

### 3. Близко и далечно подреждане в кондензираната материя.

#### А. Близко подреждане в кондензираната материя.

Локалното разпределение на атомите в кондензираната фаза се описва със следните характеристики:

1. Координационно число – брой най-близки съседи на даден атом. В кристалите е точно определено число, в аморфните вещества – има статистически характер.

2. Разстояние от най-близките съседи до дадения атом.

3. Ъглово разпределение на съседните атоми.

Близко подреждане има във всички видове кондензирани среди. Но в кристалите всичките характеристики са много точно фиксирани и се повтарят за атомите в целия обем, затова подреждането им е далечно.

Близко подреждане имат аморфни вещества, течности, стъкла и др.

*Течности* – Кондензирани фази в термодинамично равновесие, т.к се характеризират с минимум на свободната енергия в определен температурен интервал. Атомите пребивават в равновесните положения кратко време (10-11 – 10-12)s, след което заемат ново равновесно положение.

*Аморфни вещества* – Твърди некристални материали, които наподобават течностите, но скоковете между равновесните положения са много редки. Наричат ги преохладени течности. В определен температурен интервал се характеризират със свободна енергия, по-голяма от тази на аналогичното кристално състояние. Преходът в кристално състояние е бавен и практически не се реализира. Аморфните вещества са термодинамично метастабилни с изотропни свойства във всички посоки и без определена температура на топене.

*Стъкла* – Аморфни материали, които се получават от стопилки при бързо охлаждане. Характеризират се с определена температура на всъскляване и преходът стъкло – стопилка е обратим. Стъклата могат да кристализират полесно от другите аморфни материали.

#### Модели на вещества с близко подреждане

- Микрочристален модел – далечно подреждане се реализира в малки области (10-7 – 10-8)m. Течни метали.
- Непоредени кристални структури – като се следва пространственото подреждане на кристала, атомите на различните елементи се редуват хаотично. Метални и полупроводникови сплави.
- Случайна плътна опаковка на твърди сфери, поставени в кутия с гофрирани стени.
- Непрекъснатата случайна мрежа от междуатомни връзки. Някои видове стъкла.

## **Изследване на близкото подреждане**

Описва се с положението на атомите в реалното пространство, като се изследват следните функции:

1. Функция на радиалното разпределение – плътността на атомите в сферичен слой с радиус  $dr$  около даден атом, поставен в центъра  $r=0$ . Има максимуми за онези стойности на  $r$ , които съответстват на средните разстояния между дадения атом и неговите първи, втори, трети и т.н. съседи.
2. Функция на разпределение на валентните ъгли около средната стойност.
3. Брой на връзките между еднакви по тип или различни атоми. Съществуват дефекти, които най-често са атоми от друг тип или с друга валентност.

## **Основни методи за изследване:**

1. Дифракция на рентгенови лъчи, неутрони и електрони. Отклоненията от идеалната дифракционна картина (характерна за веществата с далечно подреждане) носят информация за близкото подреждане в “неидеални” периодични структури.
2. Изследване на спектрите на трептения на атомите и молекулите около равновесните положения – раманова спектроскопия, инфрачервена спектроскопия, спектроскопия на нееластично разсейване на неутрони и др.

## **Б. Далечно подреждане в кондензираната материя.**

Далечното подреждане представлява строго периодично пространствено подреждане на атомите, молекулите или йоните в кондензирани среди, което обхваща целия обем.

Далечно подреждане на атомите и молекулите има в кристалите и в някои квазиедномерни структури, като полимери, спирални полимери и др. Кристалите представляват кондензирани среди в твърдо състояние и тяхната свободна енергия при дадена температура е най-ниска в сравнение с по-малко подредените фази на същото вещество. Кристалите се срещат в природата много по-често, отколкото аморфните вещества.

Основна характеристика на кристалите е тяхната симетрия. Симетрията в значителна степен изразява свойствата на кристала като една геометрична фигура, без да се вземат под внимание конкретните свойства на взаимодействащите си частици.