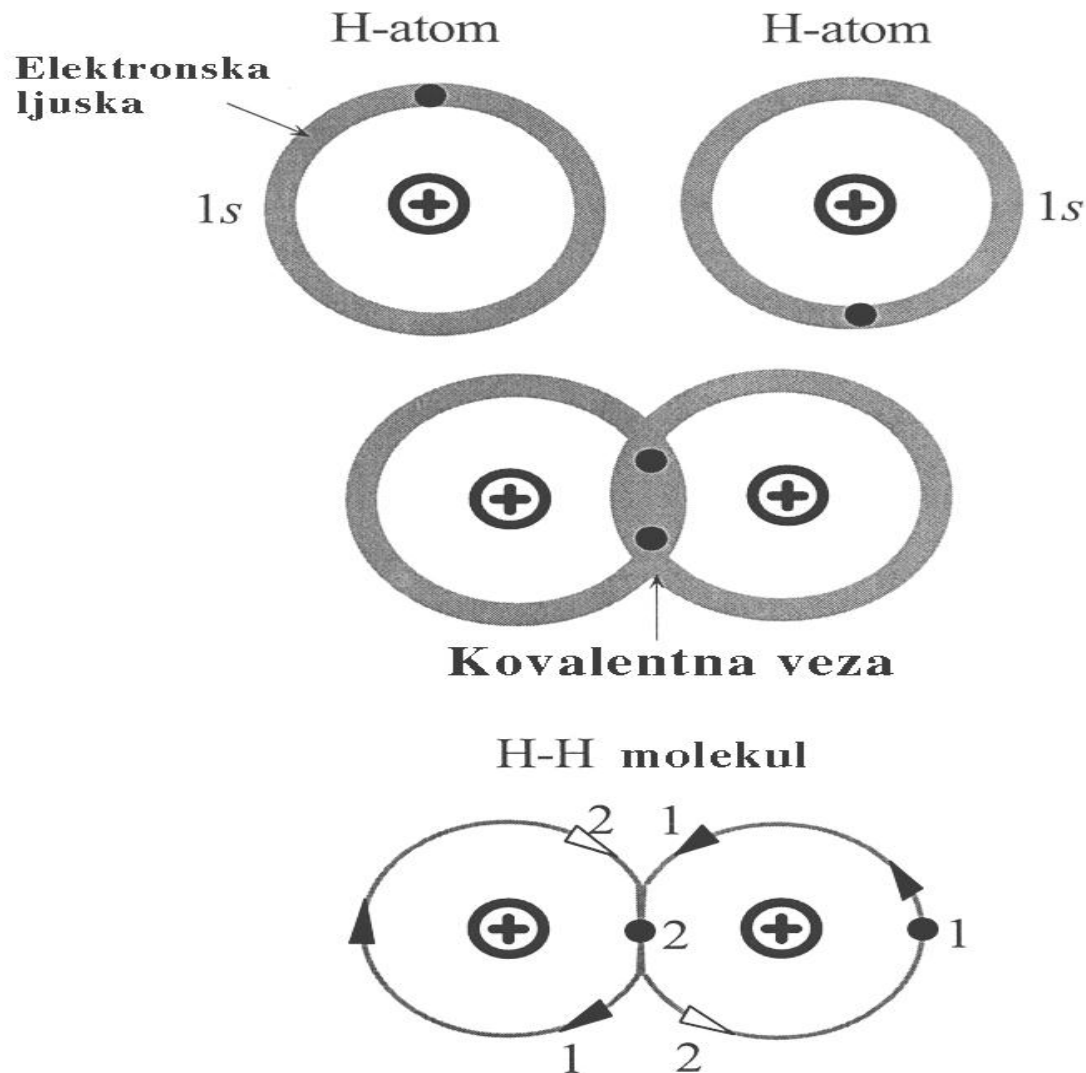
- Sila F predstavlja prvi izvod potencijalne energije veze

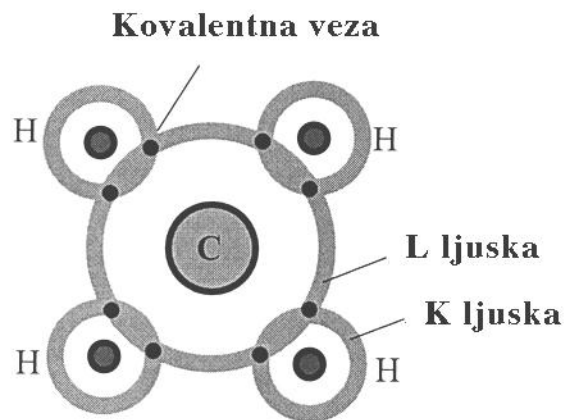
pa se može napisati da je modul elastičnosti:

$$Y = \frac{1}{r} \left[\frac{d^2 U}{dr^2} \right]_{i=r_0}$$

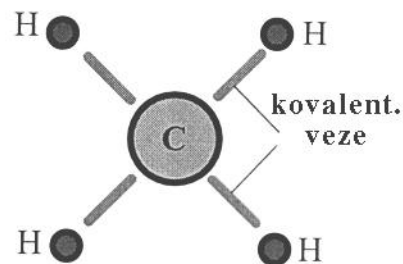
Kovalentni kristali

Kovalentna veza formira se između atoma visoke elektronegativnosti.

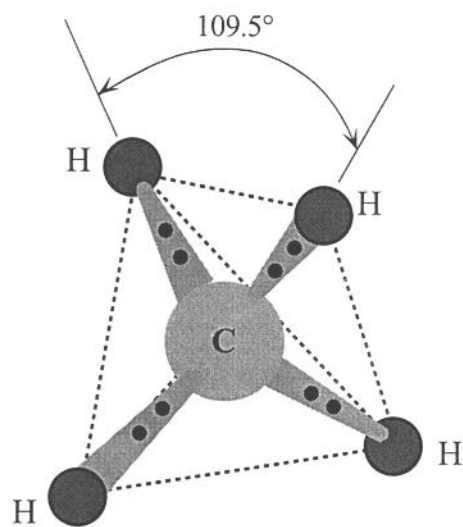




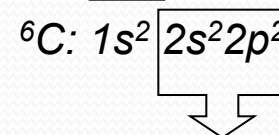
(a)



(b)



(c)



valentni elektroni

- (a) Kovalentna veza u metanu CH_4 uključuje četiri atoma H koji uparuju elektrone sa jednim C atomom. Četiri kovalentne veze su identične.
- (b) Šematski prikaz veza.
- (c) U tri dimenzije, zbog simetrije, veze su usmerene ka rogljevima tetraedra.

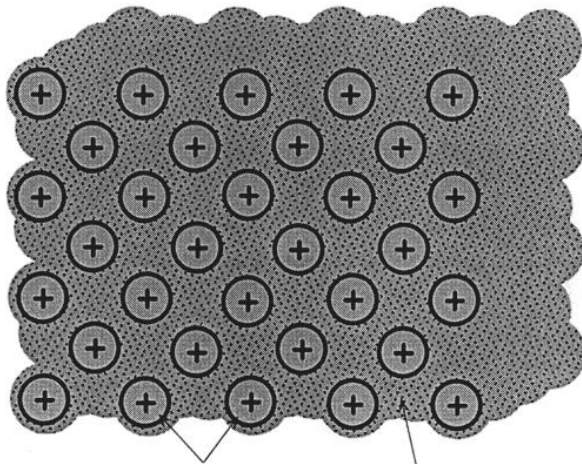
Kovalentni kristali

Osobine kovalentnih kristala

1. Najjača veza \Rightarrow velika vrednost energije \Rightarrow
 \Rightarrow visoka temperatura topljenja i velika tvrdoća
2. Stroga usmerenost veza \Rightarrow veliki moduo elastičnosti \Rightarrow
 \Rightarrow velika krtost kristala
3. Elektroni su raspodeljeni između 2 atoma \Rightarrow električna provodnost
mala termička provodnost srednja

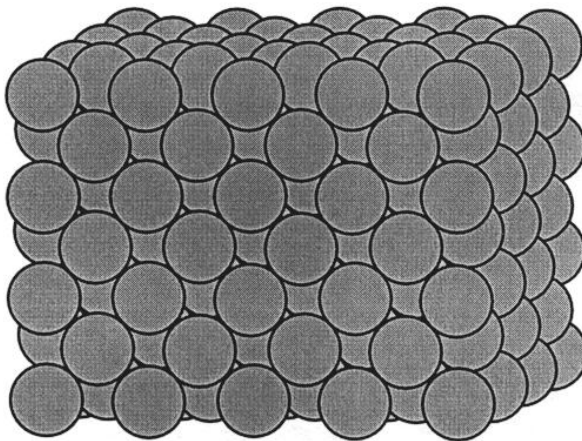
Metalni kristali

Kovalentna veza formira se izmedju atoma niske elektronegativnosti.



Pozitivna jezgra
jona metala

Slobodni valentni
elektroni formiraju
elektronski gas



Atomi metala imaju mali broj valetnih elektrona. Elektroni su delokalizovani (slobodni); formiraju elektronski oblak ostavljajući pozitivne jone u čvorovima rešetke.

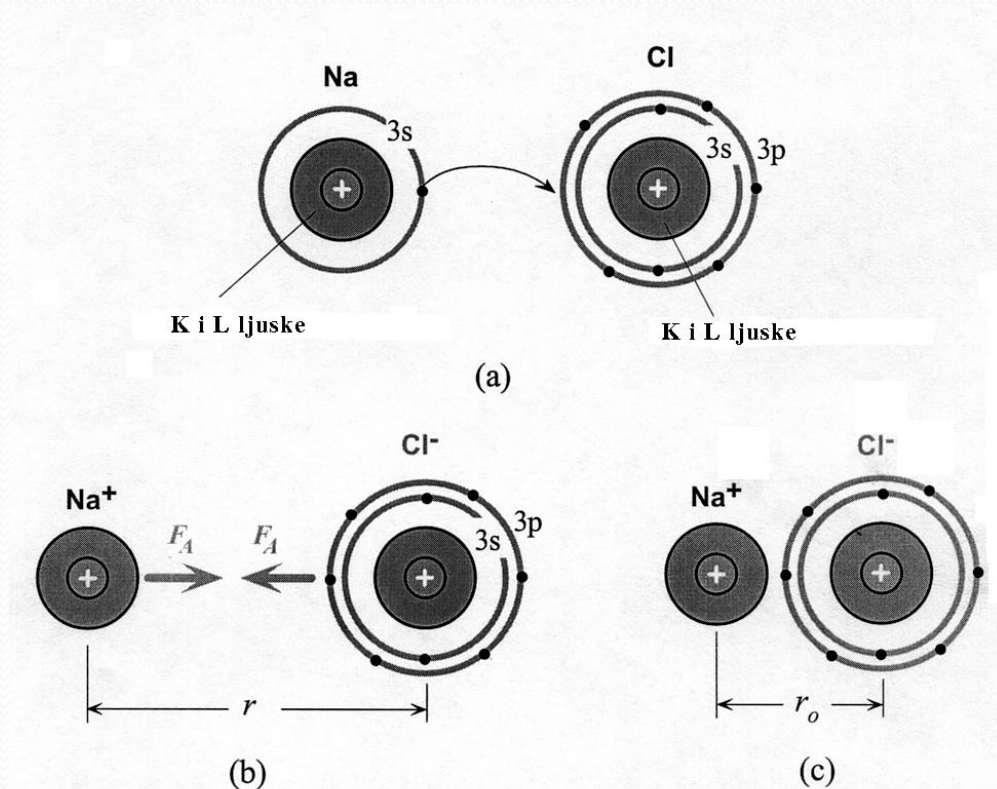
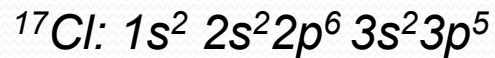
Metalni kristali

Osobine metalnih kristala

1. Jaka veza (slabija od kovalentne i jonske) ⇒
⇒ srednja temperatura topljenja
2. Neusmerenost veze ⇒ mali moduo elastičnosti ⇒
⇒ velika plastičnost
3. Elektroni su raspodeljeni izmedju svih atoma ⇒
⇒ električna provodnost velika
⇒ termička provodnost velika

Jonski kristali

Jonska veza formira se između atoma različite elektronegativnosti (jedan atom niske, drugi visoke elektronegativnosti).



Formiranje jonske veze između Na i Cl atoma u NaCl. Privlačenje jona je pod dejstvom Kulonovih elektrostatičkih sila.

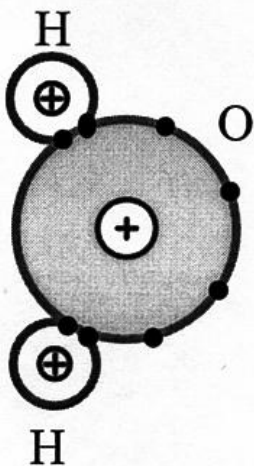
Jonski kristali

Osobine jonskih kristala

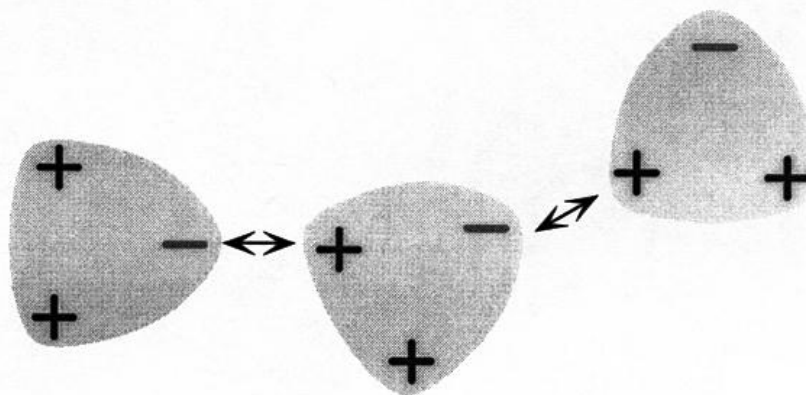
1. Jaka veza (nešto slabija od kovalentne) \Rightarrow velika energija \Rightarrow
 \Rightarrow visoka temperatura topljenja i velika
tvrdoća
2. Neusmerenost veza \Rightarrow veći moduo elastičnosti \Rightarrow
 \Rightarrow mogućnost sečenja
3. Elektroni su unutar rigidno pozicioniranih jona \Rightarrow
 \Rightarrow električna provodnost mala
termička provodnost manja nego kod metanih
i kovalentnih kristala

Molekularni kristali

Van der Waals-ove veze prisutne su u molekularnim kristalima i kristalima inertnih gasova. U **molekularnim kristalima** posledica su elektrostatičkog privlačenja polarnih molekula (poseduju stalne dipolne momente).



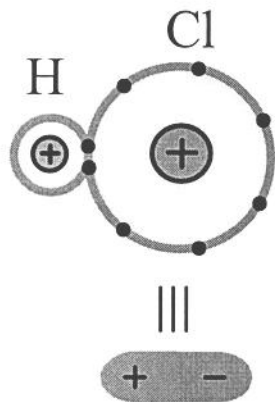
(a)



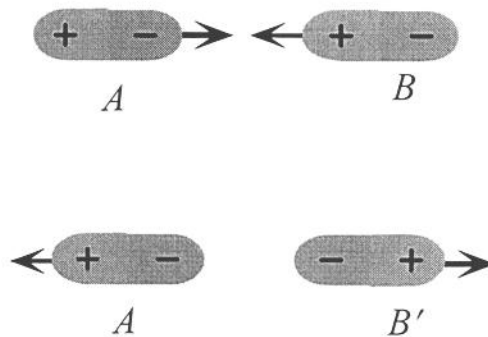
(b)

(a) Polarni molekul H_2O ima stalan dipolni momenat.

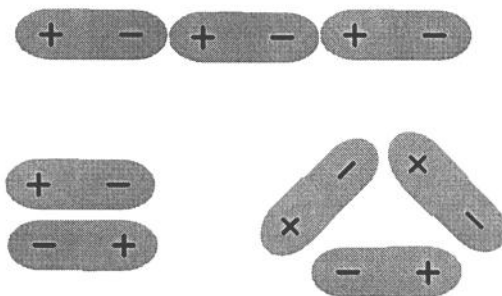
(b) Elektrostatičko privlačenje različitih dipolnih momenata H_2O dovodi do stvaranja van der Waals-ovih veza



(a)



(b)



(c)

- (a) Polarni molekul HCl (sa kovalentnom vezom izmedju atoma H i Cl) poseduje stalan dipolni momenat.
- (b) Dipoli mogu da se privlače ili odbijaju zavisno od njihove relativne orijentacije
- (c) Pogodno orijentisani dipoli se elektrostatički privlače i formiraju van der Waals-ove veze