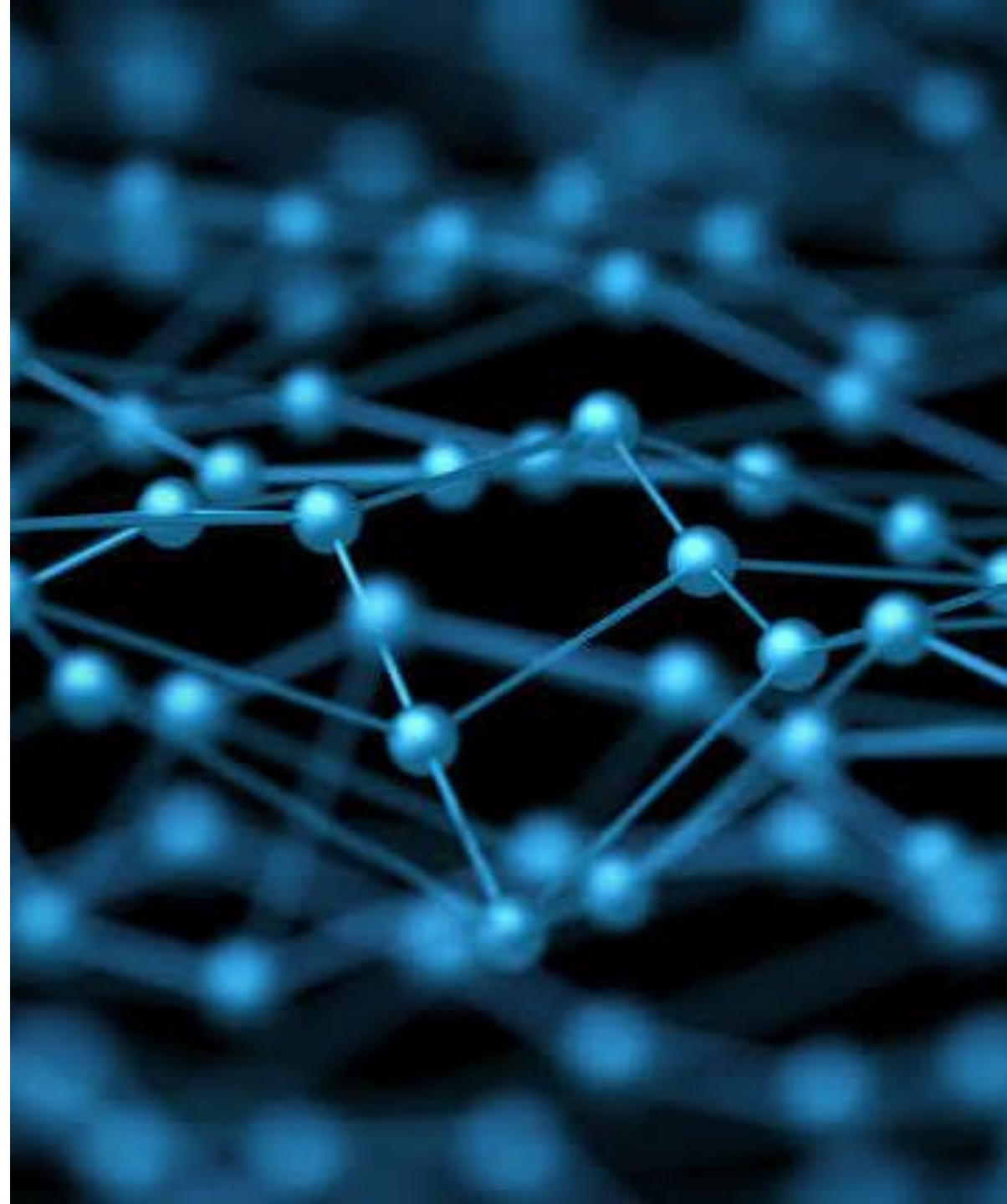

FYZIKA KONDENZOVANÉHO STAVU

1. prezentace



prof. RNDr.

Kristián Máthis

Ph.D., DrSc.

- Katedra fyziky materiálů, MFF UK
- 121 16 Praha 2, Ke Karlovu 5, č. dv. F144
- E-mail: kristian.mathis@matfyz.cuni.cz
- Konzultační hodiny: dle domluvy
- Studijní materiály: web



Doporučená literatura

- Ch. Kittel – Úvod do fyziky pevných látek, Academia
- I.Kraus, J.Fiala – Elementární fyzika pevných látek, Nakladatelství ČVUT
- V. Valvoda, M. Polcarová, P. Lukáč – Základy strukturní analýzy, Nakladatelství UK
- P. Lukáč, B. Sprušil, P. Kratochvíl – Úvod do fyziky kovů I, SNTL/Alfa
- R. Kužel, M. Saxlová, J. Šternberk – Úvod do fyziky kovů II, SNTL/Alfa
- J. Sólyom – Fundamentals of the Physics of Solids, Springer

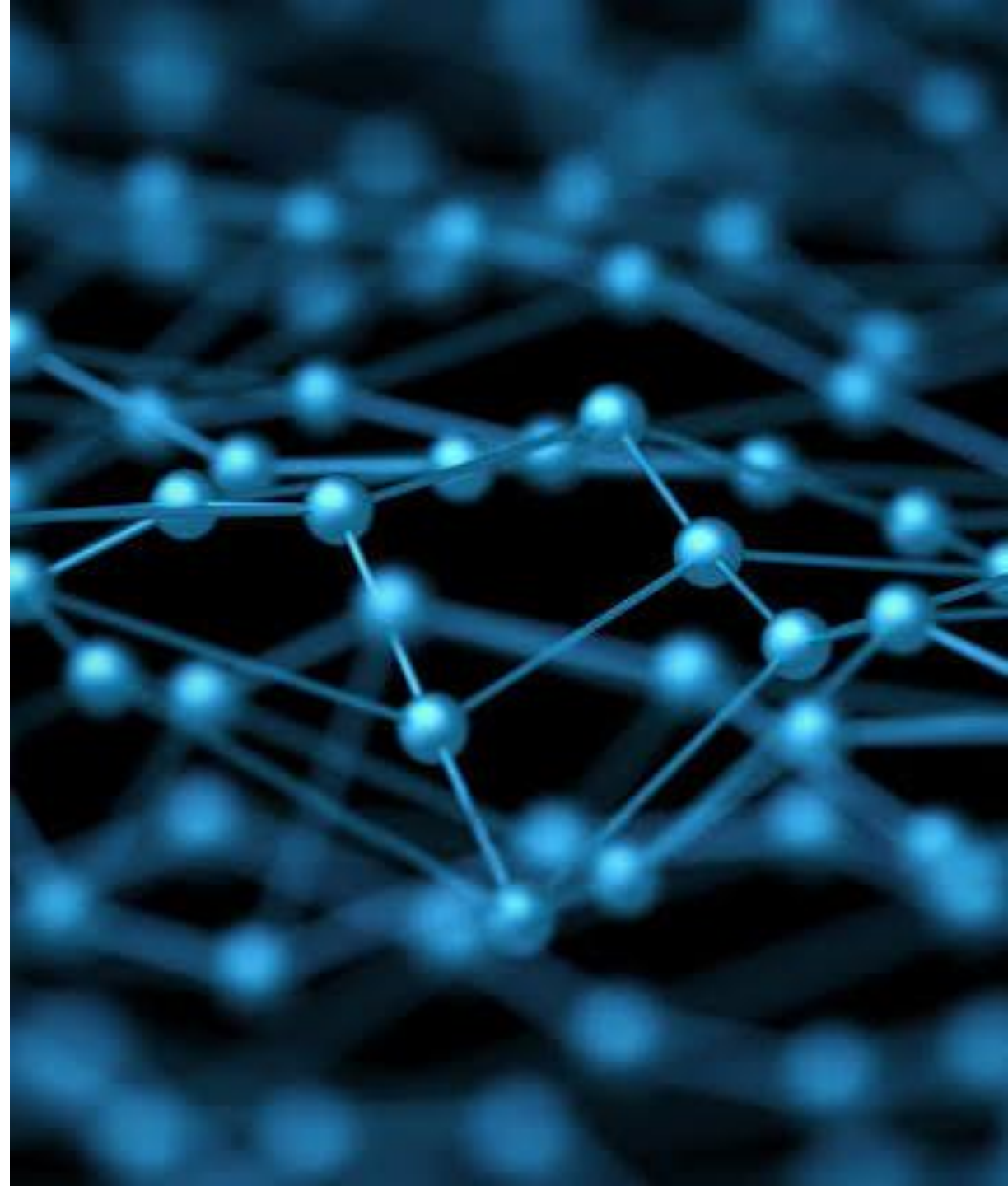
Doporučené cvičení

- Praktické aplikace fyziky kondenzovaného stavu - NFUF701

doc. D. Drozdenko, doc. Z. Drozd

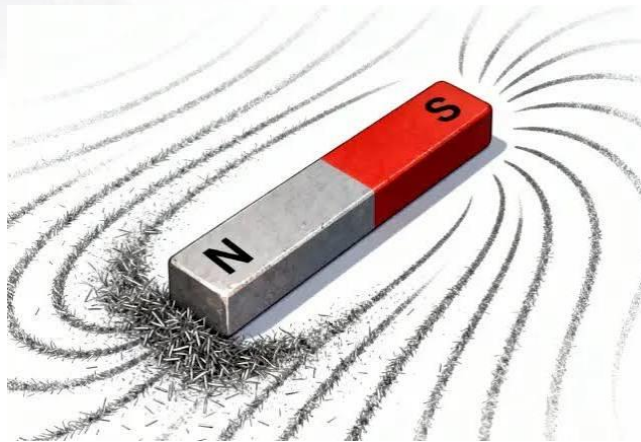
Osnova

- Úvod
- Rozdělení kondenzovaných látek
- Vznik kondenzované fáze
- Vazby



Fyzika kondenzovaného stavu

- Co mají mikrostrukturálně společného tyto systémy?

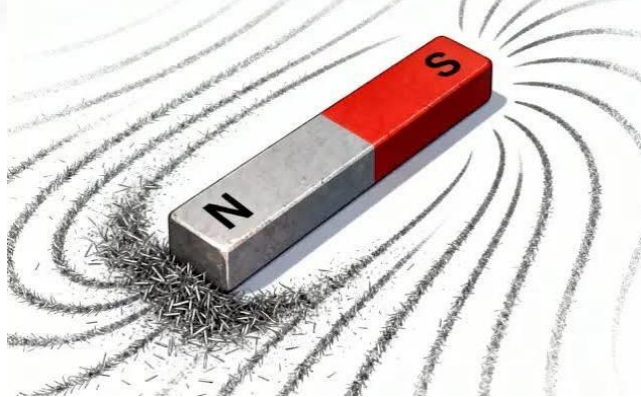


Fyzika kondenzovaného stavu

- Co mají mikrostrukturálně společného tyto systémy?



VNITŘNÍ STRUKTURA



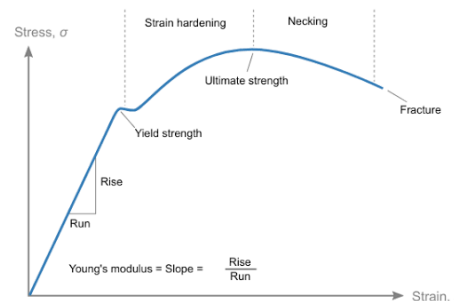
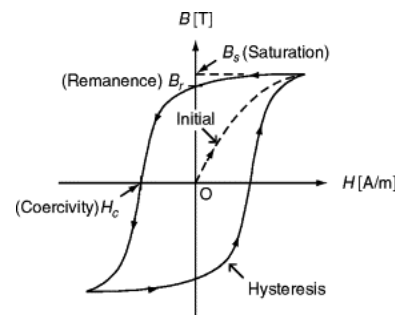
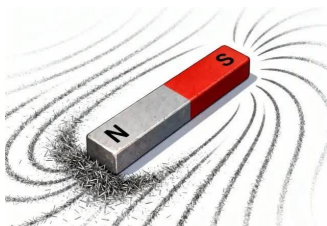
Fyzika kondenzovaného stavu

Vnitřní struktura – kolektivní chování atomů

- Vazby
- Krystalová struktura
- Elektronová struktura

- Vlastnosti materiálů

- Technologie

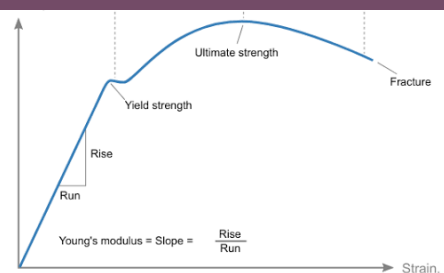


Fyzika kondenzovaného stavu

Vnitřní struktura – kolektivní chování atomů

- Vazby

**Jak z několika chemických prvků
vznikají polovodiče, magnety,
konstrukční materiály?**



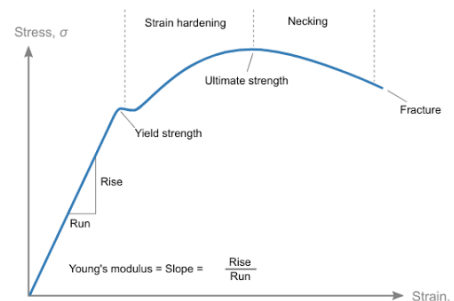
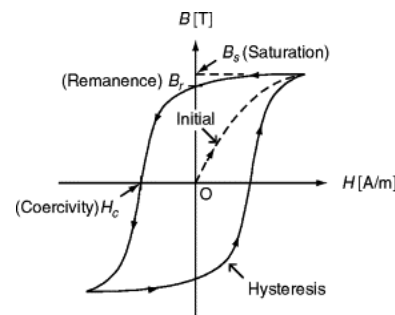
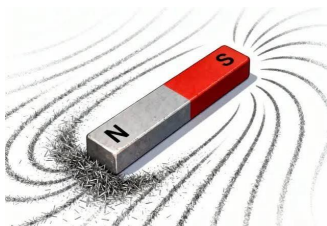
Fyzika kondenzovaného stavu

Vnitřní struktura – kolektivní chování atomů

- Vazby
- Krystalová struktura
- Elektronová struktura

- Vlastnosti materiálů

- Technologie

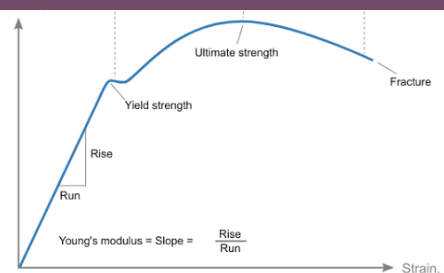


Fyzika kondenzovaného stavu

Vnitřní struktura – kolektivní chování atomů

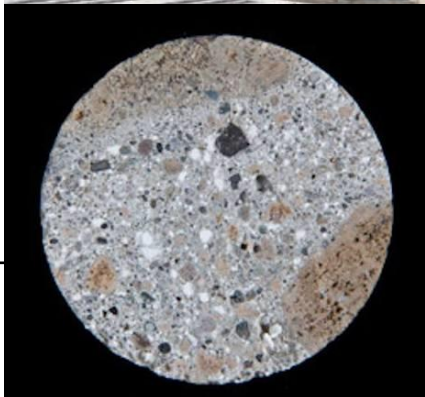
- Vazby

Fyzika kondenzovaného stavu – základní pilíř současných technologií



Trochu historie, aneb FKS v starověku

- **Colosseum** – travertinové bloky, skládány na sebe bez použití malty



Spojování travertinů – železné skoby v olovu ve tvaru U a H – korozní ochrana + tlumení vibrací

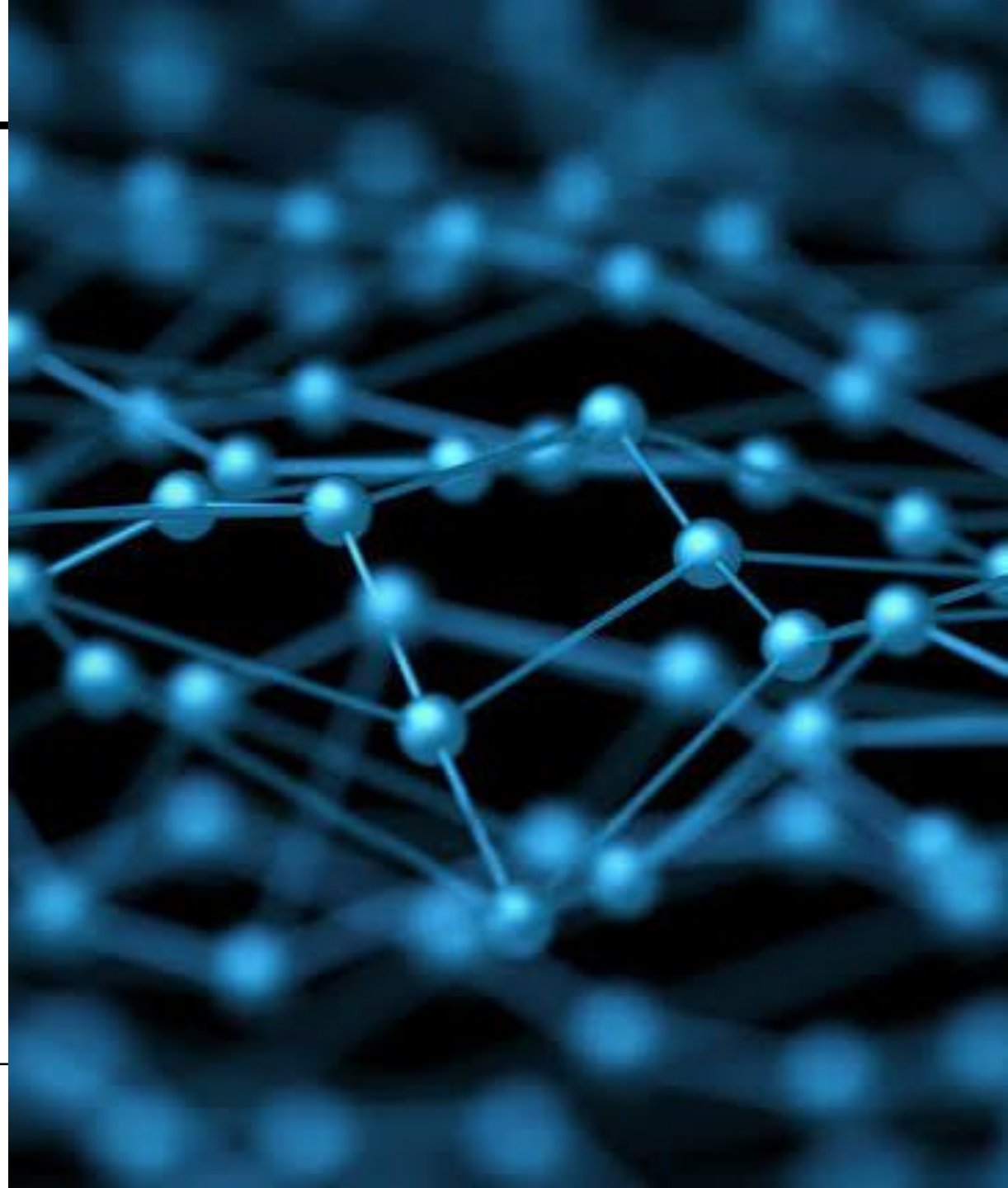
Bezúdržbový provoz jádra zdí a základů – samohojivý římský beton

Bílé minerální úlomky v betonu – vápenné klasty

Trhlina → interakce dešťové vody s klasty → rekrystalizace ve formě uhličitanu vápenatého (CaCO_3) → zacelení trhliny

Osnova

- Úvod
- **Rozdělení kondenzovaných látek**
- Vznik kondenzované fáze
- Vazby



Rozdělení kondenzovaných látek

- **Kapalné látky**

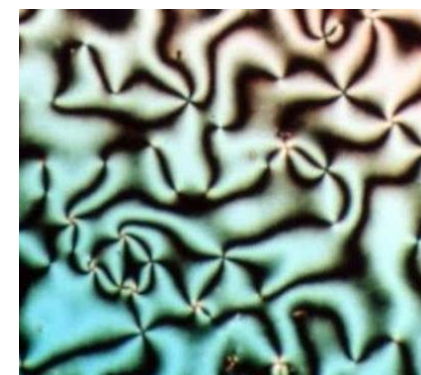
- Newtonovské
- Neneutronovské

- **Pevné látky**

- Krystalické
- Amorfní
- Polymery

- **Mezomorfnní látky**

Tekuté krystaly



Rozdělení kondenzovaných látek

- **Kapalné látky**

- Newtonovské
- Nenewtonovské

- **Pevné látky**

- Krystalické
- Amorfní
- Polymery

- **Mezomorfnní látky**

Tekuté krystaly



Kapalné látky

- **Newtonovské**

- Přímá úměrnost mezi rychlostí deformace a tečným napětím v tekutině

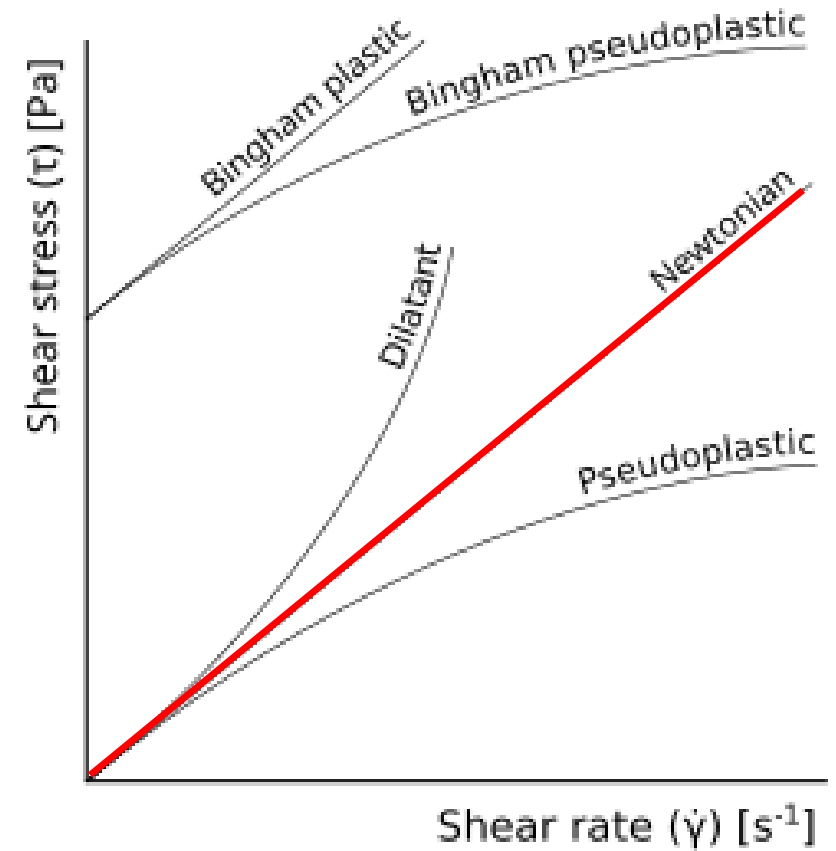
- $\tau = -\eta\dot{\gamma}$,

η – dynamická viskozita, $\dot{\gamma}$ – rychlost def.

- η nezávislá na rychlosti a velikosti působící síly, např. voda, ethanol, rostlinné oleje

- **Nonnewtonovské**

- $\tau^n = 2\eta^*\dot{\gamma}$, pro určení η^* je nutné zjistit materiálové konstanty



Nenewtonovské kapaliny

Chování	Model	Vlastnost	Příklad
Viskoelastické $\sigma = E^* \varepsilon + \eta^* \dot{\varepsilon}$	Maxwellův model	Kombinace elastických i viskózních vlastností	Inteligentní plastelína

- Dlouhý čas deformace – chová se jako kapalina
- Krátký čas deformace – chová se jako pevná látka

Deborahino číslo – poměr charakteristického relaxačního času materiálu (τ) a charakteristického času příslušného deformačního mechanismu (T)

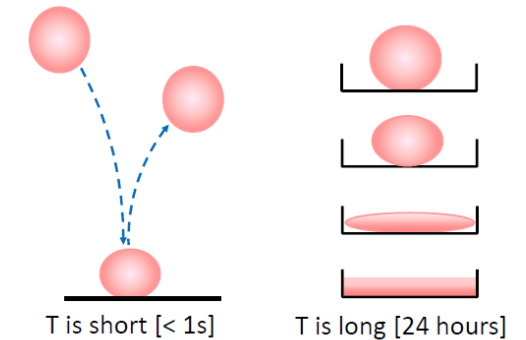
$$De = \tau / T$$

Vysoké De – chová se jako pevná látka

Nízké De – chová se jako kapalina

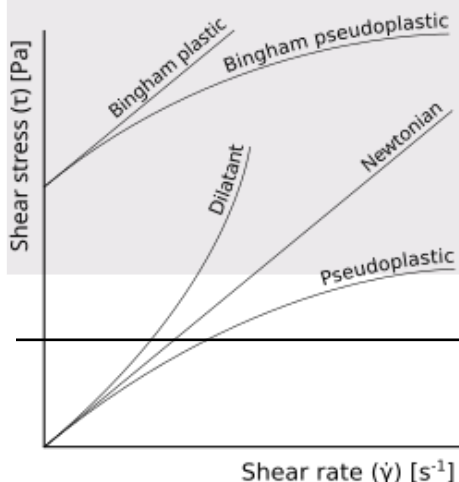
Hookovská pevná látka- $\tau \rightarrow \infty$

Newtonovská kapalina - $\tau \rightarrow 0$



Nenewtonovské kapaliny

Chování	Model	Vlastnost	Příklad
Viskoelastické	Maxwellův model	Kombinace elastických i viskózních vlastností	Inteligentní plastelína
Časově závislá viskozita	Reopexní	Viskozita roste trváním napětí	Inkoust do tiskárny, sádrová kaše
	Tixotropní	Viskozita klesá trváním napětí	Nátěrové barvy
Nenewtonovská viskozita	Dilatantní	Viskozita roste velikostí napětí	Škrobové suspenze
	Pseudoplastické	Viskozita klesá velikostí napětí	Kečup, krev
	Binghamské	Tečení od určitého napětí	Zubní pasta, čokoláda



Rozdělení kondenzovaných látek

- **Kapalné látky**

- Newtonovské
- Nenewtonovské

- **Pevné látky**

- Krystalické
- Amorfní
- Polymery

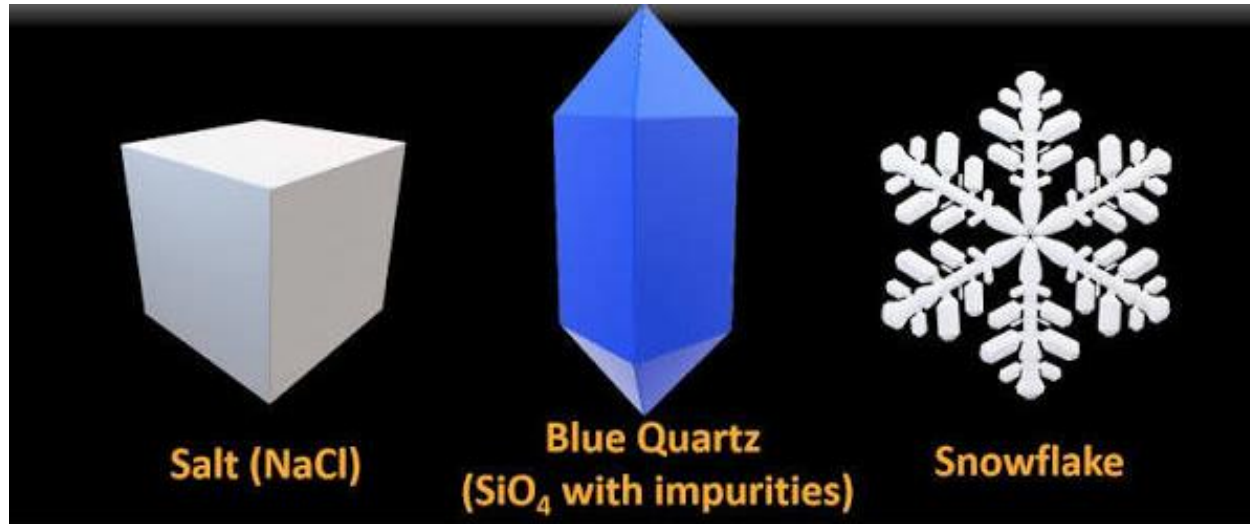
- **Mezomorfnní látky**

Tekuté krystaly



Krystalické látky

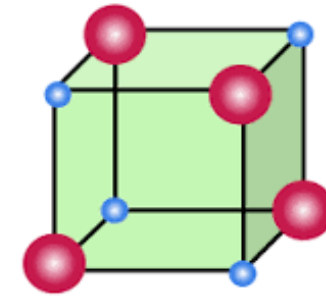
- Pravidelná struktura (krystalová mřížka)
- Uspořádání na dlouhou vzdálenost



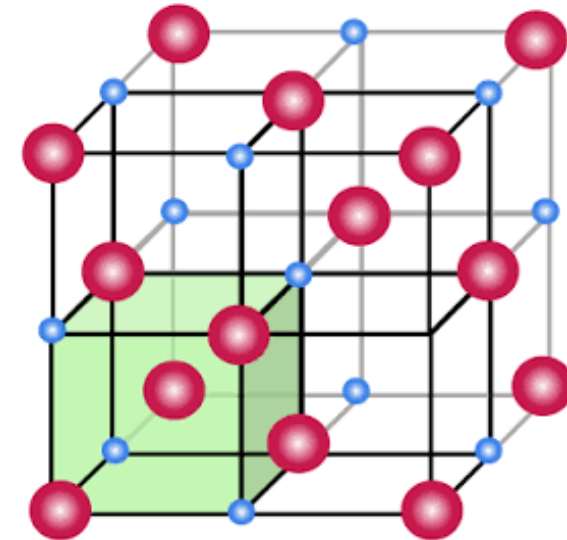
Si



Cu



Unit Cell



Crystal Lattice

Krystalické látky

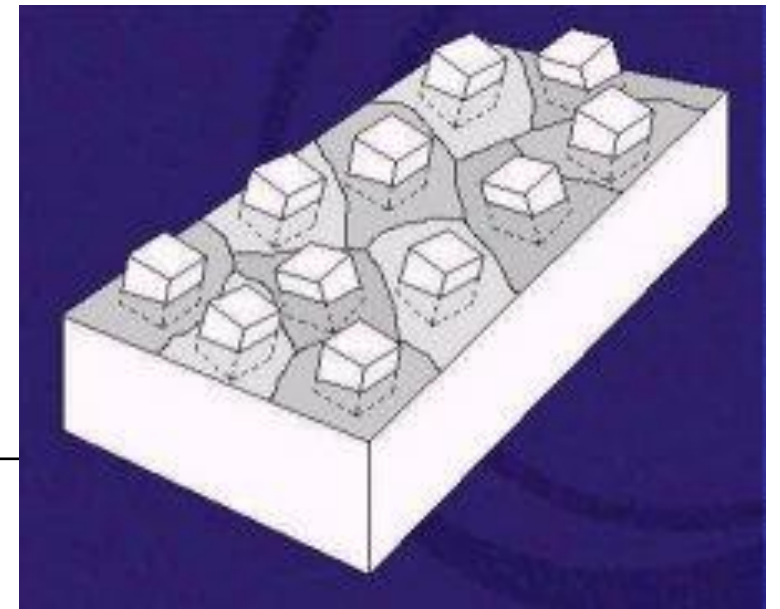
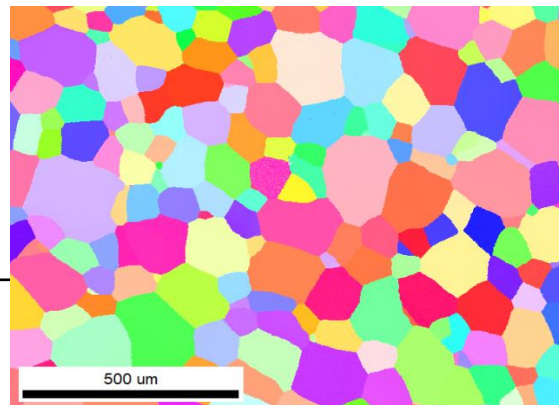
- **Monokrystaly**

- jediná souvislá krystalová mřížka v celém objemu;
bez vnitřních hranic
- Zpravidla anizotropní fyzikální vlastnosti



- **Polykrystaly**

- skládá se z drobných krystalitů (zrn), které jsou spojené – mají vnitřní hranice, a zrna jsou různě orientovaná

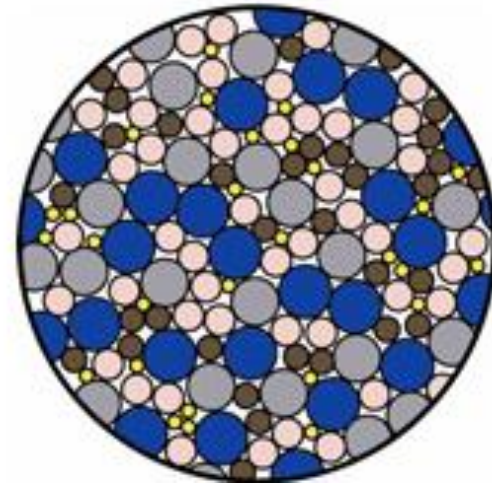
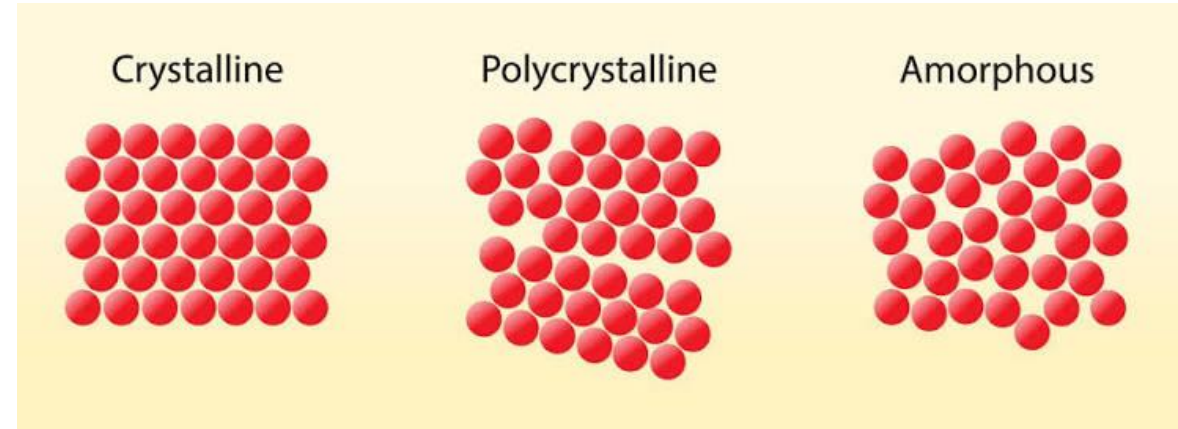


Amorfní látky

- Nemají pravidelnou krystalickou strukturu
- Uspořádání na krátkou vzdálenost
- Fyzikální vlastnosti jsou zpravidla izotropní

Příklady:

- Přírodní: jantar, obsidián
- Umělé: sklo, guma, kovová skla



Polymery

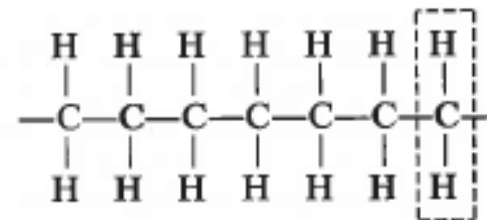
Makromolekula složená z mnoha opakujících se **strukturních jednotek - monomerů**

Typy strukturních jednotek

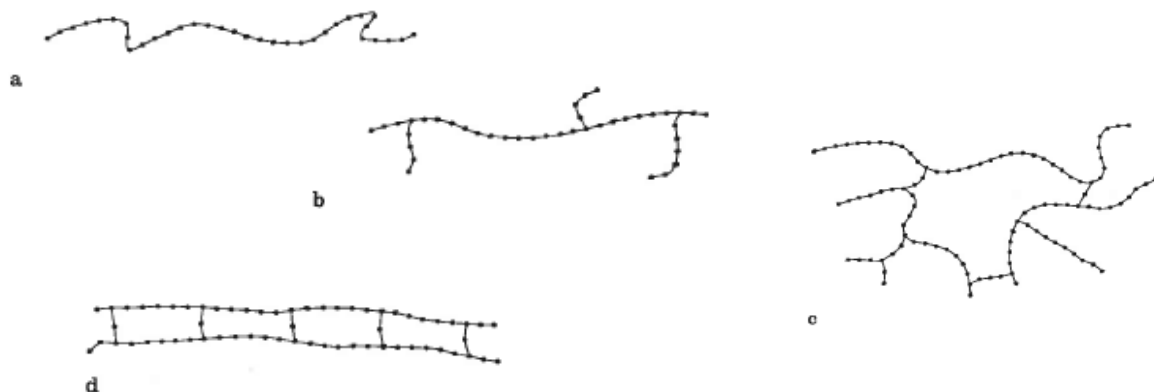
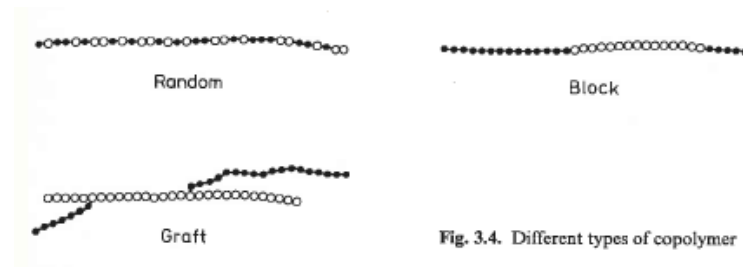
- **Homopolymer** – jediný typ strukturní jednotky
- **Kopolymer** – dva strukturní jednotky

Konfigurace polymerních řetězců

- **Lineární**
- **Větvené**
- **Síťované**
- **Žebříkovité**



Ethylene (CH_2) $\rightarrow$ polyethylene



Polymery

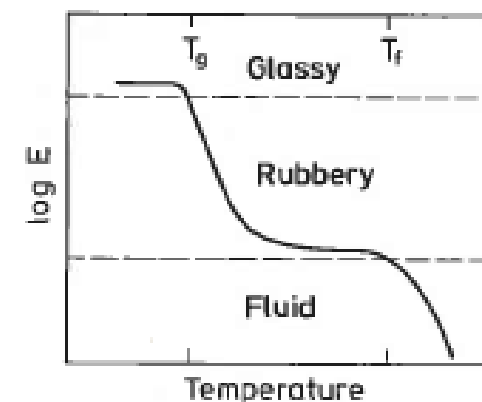
Molekulová hmotnost (MW) – průměrná hmotnost makromolekul tvořících polymer – je popsán distribuční funkcí

- **$MW = DP \times (MW)_u$** $(MW)_u$ – MW strukturní jednotky, ,

např. $MW_{(H_2O)} = 18$, $MW_{(benzén)} = 78$, $MW_{(přírodní\ guma)} = 10^6$

DP – stupeň polymerizace (počet strukturních jednotek)

Vlastnost	Nízká MW	Vysoká MW
Mechanická pevnost	Nízká, křehký	Vysoká, pevný
Viskozita taveniny	Nízká, snadno teče	Velmi vysoká
Teplota skelného přechodu (T_g)	Nižší	Vyšší



Při T_g se mění fyzikální vlastnosti – například mechanické (křehké vs. elastické)

Rozdělení kondenzovaných látek

- **Kapalné látky**

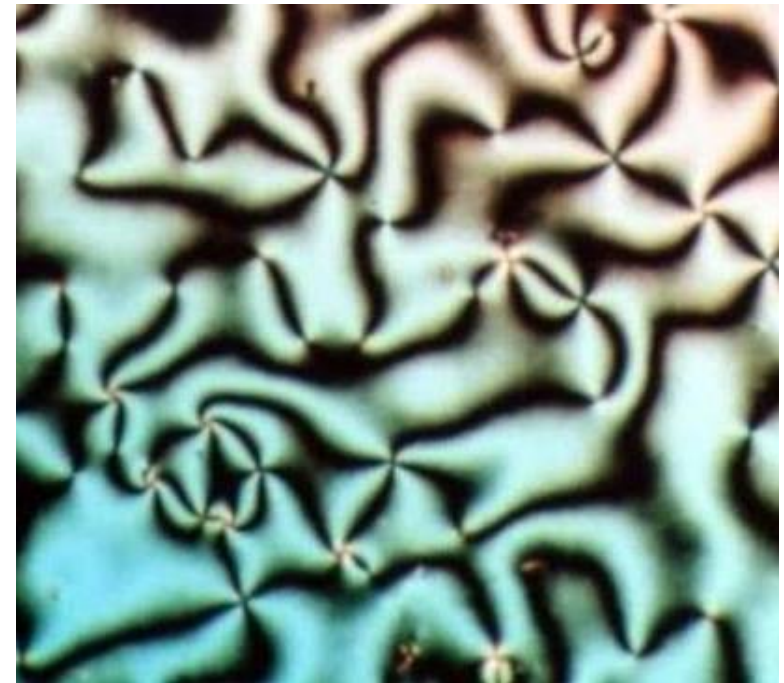
- Newtonovské
- Neneutronovské

- **Pevné látky**

- Krystalické
- Amorfni
- Polymery

- **Mezomorfni látky**

Tekuté krystaly

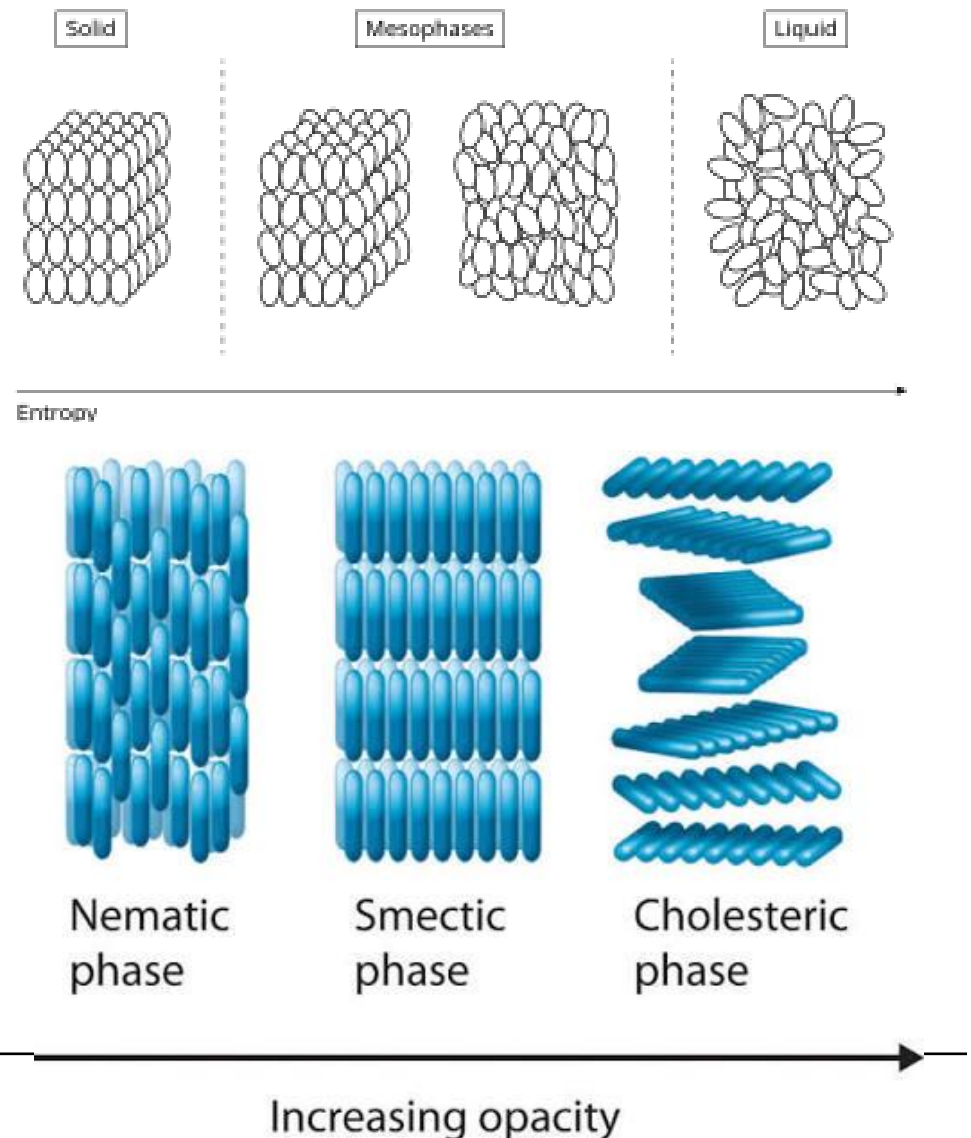


Mezomorfní látky

- Přejchod mezi kapalným a pevným skupenstvím – orientační uspořádání na dlouhou vzdálenost, ale pozičně neuspořádané
- Kapalně vlastnosti: viskozita, přizpůsobení ke tvaru nádoby
- Vlastnosti pevné látky: určitá míra prostorového nebo směrového uspořádání

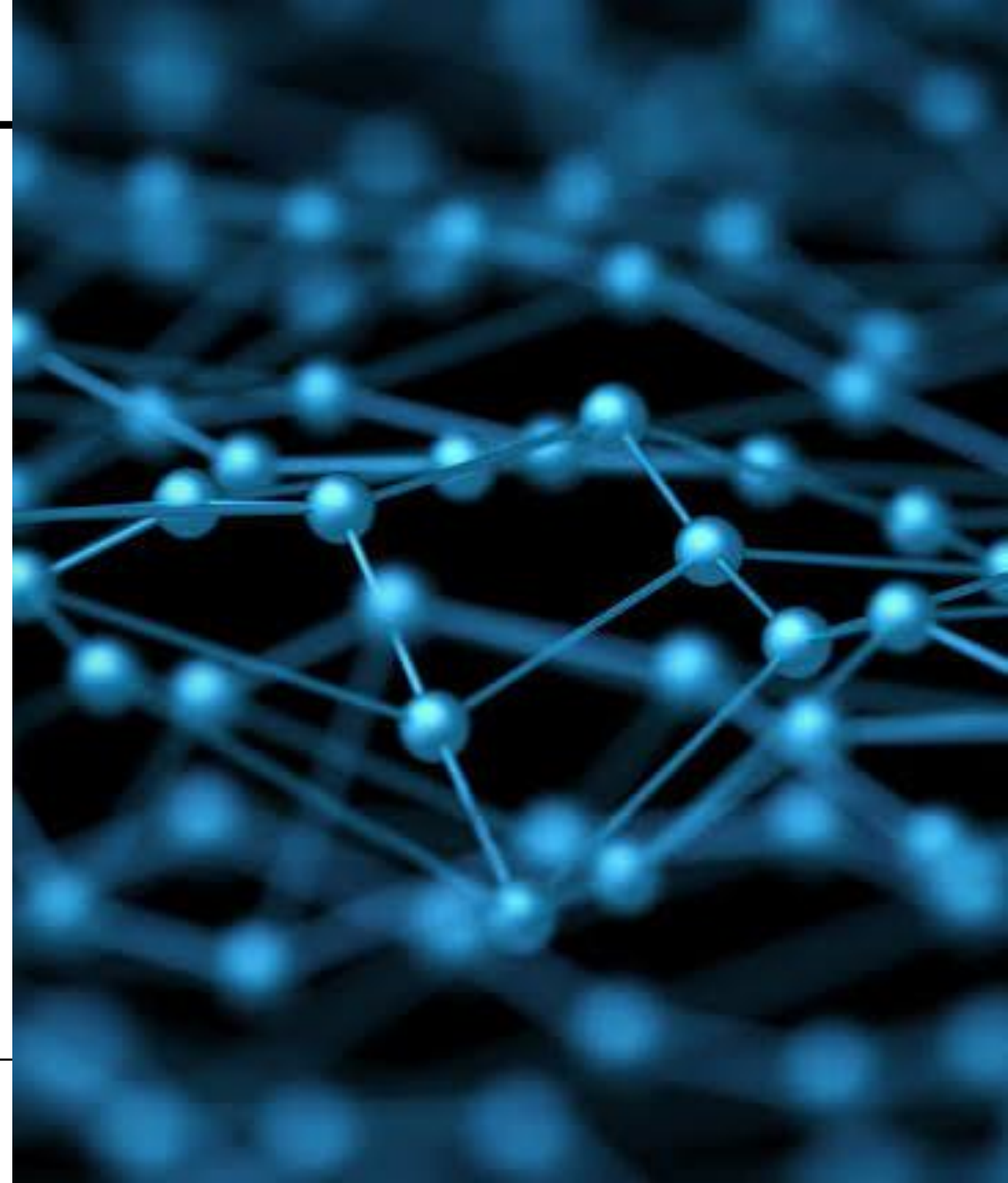
Příklady:

- Přírodní: roztoky DNA v těle, buněčné membrány
- Umělé: LCD displeje, digitální teploměry



Osnova

- Úvod
- Rozdělení kondenzovaných látek
- **Vznik kondenzované fáze**
- Vazby



Vznik kondenzované fáze

- Pokud by mezi částicemi nepůsobili žádné síly, jaká fáze by byla termodynamicky stabilní?

Odpověď:

Ideální plyn

- Homogenní rozložení částic v objemu
- Vnitřní energie U nezávislá na vzájemné poloze částic
- Maximalizace entropie S
- $S = k \ln \Omega$ - II. zákon termodynamiky



Vznik kondenzované fáze

Vznik kondenzované fáze je podmíněna interakcí mezi částicemi

- Vnitřní energie U nezávislá na vzájemné poloze částic
- Maximalizace entropie S
- $S = k \ln \Omega$ - II. zákon termodynamiky



Vznik kondenzované fáze

- Proč vznik kondenzovaných látek neporušuje druhý zákon termodynamiky?

Nápověda: $G = H - TS$

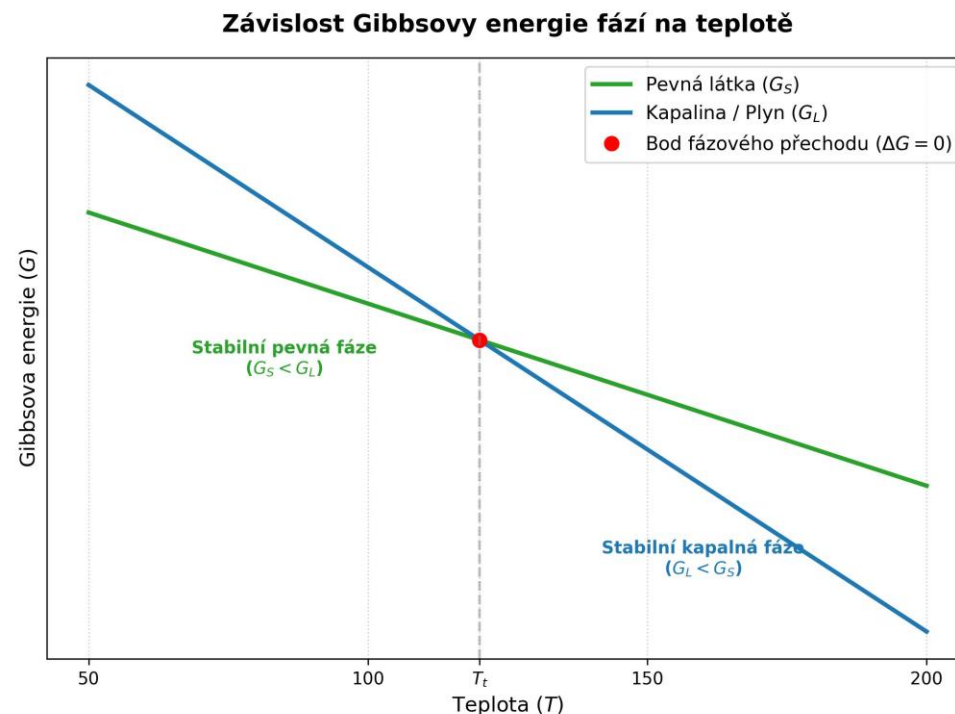
$$(H = U + pV)$$

konstantní tlak a teplota, termodynamická rovnováha, Gibbsova energie

Odpověď:

Při kondenzaci se minimalizuje Gibbsova energie

- $\Delta G = \Delta H - T\Delta S$ – změna G při fázovém přechodu, pro spontánní děj $\Delta G < 0$
- „Boj“ mezi entalpií a entropií při dané teplotě a tlaku
- ΔH – energetický zisk při vzniku vazeb ($\Delta H < 0$)
- $\left(\frac{\partial G}{\partial T}\right)_p = -S$, pro plyny sklon je větší



Vznik kondenzované fáze

- Proč vznik kondenzovaných látek neporušuje druhý zákon termodynamiky?

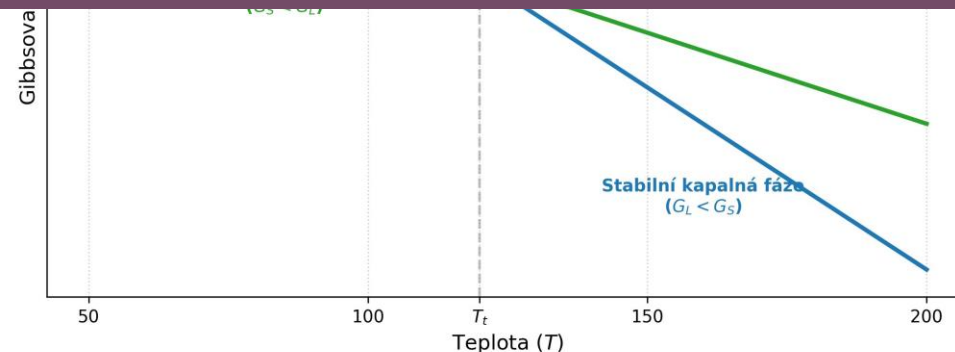
Nápověda: $G = H - TS$

$$(H = U + pV)$$

Pokles entropie je kompenzován energetickým ziskem při vzniku vazeb

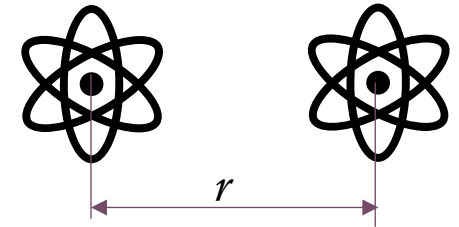
prechodu, pro spontánní děj $\Delta G < 0$

- „Boj“ mezi entalpií a entropií při dané teplotě a tlaku
- ΔH – energetický zisk při vzniku vazeb ($\Delta H < 0$)
- $\left(\frac{\partial G}{\partial T}\right)_p = -S$, pro plyny sklon je větší



Vznik kondenzované fáze – dva atomy

- Jak se mohou přitahovat dva elektricky neutrální atomy?



Odpověď:

Fluktuace elektronového obalu – vznik dipólů

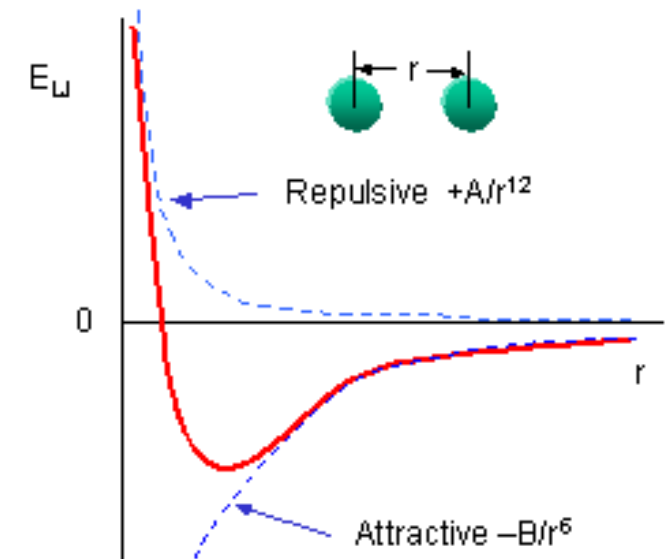
- Van der Waalsova interakce - $U(r) \propto -\frac{1}{r^6}$

- Proč se atomy po přiblížení nezhroutí?

Odpověď:

Pauliho vylučovací princip

- Elektronů nemohou obsadit stejný kvantový stav
- Při překryvu orbitalů musí obsazovat i stavy s vyšší energií a prudce vzroste kinetická energie
- Repulzivní člen $\propto -\frac{1}{r^{12}}$



Vznik kondenzované fáze – dva atomy

- **Lennard – Jonesův potenciál**

interakční energie mezi dvěma neutrálními částicemi v závislosti na jejich vzdálenosti

- $U(r) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]$, kde

r - vzdálenost mezi středy částic,

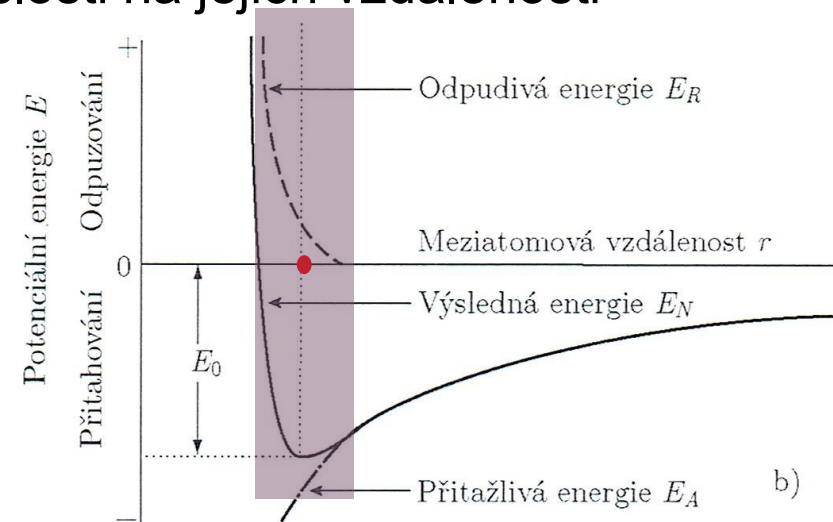
ε - hloubka potenciálové jámy - odpovídá maximální vazebné energii,

σ - vzdálenost, při které je interakční energie nulová; efektivní průměr částice

$$\frac{dU}{dr} = 0 \rightarrow r_0 = \sqrt[6]{2}\sigma$$

Minimum $U \rightarrow r_0$:

- rovnovážná vzdálenost atomů
- délka chemické vazby
- vzdálenost sousedů v krystalu



Materiál	r_0 [nm]
Cu	0,256
Al	0,286
Mg	0,320
NaCl	0,282

Vznik kondenzované fáze – dva atomy

- **Lennard – Jonesův potenciál**

interakční energie mezi dvěma neutrálními částicemi v závislosti na jejich vzdálenosti

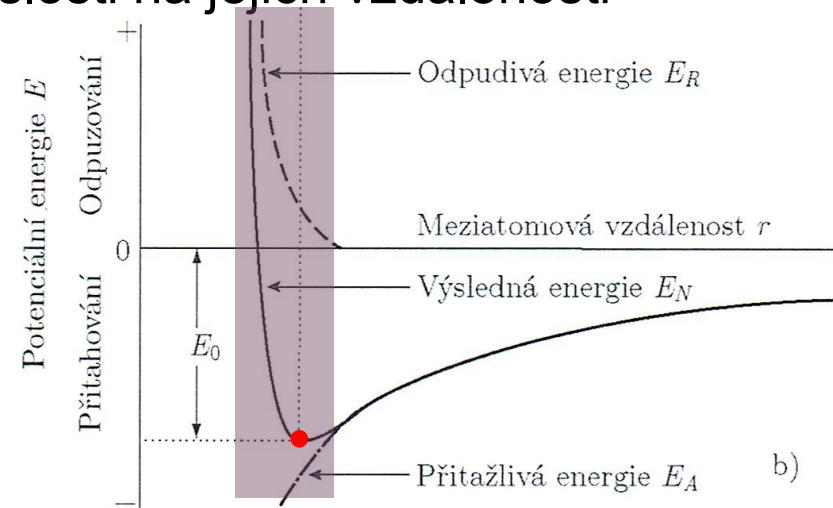
- $$U(r) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right], \text{ kde}$$

r - vzdálenost mezi středy částic,

ε - hloubka potenciálové jámy - odpovídá maximální vazebné energii,

σ - vzdálenost, při které je interakční energie nulová; efektivní průměr částice

- Minimum $U \rightarrow E(r_0)$



- **Vazebná energie**

Rozdíl mezi energií izolovaných atomů a energií vázaného stavu

- $$E_b = E(\infty) - E(r_0)$$

Čím hlubší minimum, tím:

- vyšší teplota tání
- vyšší modul pružnosti
- menší stlačitelnost

Vazebná energie (ev/atom)	
Ar	0,08
Na	1,1
Cu	3,5
Si	4,6
W	8,9

$T_m(W) = 3422\text{ °C}$, $T_m(Ar) = -189\text{ °C}$

Vznik kondenzované fáze – dva atomy

- **Lennard – Jonesův potenciál**

interakční energii mezi dvěma neutrálními částicemi v závislosti na jejich vzdálenosti

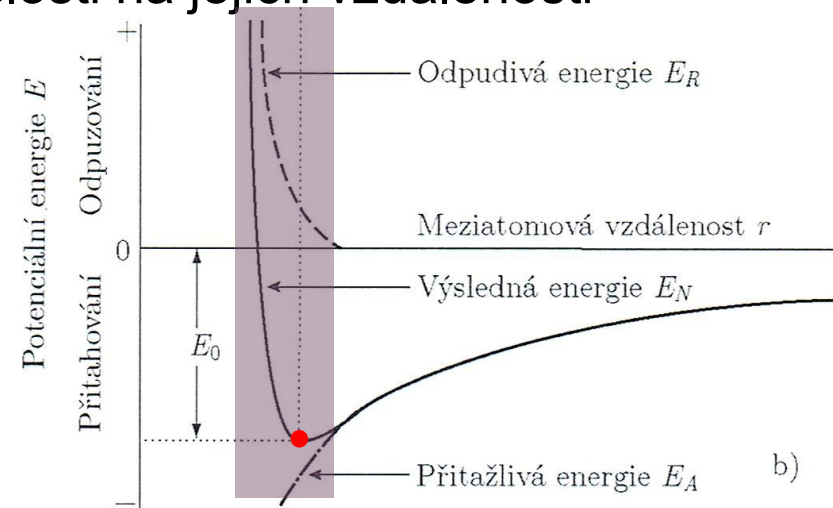
- $U(r) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]$, kde

r - vzdálenost mezi středy částic,

ε - hloubka potenciálové jámy - odpovídá maximální vazebné energii,

σ - vzdálenost, při které je interakční energie nulová; efektivní průměr částice

- Minimum $U \rightarrow E(r_0)$



- **Souvislost s elastickými vlastnostmi**

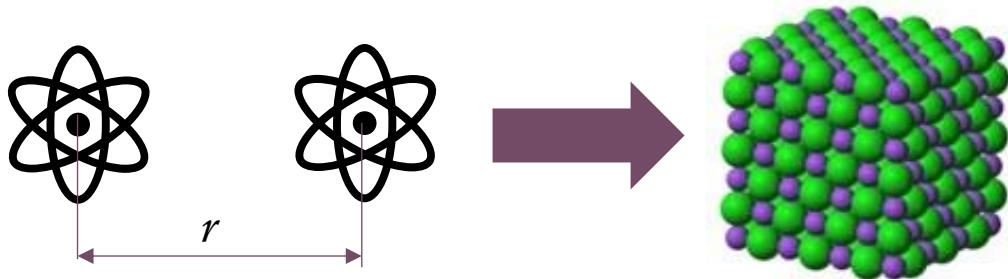
V okolí minima platí: $E(r) \cong E_0 + \frac{1}{2}k(r - r_0)^2$, kde $k = \frac{d^2E}{dr^2} \Big|_{r_0} \rightarrow$ tuhost vazby

- Hluboké a úzké minimum $\rightarrow$ vysoký Youngův modul; mělké minimum $\rightarrow$ nízký Youngův modul

Vznik kondenzované fáze – krystal

- Přejchod od dvou částic k problému 10^{23} částic

$$U = \sum_{i < j} U(r_{ij})$$



- Každý atom interaguje s velkým počtem sousedů
- Kolektivní chování → pružnost, elektrická vodivost

- Příklad interakce: iontové krystaly

Madelungova konstanta α – charakterizuje součet všech Coulombových interakcí mezi iontem a ostatními ionty

Pro jeden pár iontů: $U(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_i q_j}{r}$; celková elektrostatická en. na jeden iont: $U_M = -\frac{\alpha q^2}{4\pi\epsilon_0 r_0}$

Bornova odpudivá energie – zabraňuje kolapsu iontového krystalu, kvantově mechanická repulse

$$U_r = \frac{B}{r^n}$$

Celková energie iontového krystalu: $U = -\frac{\alpha q^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \frac{B}{r^n}$; minimum U určuje mřížkový parametr

Vznik kondenzované fáze – iontový krystal

Výpočet pro NaCl

prostřední iont je obklopen:

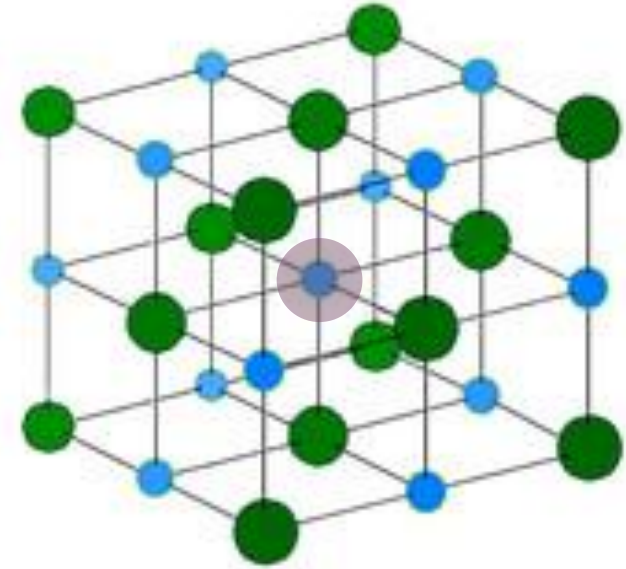
6 (opačně nabitými) ionty ve vzdálenosti R

12 (stejně nabitými) ionty ve vzdálenosti $R\sqrt{2}$

8 (opačně nabitými) ionty ve vzdálenosti $R\sqrt{3}$
atd.

$$U = -\frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r} \left(\frac{6}{\sqrt{1}} - \frac{12}{\sqrt{2}} + \frac{8}{\sqrt{3}} - \frac{6}{\sqrt{4}} + \frac{24}{\sqrt{5}} - \dots \right) = -\alpha \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

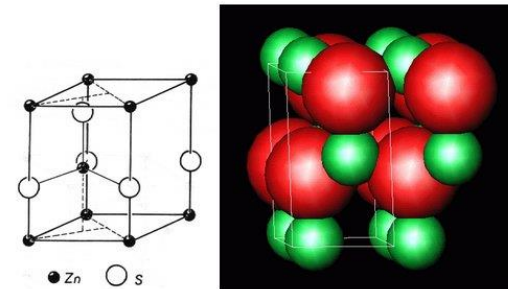
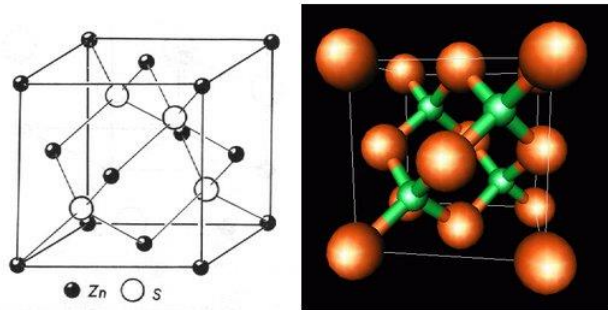
NaCl: $\alpha = 1,7476$



Jiné struktury: Sfalerit $\alpha = 1,6381$

ZnS

Wurtzit $\alpha = 1,641$



Vznik kondenzované fáze – reálné krystaly

Pro reálné krystaly se definuje kohezní energie

$$E_{\text{kohezní}} = E_{\text{volné atomy}} - E_{\text{kondenzovaná látka}}$$

krystal může být stabilní pouze tehdy, je-li jeho celková energie nižší než celková energie atomů (resp. molekul) ve volném stavu

$E_{\text{kohezní}} > 0$ – dojde ke kondenzaci

$E_{\text{kohezní}} < 0$ – nedojde ke kondenzaci

Kohezní energie přímo souvisí s:

- teplotou tání
- modulem pružnosti
- aktivační energií samodifuze
- atd.

Materiál	E_{koh} (eV)	T_{m} (°C)	E_{young} (GPa)	Q [kJ/mol]
Ne	0,02	-248	0,02	~1
Ar	0,08	-189	2	~2
Na	1,1	98	8	46-55
Cu	3,5	1085	130	196-205
Si	4,6	1414	188	450-500
W	8,9	3422	411	550-640

Vznik kondenzované fáze – reálné krystaly

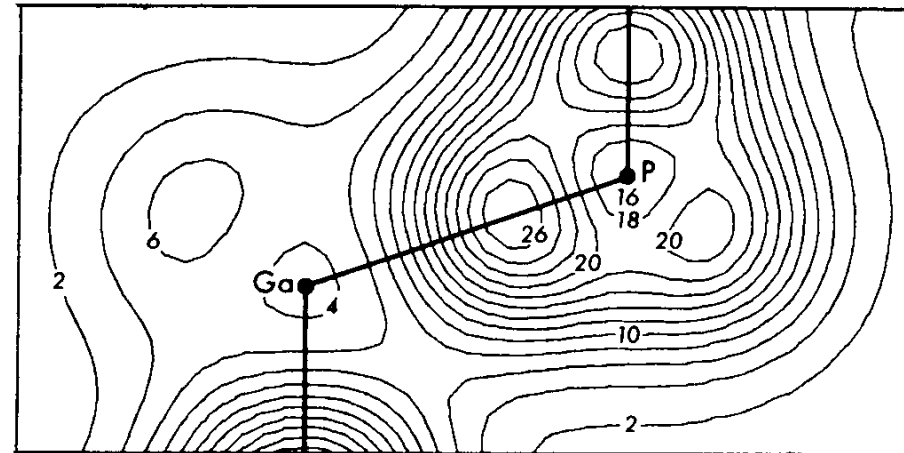
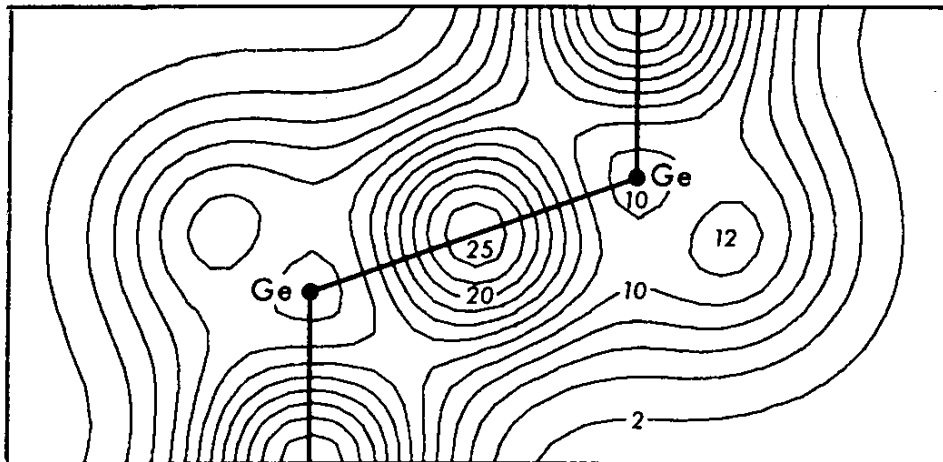
Kvantově-mechanický pohled

Vznik kondenzované fáze je kvantový jev. Elektrony v reálných krystalech obsazují kolektivní stavy přes celý krystal.

$$E = T_e + U_{ee} + U_{ei} + U_{ii}$$

T_e – kinetická energie elektronů, U_{ee} – interakce elektron-elektron, U_{ei} – interakce elektron-iont, U_{ii} – interakce iont-iont

Vznik krystalu: periodicitá mřížky umožní snížení E_{celk} , než je práce pro lokalizaci atomů



Vrstevnice elektronové hustoty Ge a GaP

Vznik kondenzované fáze – reálné krystaly

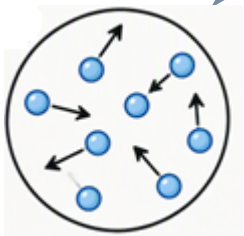
Krystalické látky vs. Amorfní látky

Krystalizace – pomalé chlazení taveniny, vznik zárodků krystalu, které časem rostou

Amorfní látky – rychlé chlazení taveniny, rychlý nárůst viskozity a ztráta kinetické energie, vzniká neuspořádaná struktura

Vlastnost	Krystalizace	Vznik amorfnní látky
Struktura	Pravdielná	Nepravidelná
Rychlost ochlazování	Pomalé	Velmi rychlé
Teplota přechodu	Ostrá teplota tání T_m – skoková změna vlastností	Široký interval teplot, teplota skelného přechodu T_g , plastická superochlazená kapalina → amorfnní látka

Vznik kondenzované fáze – souhrn

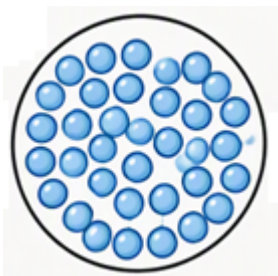


➤ vysoká teplota

- zanedbatelný vliv přitažlivých sil
- E_k (energie tepelného pohybu částic) převažuje

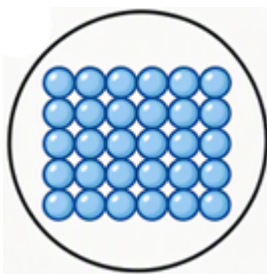
➤ snižování teploty

- přitažlivé síly začínají nabývat na důležitosti
- korelace v pohybu molekul
- krátkodobě existující klastry molekul



➤ kondenzační teplota

- významná korelace pohybu molekul (vznik kapaliny)
- energie přitažlivé interakce $\approx E_k$
- krátkodosahové uspořádávání molekul
- přitažlivé interakce co nejvíce „stěsnávají“ molekuly
- odpudivé interakce zajišťují minimální separaci

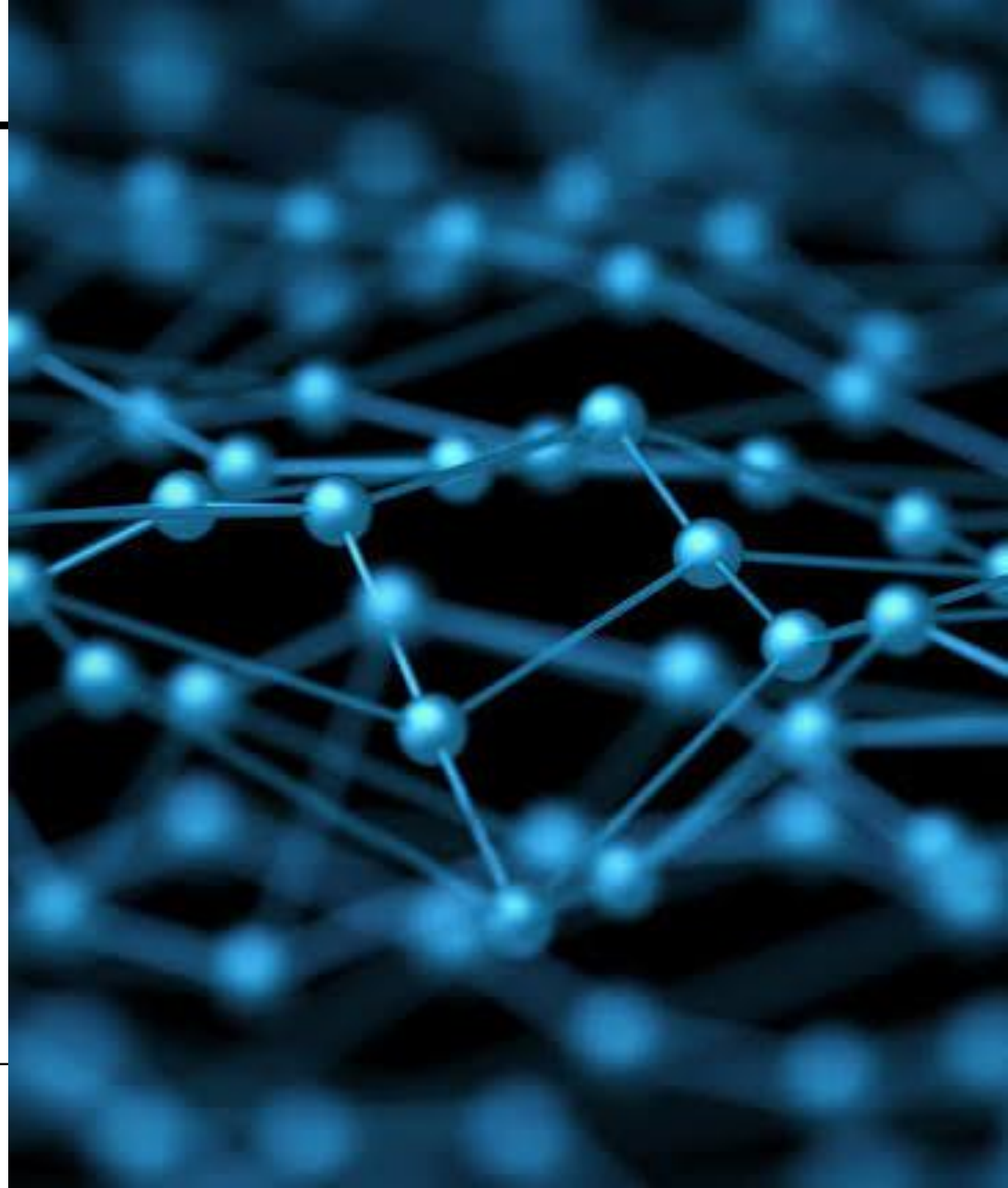


➤ další snižování teploty

- uspořádávání molekul (resp. atomů, iontů)
 - tuhnutí → vznik pevné látky (PL)
-

Osnova

- Úvod
- Rozdělení kondenzovaných látek
- Vznik kondenzované fáze
- **Vazby**



Vazby

Všechny vazby jsou projevem elektromagnetické interakce

- Neexistuje samostatná „chemická“, „kovová“ ani „kovalentní“ síla
- Všechny typy vazeb vznikají z elektromagnetické interakce mezi elektrony a atomovými jádry.
- Rozdílné typy vazeb odpovídají různému prostorovému uspořádání elektronové hustoty.

Celková energie soustavy atomů

$$U = U_{nn} + U_{ee} + U_{en}$$

$U_{nn} > 0$, odpovídá odpuzování atomových jader,

$U_{ee} > 0$, odpovídá odpuzování elektronů,

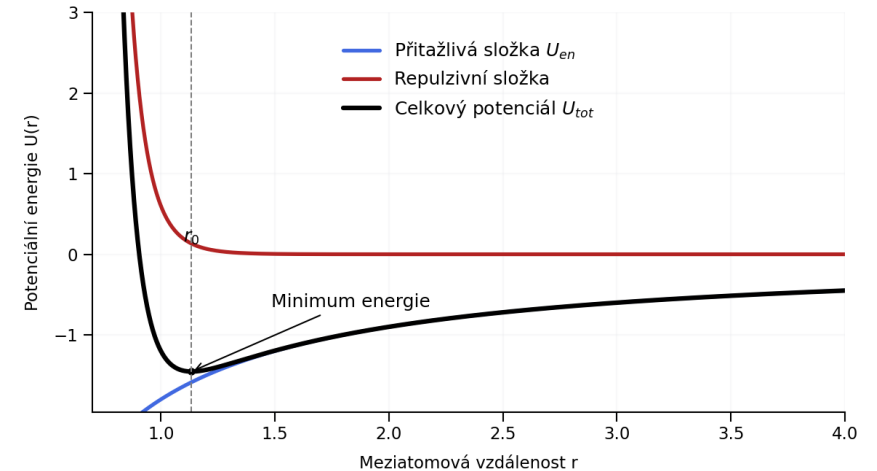
$U_{en} < 0$, odpovídá přitažlivosti elektronů a jader.

Podmínka vzniku stabilní vazby

$$\left(\frac{\partial U}{\partial r}\right)_{r=r_0} = 0, \left(\frac{\partial^2 U}{\partial r^2}\right)_{r=r_0} > 0$$

Stabilní látka vzniká tehdy, když celková energie dosáhne minima.

Vznik stabilní vazby: minimum potenciální energie



Krátkodosahové odpuzování nastane i v důsledku Pauliho vylučovacího principu

Vazby

Klasické dělení typ vazeb a pořadí podle síly

van der Waals < halogenová ≈ vodíková < kovová ≈ kovalentní ≈ iontová

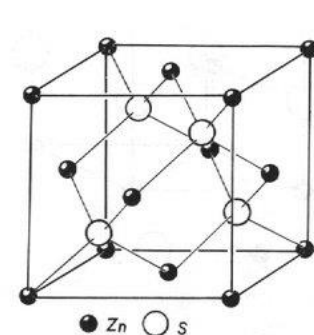
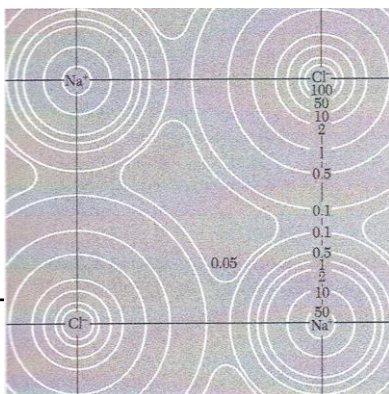
Typ vazby	Fyzikální původ	Typická energie [kJ/mol]	Směrnost	Dosah	Typické materiály	Charakteristické vlastnosti
Iontová	Coulombovská přitažlivost mezi kationty a anionty	400–4000	Ne	Dlouhý	NaCl, MgO, Al ₂ O ₃	Vysoký bod tání, křehkost, elektrická izolace v pevném stavu
Kovalentní	Sdílení elektronových párů mezi atomy	150–1000	Silně ano	Krátký	Si, C (diamant), SiC, Ge	Vysoká pevnost, vysoký Youngův modul, výrazná anizotropie
Kovová	Delokalizované valenční elektrony v elektronovém plynu	100–1000	Slabá	Střední	Cu, Al, Fe, W	Elektrická a tepelná vodivost, plasticita, tvárnost
van der Waalsova	Fluktuující a indukované dipóly	0.1–50	Ne	Krátký	Ar, Kr, molekulové krystaly, grafit mezi vrstvami	Nízký bod tání, nízká tvrdost, snadná štěpnost
Vodíková	Elektrostatická interakce H···X (X = O, N, F)	10–60	Ano	Krátký	H ₂ O, DNA, proteiny, led	Stabilizace biomolekul, anomální vlastnosti vody
Halogenová	Interakce σ-díry na halogenu s elektronovým donorem	5–50	Ano	Krátký	Organické krystaly, supramolekulární struktury	Samouspořádání molekul, krystalové inženýrství

Iontová vazba

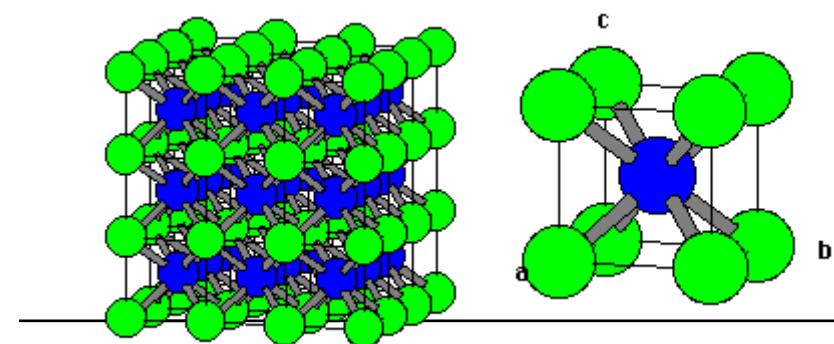
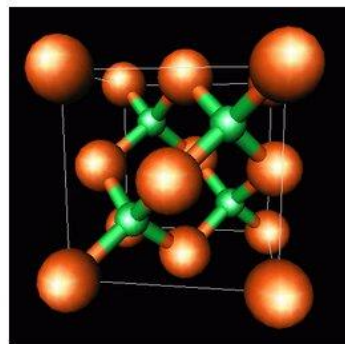
Typ vazby	Fyzikální původ	Typická energie [kJ/mol]	Směrnost	Dosah	Typické materiály	Charakteristické vlastnosti
Iontová	Coulombovská přitažlivost mezi kationty a anionty	400–4000	Ne	Dlouhý	NaCl, MgO, Al ₂ O ₃	Vysoký bod tání, křehkost, elektrická izolace v pevném stavu

Vlastnosti

- v mezerách mezi ionty je velmi malá hustota elektronů
- iontová vazba je nenasycená (počet iontů, které se navzájem přitahují není omezený, koordinační číslo > chem. mocenství)
- iontová vazba je nesměrová (elektronová hustota iontů má zhruba kulovou symetrii)
- „síla“ iontové vazby závisí na vzdálenosti středů iontů a na jejich náboji (např. Na⁺-Cl⁻ slabší vazba než Mg²⁺-O²⁻)



Sfalerit – ZnS – sulfid zinečnatý



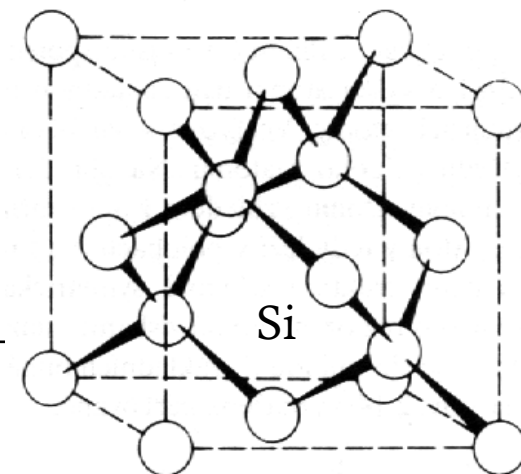
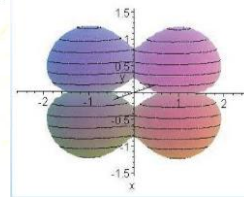
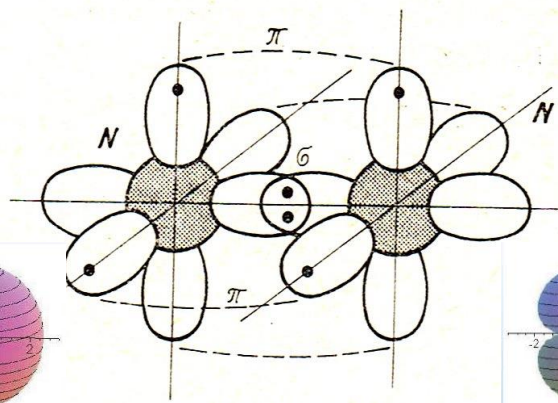
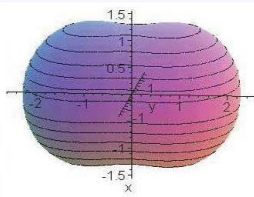
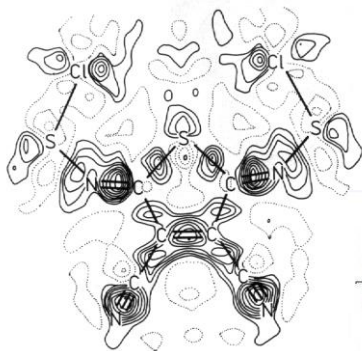
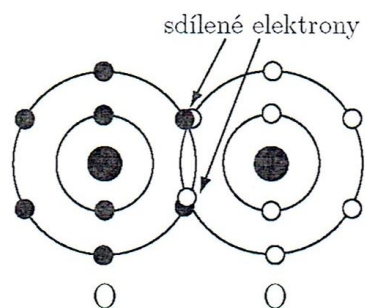
CsCl – chlorid cesný

Kovalentní vazba

Typ vazby	Fyzikální původ	Typická energie [kJ/mol]	Směrovost	Dosah	Typické materiály	Charakteristické vlastnosti
Kovalentní	Sdílení elektronových párů mezi atomy	150–1000	Silně ano	Krátký	Si, C (diamant), SiC, Ge	Vysoká pevnost, vysoký Youngův modul, výrazná anizotropie

Vlastnosti

- důležitou roli hrají tzv. nepárové elektrony (tj. elektrony, k nimž v tomtéž atomu neexistuje elektron s opačným spinem)
- výměnné síly
- směrovost (vazba se uskutečňuje pouze pod určitými úhly, elektronová hustota je největší ve směru spojnice atomových jader)
- nasycenost (každý atom se váže max. s tolika atomy, jako je jeho mocenství)
- malá koordinací čísla

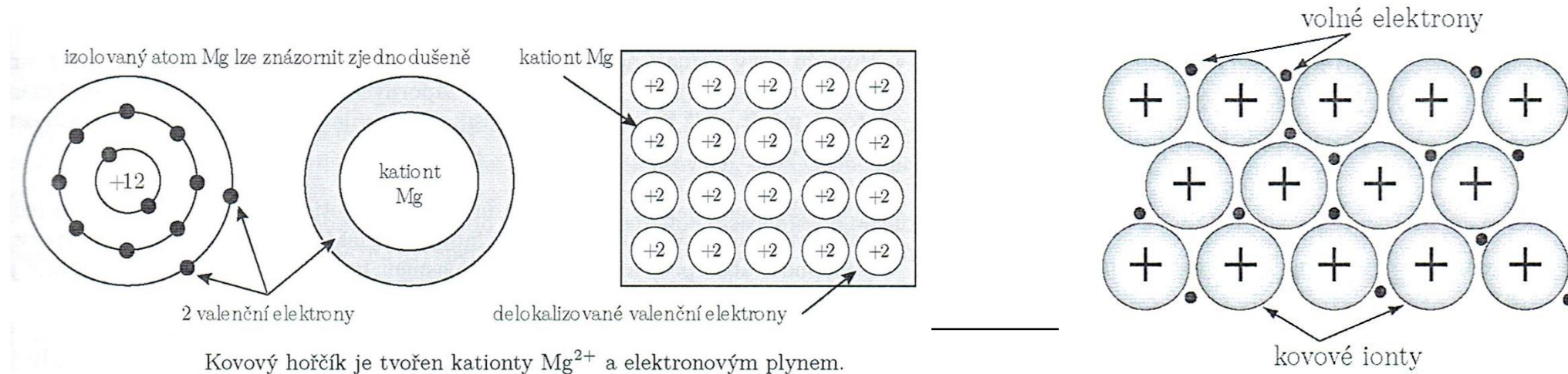


Kovová vazba

Typ vazby	Fyzikální původ	Typická energie [kJ/mol]	Směrovost	Dosah	Typické materiály	Charakteristické vlastnosti
Kovová	Delokalizované valenční elektrony v elektronovém plynu	100–1000	Slabá	Střední	Cu, Al, Fe, W	Elektrická a tepelná vodivost, plasticita, tvárnost

Vlastnosti

- nenasycená vazba
- vazební elektrony přechází od atomu k atomu
- izotropní vazba
- vysoká koordinační čísla (8 a 12) → vysoká hustota uspořádání (68 % a 74 %)

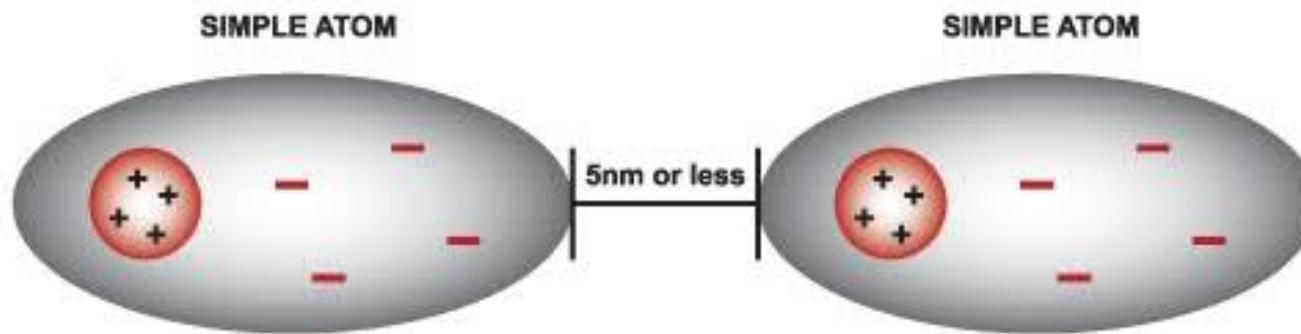


van der Waalsova vazba

Typ vazby	Fyzikální původ	Typická energie [kJ/mol]	Směrnost	Dosah	Typické materiály	Charakteristické vlastnosti
van der Waalsova	Fluktuující a indukované dipóly	0.1–50	Ne	Krátký	Ar, Kr, molekulové krystaly, grafit mezi vrstvami	Nízký bod tání, nízká tvrdost, snadná štěpnost

Vlastnosti

- Slabá, nesměrová interakce vznikající především mezi indukovanými nebo fluktuujícími dipóly; nepředstavuje samostatnou fundamentální sílu, ale projev elektromagnetické interakce.
- Krátký dosah, rychle slábne se vzdáleností $\propto 1/r^6$
- Určuje vlastnosti molekulových krystalů a vrstevnatých materiálů (vzácné plyny, grafit)

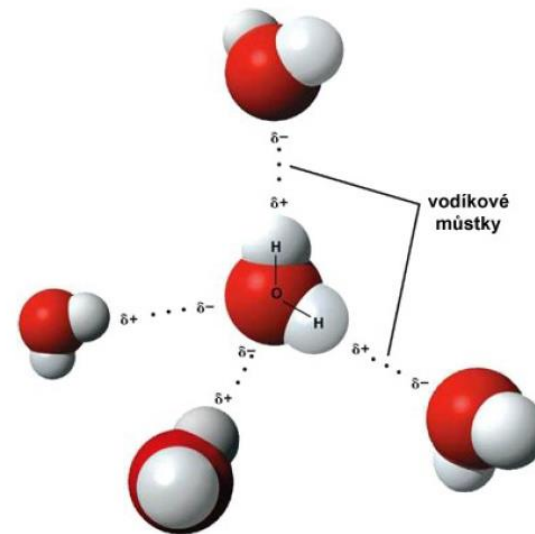
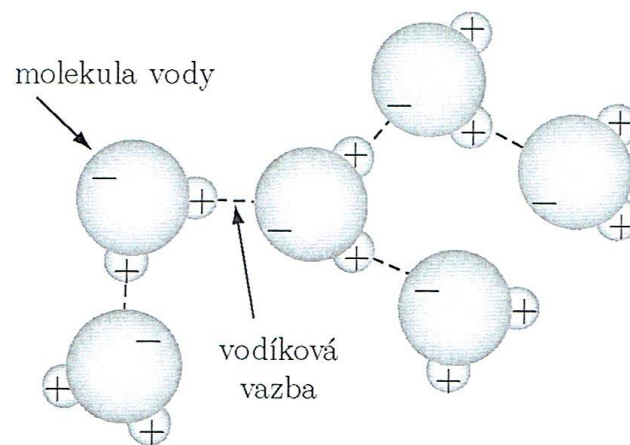
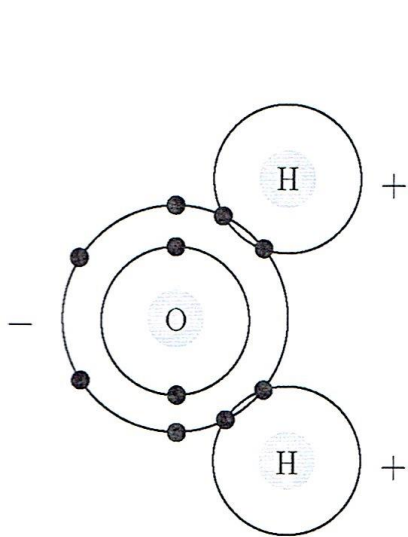


Vodíková vazba

Typ vazby	Fyzikální původ	Typická energie [kJ/mol]	Směrovost	Dosah	Typické materiály	Charakteristické vlastnosti
Vodíková	Elektrostatická interakce $H \cdots X$ ($X = O, N, F$)	10–60	Ano	Krátký	H_2O , DNA, proteiny, led	Stabilizace biomolekul, anomální vlastnosti vody

Vlastnosti

- Interakce mezi vodíkem a elektronegativním atomem (O, N, F)
- Vzniká směrová vazba mezi H a atomem s volným elektronovým párem

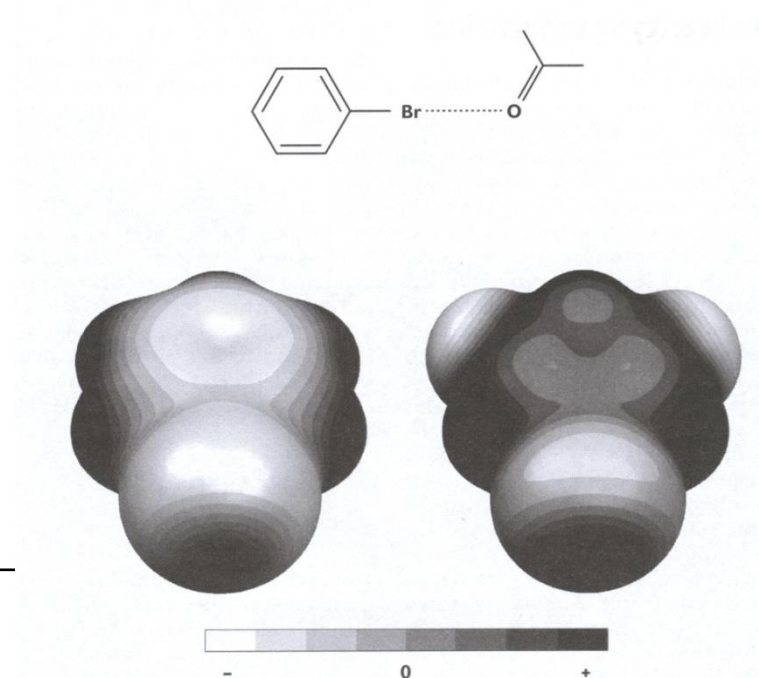


Halogenová vazba

Typ vazby	Fyzikální původ	Typická energie [kJ/mol]	Směrovost	Dosah	Typické materiály	Charakteristické vlastnosti
Halogenová	Interakce σ -díry na halogenu s elektronovým donorem	5–50	Ano	Krátký	Organické krystaly, supramolekulární struktury	Samouspořádání molekul, krystalové inženýrství

Vlastnosti

- zvláštní druh nekovalentní interakce
- důvodem je tzv. σ -díra - oblast se sníženou elektronovou hustotou
- velmi směrová vazba, její síla roste s atomovým číslem příslušného halogenu



Vazby

Vliv vazeb na fyzikální vlastnosti

Typ vazby	Youngův modul	Teplota tání	Tvárnost
van der Waalsova	0.1–10 GPa	velmi nízká	malá
Vodíková	1–50 GPa	nízká až střední	malá
Iontová	50–400 GPa	vysoká	křehká
Kovová	30–450 GPa	střední až vysoká	vysoká
Kovalentní	100–1200 GPa	velmi vysoká	velmi malá

Zdroje ilustrací

- Ch. Kittel – Úvod do fyziky pevných látek, Academia
- I.Kraus, J.Fiala – Elementární fyzika pevných látek, Nakladatelství ČVUT
- Google
- Wikipedia
- D. Drozdenko – unpublished results