

Fyzikální základy vědy o materiálu

Cíl:



Po prostudování tohoto studijního textu získáte základní fyzikální znalosti, potřebné pro pochopení vlastností a chování materiálů, počínaje kovy a konče některými moderními materiály.

1. Úvod

Nauka o materiálu a zejména její praktické využití je s lidskou existencí spjata snad nejvíce ze všech věd. Stravování, bydlení, odívání, doprava, zábava atd., jsou podmíněny využíváním celé množiny materiálů. Již od základní školy víme, že celá historická období vývoje lidstva jsou nazývána podle materiálů v té době nejvíce využívaných (doba kamenná, bronzová, železná). Lze konstatovat, že existence lidstva závisela (a stále závisí) na schopnosti využívání vhodných materiálů.

Na úsvitu dějin lidé využívali jenom omezené množství materiálů, jako např. kámen, dřevo, kůže, kosti a hlínu. S postupem času se toto spektrum rozšiřovalo a nové materiály často vznikaly z materiálů původních, s použitím speciálních technologií (někdy bohužel již zapomenutých). Po dlouhé stovky tisíc let byly tyto technologie rozvíjeny extenzivně a byly předávány z otce na syna, případně z mistra na učedníka. Teprve v historicky nedávné době (tj. asi v polovině minulého století) dochází k intenzivnímu rozvoji materiálových technologií, tj. k pronikání zejména fyzikálních poznatků a metod do vědy o materiálu. Výsledky tohoto kvalitativního skoku na sebe nedaly dlouho čekat, setkáváme se s nimi na každém kroku, ať se jedná o nové slitiny kovů, plasty, keramika, kompozity, materiály pro mikroelektroniku a mnoho dalších (stačí se zamyslet nad materiály, z nichž se skládá např. mobilní telefon, automobil, počítač a další předměty denní spotřeby).

Rozvoj nových technologií tak činí náš život mnohem snadnějším a již si ani nedovedeme představit naši existenci bez běžných předmětů denní spotřeby a tedy bez nových materiálů (tato situace má však i svoji stinnou stránku – kolaps, ke kterému by došlo při výpadku např. takového zdroje energie, jakým je nafta, by byl pro naši civilizaci fatální).

V dalších kapitolách se pokusíme podat přehled o způsobu a výsledcích pronikání fyzikálních poznatků a metod do tak tradičně fenomenologické oblasti, jakou je věda o materiálu.

2. Atomová struktura látek.



Cíl:

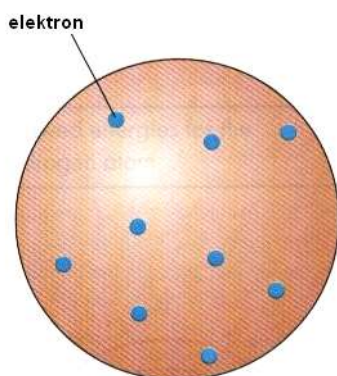
Znalost meziatomových vazeb umožňuje vysvětlit, resp. předvídat vlastnosti materiálů známých, resp. vyvíjených. Podstata těchto vazeb spočívá ve vlastnostech samotných atomů – základních stavebních kamenů všech látek. Proto uvedeme nejdříve stručný přehled teorií složení atomů.



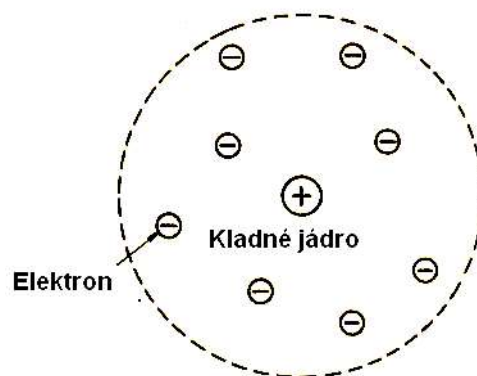
2.1. Struktura atomů.

Již v dávných dobách lidé tušili, že hmota má i při svém spojitěm vzhledu určitou strukturu, že je tedy složena z velmi malých, našimi smysly nepostižitelných částic. První, kdo jasně formuloval tento názor, byl řecký filosof Démokritos (460-371 př.n.l.), od něhož pochází i název těchto malých částic – atomy ($\alpha\tau\omicron\mu\omicron\varsigma$ = nedělitelný).

V 19. století přijali vědci myšlenku, podle níž se chemické prvky skládají z atomů, o atomech samých však nevěděli téměř nic. Po objevu elektronu a zjištění, že všechny atomy obsahují elektrony, navrhl J.J.Thomson první model atomu, tzv. „pušinkový model“ atomu. Podle něho jsou atomy elektricky neutrální částice, které představují kuličky kladně nabitě hmoty, v níž jsou jako rozinky v pudinku umístěny záporně nabitě elektrony (Obr.2.1). Experimentální ověření tohoto modelu prokázalo, že není správný, přinejmenším v tom smyslu, že neobsahuje spojitě rozložený kladný náboj. Proto předložil E. Rutherford druhý model, podle něhož existuje uprostřed atomu kladné jádro a elektrony jsou rozptýleny rovnoměrně v celém objemu atomu (Obr.2.2).



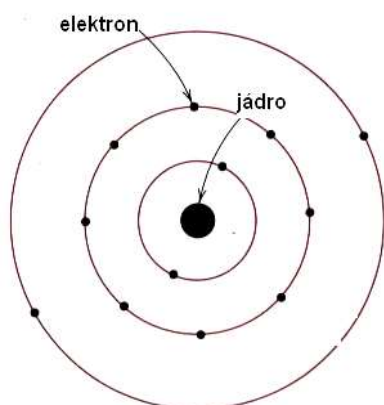
Obr.2.1. Thomsonův model atomu



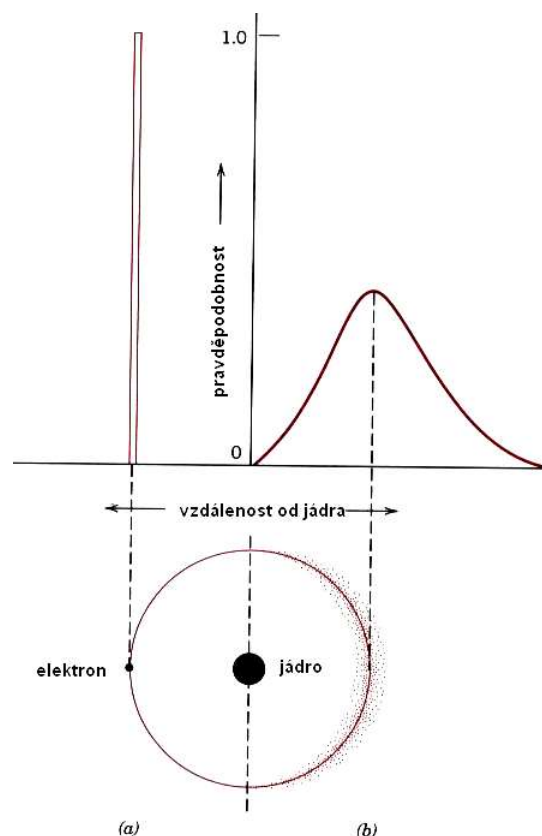
Obr.2.2.. Rutherfordův model atomu.

Ani Rutherfordův model neobstál jak po stránce experimentální, tak po stránce teoretické. Proto v roce 1913 předložil dánský fyzik Niels Bohr svůj model atomu, který s malými opravami „sloužil“ poměrně dlouhou dobu, i když některé jeho nedostatky bylo třeba odstranit postulováním. Podle Bohrova modelu, který výborně vysvětluje zejména

optické vlastnosti (spektra) atomů, se elektrony pohybují po určitých kruhových drahách kolem kladného jádra, podobně jako se pohybují planety Sluneční soustavy kolem Slunce (podobnost je i v řádové velikosti: poloměr Slunce (poloměr jádra) / vzdálenost planet od Slunce (vzdálenost elektronů od jádra)) – viz Obr.2.3.



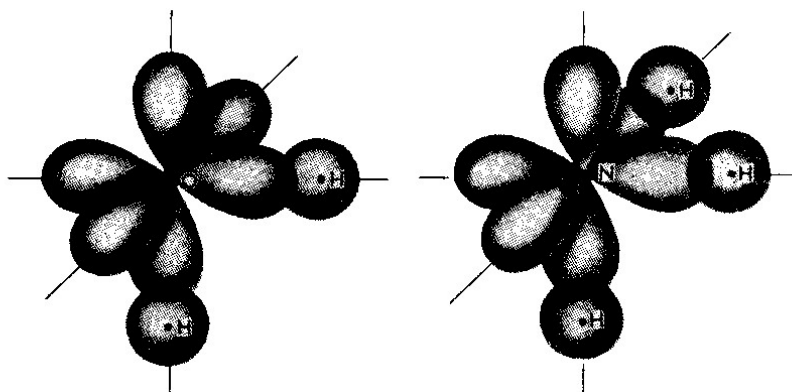
Obr.2.3. Bohrov model atomu.



Obr.2.4. Srovnání Bohrova (a) a kvantově – mechanického (b) modelu atomu.

Bohrův model atomu je posledním modelem, který lze alespoň zčásti vyložit tzv. „selským rozumem“, tj. lze si ho představit na základě klasické fyziky. Brzy po jeho vzniku bylo proti němu vzneseno několik vážných námitek, jak experimentálního, tak zejména teoretického rázu. Proto vznikl zatím poslední model atomu, využívající představ kvantové mechaniky (bohužel názorná představa tohoto modelu je již téměř nemožná). Podle tohoto modelu má elektron jak vlnový, tak i částicový charakter a jeho poloha v okolí jádra je dána pravděpodobnostní funkcí (Obr.2.4).

Přes všechny nedostatky Bohrova modelu je používán stále, i když známe jeho principiální nedostatky. Musíme však mít na paměti, že jednotlivé „dráhy“ elektronů nejsou ve skutečnosti dráhy v geometrickém slova smyslu, ale místa nejčastějšího výskytu elektronů. Hovoříme potom o tzv. „orbitalech“ (Obr.2.5a,b).



Obr.2.5 a) Valenční atomové orbity v H₂O b) Valenční atomové orbity v NH₃

2.2. Vazebné síly v pevných látkách.

Vyjdeme – li z prosté experimentální zkušenosti, že pevné látky „drží pohromadě“ a přitom nejsou velmi husté, dojdeme k závěru, že mezi atomy v nich musí kromě *sil přitažlivých* existovat i síly opačné, tj. *síly odpudivé*. Na Obr.2.6a) je vynesena závislost obou druhů těchto sil, působících mezi dvěma atomy, na jejich vzájemné vzdálenosti a na Obr.2.6b) závislost jejich vzájemné potenciální energie přitažlivých a odpudivých sil opět na vzdálenosti. Z obrázků plyne, že atomy se vždy usadí v takové vzájemné vzdálenosti, aby byla výsledná potenciální energie jejich vzájemného působení minimální. Tato vzdálenost se nazývá *mřížková konstanta*.

Dále stručně objasníme fyzikální podstatu meziatomových sil.

2.2.1. Van der Waalsovy síly.

Van der Waalsovy přitažlivé síly působí mezi všemi atomy a molekulami. Protože je energie jejich vzájemného působení velmi malá (řádově 10 kJ/mol = 0,1 eV/atom), bývá většinou překryta jinou, silnější vazbou. V čistém stavu se s ní setkáváme u inertních plynů v kapalném a tuhém stavu a u některých dalších látek, o nichž se dále zmíníme.

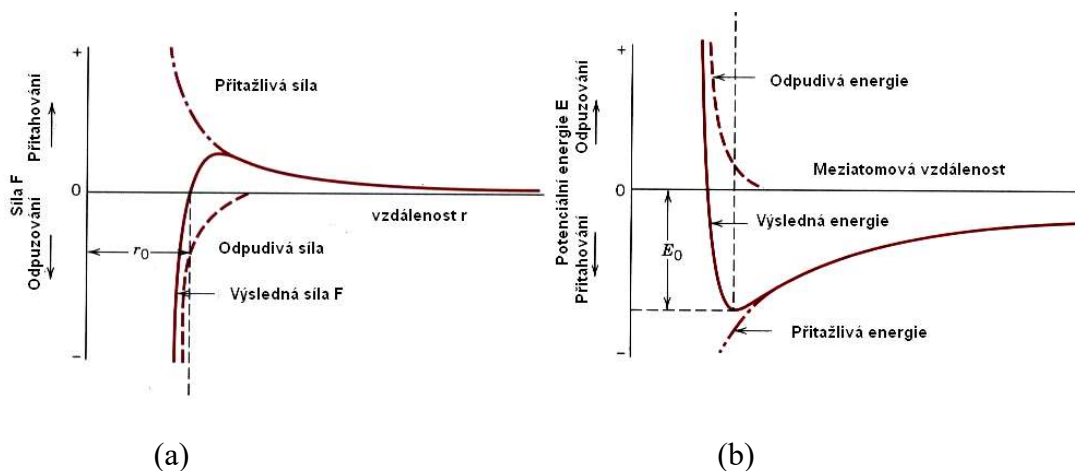
Podstatou Van der Waalsových sil je vzájemné elektrické působení mezi dipóly, tj. protáhlými útvary, nesoucími dva stejně velké elektrické náboje opačného náboje na každém z obou konců (Obr.2.7). Podle konkrétního způsobu vytvoření těchto dipólů dělíme Van der Waalsovy síly na tři druhy:

a) Disperzní Van der Waalsovy síly.

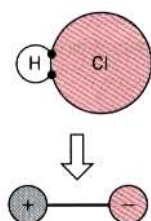
Atomy všech látek jsou obvykle elektricky neutrální, neboť elektrony jsou rozděleny symetricky kolem jádra. Všechny atomy však konají při teplotě větší než 0 K kmitavý pohyb, v jehož důsledku dojde ke vzniku okamžitých krátkodobých a chaotických (*disperzních*) narušení elektrické symetrie elektronového obalu, takže z neutrálních atomů vzniknou malé dipóly. Ty se mohou vzájemně orientovat tak, že se přitahují, nebo odpuzují. Podrobné výpočty ukazují, že v případě přitahování je celková energie systému nižší, než v případě odpuzování. Dojde tedy přednostně ke vzniku přitažlivých sil mezi dipóly a tím ke vzniku

pevné látky (nebo kapaliny). Energie disperzních přitažlivých sil má krátký dosah a klesá se šestou mocninou vzdálenosti:

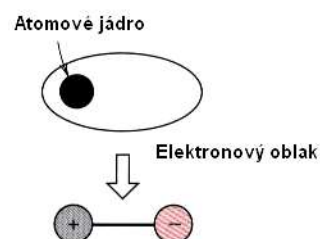
$$E_{disp} \approx \frac{1}{r^6} \quad (2.1)$$



Obr.2.6. Závislost přitažlivých a odpudivých sil (a) a vzájemné potenciální energie (b) dvou atomů na jejich vzájemné vzdálenosti.



Obr.2.7. Elektrický dipól.



Obr.2.8. Indukované Van der Waalsovy síly.

b) Indukované Van der Waalsovy síly.

Některé molekuly tvoří již samy od sebe tuhé dipóly (např. molekula HCl – viz Obr.2.8). Takové molekuly nazýváme *polárními molekulami*. Ty mohou indukovat dipóly v sousedních nepolárních molekulách nebo atomech, čímž opět vzniká mezi nimi vazba. Již z tohoto jednoduchého modelu plyne, že taková vazba bude silnější, než vazba disperzní. Podrobné výpočty však ukazují, že energie této vazby opět klesá se šestou mocninou vzdálenosti:

$$E_{ind} \approx \frac{1}{r^6} \quad (2.2)$$

c) Van der Waalsovy síly mezi permanentními dipóly.

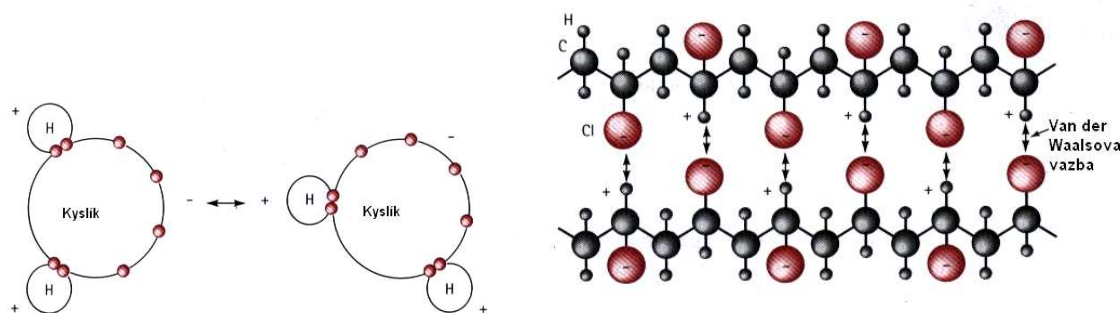
Pokud se látka skládá pouze z tuhých dipólů, potom mezi nimi existuje vazba ještě silnější, než vazba indukovaná (tzv. *orientační* Van der Waalsova vazba). Tu si můžeme představit tak, že např. záporný konec jedné molekuly je přitahován ke kladnému konci molekuly druhé, atd. Proto je tato vazba nejsilnější z Van der Waalsových vazeb. Její vazebná energie při nízkých teplotách klesá s třetí mocninou vzdálenosti

$$E_{or(n.t.)} \approx \frac{1}{r^3} \quad (2.3)$$

neboť uspořádané molekuly nejsou za nízkých teplot tak silně „rozhazovány“ tepelným pohybem. Za vyšších teplot energie orientačního vzájemného působení opět klesá se šestou mocninou vzdálenosti, jako je tomu u ostatních Van der Waalsových sil:

$$E_{or(v.t.)} \approx \frac{1}{r^6} \quad (2.4)$$

Van der Waalsova vazba je sice poměrně dosti slabá, ale má svůj velký význam, neboť se vyskytuje u všech látek (u většiny je však překryta některou ze silnějších vazeb). Na Obr. 2.9 jsou pro ilustraci uvedeny dva příklady výskytu této vazby.



Obr.2.9. Van der Waalsova vazba mezi atomy vody (a) a mezi řetězci polymeru (b)

2.2.2. Iontová vazba.

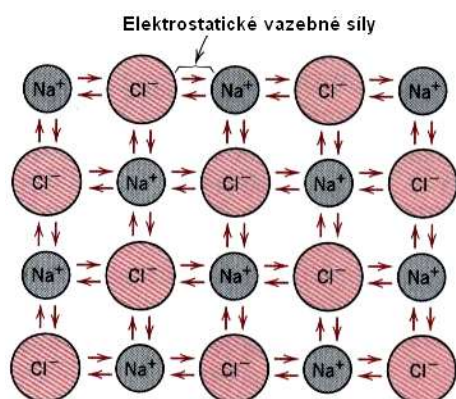
Atomy alkalických kovů (Li, Na, K, Rb, Cs, Fr) jsou charakterizovány tím, že mají v poslední orbitě jediný valenční elektron, slabě vázaný k celému atomu. Naopak halogenům (F, Cl, Br, I, At) chybí v poslední orbitě jeden elektron k tomu, aby byla zcela zaplněna. Opustí – li tedy valenční elektron atom alkalického kovu a přejde do elektronového obalu halogenu, stane se z něho kladný iont. Naopak z halogenu se stane iont záporný, přičemž oba ionty mají elektronovou konfiguraci vzácných plynů (mají všechny orbity plně zaplněné

elektrony). Výsledná vazba mezi oběma ionty je čistě elektrostatická (*iontová*) (Obr.2.9) a síly mezi nimi jsou dány Coulombovým zákonem

$$F = \frac{1}{4 \cdot \pi \cdot \epsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r^2} \quad (2.5)$$

(e je náboj elektronu a ϵ_0 je dielektrická konstanta (permitivita) vakua)

Vazebná energie iontových krystalů je řádu 10^3 kJ / mol (5 eV / iont), tedy asi o dva řády vyšší, než energie Van der Waalsovy vazby.



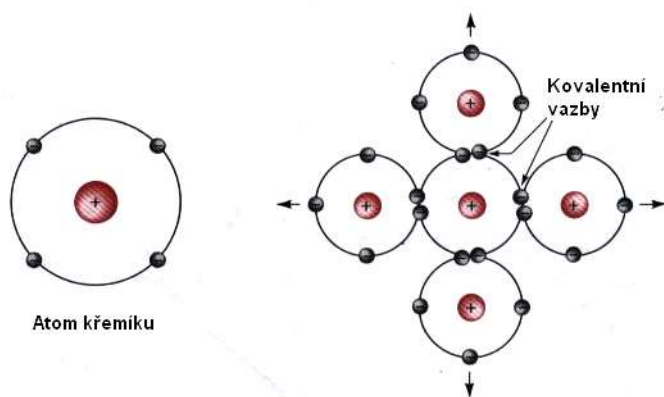
Obr.2.10. Iontová vazba (NaCl).

2.2.3 Kovalentní vazba.

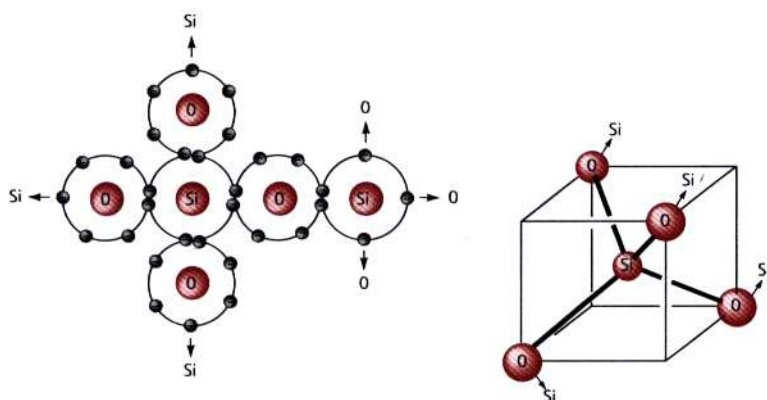
Podstatou *kovalentní vazby* je tzv. sdílení elektronů mezi sousedními atomy. Dva kovalentně vázané atomy přispívají každý nejméně jedním elektronem k vazbě a tyto elektrony jsou tedy „majetkem“ obou atomů. Kovalentní vazba mezi atomy křemíku je schematicky znázorněna na Obr.2.11. Její směrovost pak na Obr.2.12 (pro křemen SiO_2).

Charakteristickou vlastností kovalentní vazby je již zmíněné *sdílení elektronů*, *směrovost* (kovalentní vazba se uskutečňuje pouze pod určitými úhly) a *nasyčenost* (daná mocností vázaných atomů). Je třeba poznamenat, že k úplnému pochopení kovalentní vazby nestačí názorné představy klasické fyziky. Dokonale ji lze objasnit pomocí kvantové mechaniky.

Kovalentní vazba je v přírodě velmi rozšířená. Váží se jí atomy nekovových prvků samy se sebou v molekuly (H_2 , Cl_2 , O_2 , atd.), stejně jako mezi sebou (CH_4 , H_2O , HNO_3 , apod.). Patří sem ale rovněž diamant, krystaly křemíku a germania a slitiny typu GaAs, InSb, atd. Kovalentní vazba bývá velmi silná (diamant taje až při teplotě 3550°C), ale také mnohem slabší (vismut taje již při 270°C). Setkáme se s ní i při vzniku polymerů, kde umožňuje tvorbu dlouhých řetězců atomů a molekul.



Obr.2.11. Kovalentní vazba mezi atomy křemíku



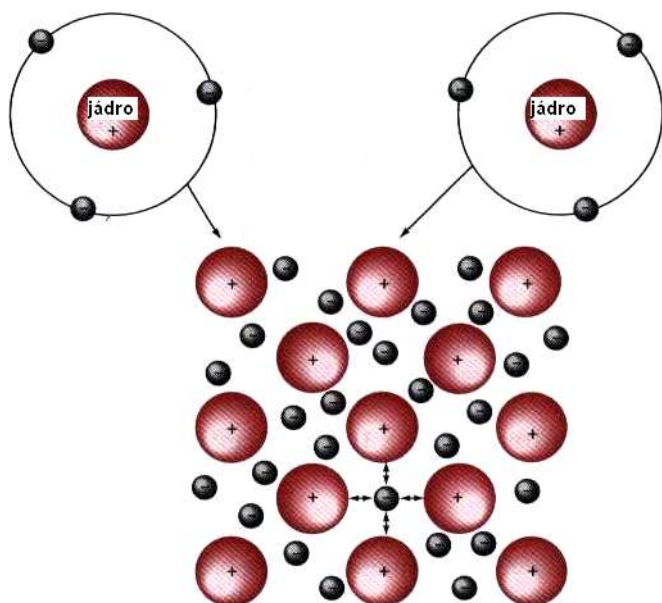
Obr.2.12. Směrnost kovalentní vazby mezi atomy v SiO_2

2.2.4 Kovová vazba.

Atomy kovových prvků mají jeden, dva, nebo maximálně tři valenční elektrony. Model kovové vazby je velmi názorný a je založen na skutečnosti, že tyto elektrony, slabě k atomu vázané, nejsou vázány s žádným určitým atomem, ale jsou víceméně volné a pohybují se chaotickým pohybem v oblasti mezi kladnými ionty kovových atomů (které vznikly z neutrálních atomů poté, jak je elektrony opustily – viz Obr.2.13.).

Volné elektrony, nacházející se mezi kladnými ionty jednak odstiňují jejich elektrostatische odpudivé síly a zároveň působí jako „lepidlo“, které je váže dohromady.

Nastíněný mechanismus kovové vazby vysvětluje kvalitativně některé charakteristické vlastnosti kovů, jako je například velká tepelná a elektrická vodivost, apod. Vazebná energie kovové vazby může být jak poměrně nízká, např. $68 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ ($0,7 \text{ eV}$ / atom) pro Hg (bod tání $-39 \text{ }^\circ\text{C}$), až po $850 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ ($8,8 \text{ eV}$ / atom) pro wolfram (bod tání $3410 \text{ }^\circ\text{C}$).



Obr.2.13. Schéma kovové vazby.

? 2.3. Kontrolní otázky

2.3.1. Pokuste se odhadnout fyzikální podstatu nejdůležitější námitky proti platnosti Bohrova modelu atomu.

2.3.2. Objasněte, proč mají krystaly, vázané Van der Walsovou vazbou (např. plyny v pevném skupenství) velmi nízký bod tání.

2.3.3. Na základě znalosti podstaty iontové vazby vysvětlíte kvalitativně elektrické vlastnosti těchto látek (např. NaCl).

2.3.4. Vysvětlíte kvalitativně, proč jsou kovy nejlepšími vodiči elektrického proudu.

2.3.5. Objasněte, proč elektrický odpor kovů roste s teplotou.

2.3.6. Odhadněte počet atomů ve špendlíkové hlavičce (cca 1 mm^3).

3. Struktura pevných látek.



Cíl:

Většina vlastností pevných látek souvisí s jejich strukturou. Tyto vlastnosti (elektrické, mechanické, optické a magnetické) se často značně od sebe liší v závislosti na tom, zda se jedná o látky amorfnní nebo krystalické a nebo i na tom, v jaké krystalografické soustavě látky krystalizují. Proto si v této kapitole shrneme to nejdůležitější, co se týká krystalické struktury pevných látek.



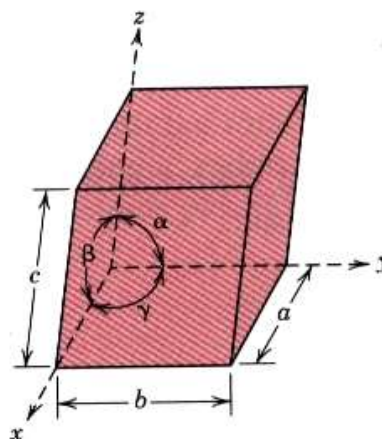
3.1. Krystalografické soustavy.

Již v polovině 19. století se francouzský krystalograf A.Bravais zabýval otázkou, kolika různými způsoby lze v prostoru uspořádat atomy (modelované tuhými kuličkami) za podmínky, že okolí každého z nich je stejné. Zjistil, že to lze provést 14 způsoby. Pro každý z nich lze nalézt minimální prostorový útvar, jehož posouváním (translací) v prostoru získáme celý krystal (viz Obr.3.1). Takový základní motiv nazýváme *elementární buňkou*. Z geometrických úvah plyne, že elementární buňka obsahuje jeden atom (molekulu, kuličku, apod.). Některé z takových elementárních buněk si jsou geometricky podobné a tak můžeme 14 elementárních buněk sdružit do 7 krystalografických soustav. Soustavu krychlovou (kubickou), šesticennou (hexagonální), trojklonnou (triklinickou), jednoklonnou (monoklinickou), kosočtverečnou (ortorombickou), čtverečnou (tetragonální) a trigonální, neboli klencovou (romboedrickou). Základní buňky těchto 7 soustav již nemusí obsahovat pouze jeden atom a proto jsou *složené*. Pokud obsahuje složená buňka atom uprostřed základny, nazýváme ji bazálně centrovanou, pokud jsou atomy uprostřed stěn, nazýváme ji plošně centrovanou (f.c.c.) a pokud je uprostřed buňky, jedná se o buňku prostorově centrovanou (b.c.c.) – zkratky mají původ ve zkrácených anglických názvech: „face-centered cubic“, „body-centered.cubic“.

Elementární buňka



Obr.3.1. Elementární buňka



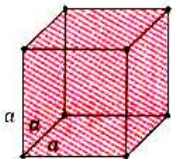
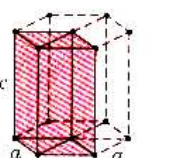
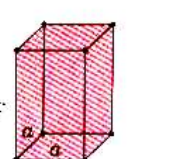
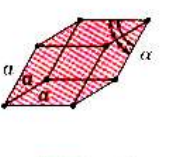
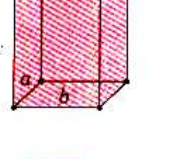
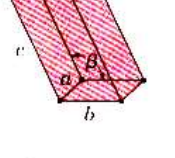
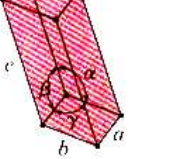
Obr.3.2. Parametry elementární buňky

Geometrie elementárních buněk je definována na základě skutečnosti, že máme k dispozici tři směry (x, y, z) (a na nich tři vzdálenosti mezi nejbližšími uzly, a , b a c – tzv.

mřížkové konstanty) a tři úhly (α, β, γ). Všechny krystalografické soustavy a elementární i složené buňky lze potom charakterizovat různými hodnotami všech těchto šesti parametrů (viz Tab.3.1 a Obr.3.2.).

Elementární buňky mají své významné body, směry a roviny souměrnosti. Podrobný popis prvků souměrnosti krystalů vychází za rámec této práce a čtenář se o něm může poučit ve speciální literatuře z oboru krystalografie.

Tab.3.1.

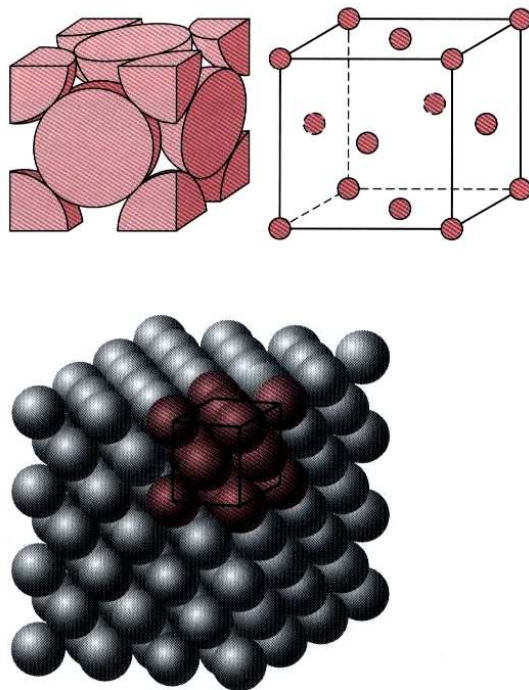
Soustava	Úseky na osách	Úhly	Elementární buňka
Kubická (krychlová) prostá, prostorově a plošně centrovaná.	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	
Šesterečná (hexagonální), prostá	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$	
Čtverečná (tetragonální), prostá a prostorově centrovaná	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	
Trigonální - klencová (romboedrická), prostá	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	
Kosočtverečná (ortorombická), prostá, bazálně, plošně i prostorově centrovaná.	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	
Jednoklonná (monoklinická), prostá a bazálně centrovaná	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$	
Trojklonná (triklinická), prostá	$a \neq b \neq c$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	

Dále si podrobněji všimneme soustavy kubické a hexagonální, neboť většina kovů krystalizuje právě v těchto soustavách. Prostá kubická soustava (Obr.3.1) se v přírodě nevyskytuje (zřejmě z důvodů energetických). Na Obr.3.3. je ukázána soustava kubická plošně centrovaná (f.c.c.), na Obr.3.4. soustava kubická prostorově centrovaná (b.c.c.) a na Obr.3.5. soustava hexagonální s těsným uspořádáním (h.c.p. = hexagonal close-packed).

Poznámka: pod pojmem *koordinační číslo* rozumíme počet nejbližších sousedů a pod pojmem *koeficient zaplnění* poměr

$$k = \frac{\text{celkový objem atomů v buňce}}{\text{celkový objem buňky}}$$

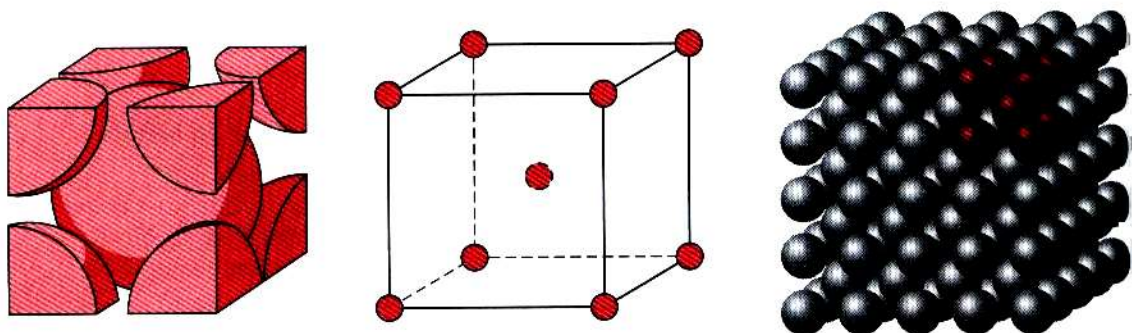
Jednoduchým výpočtem se dá přesvědčit o tom, že koeficient zaplnění pro f.c.c a h.c.p struktury je stejný a větší, než pro strukturu b.c.c a buňku kubickou prostou.



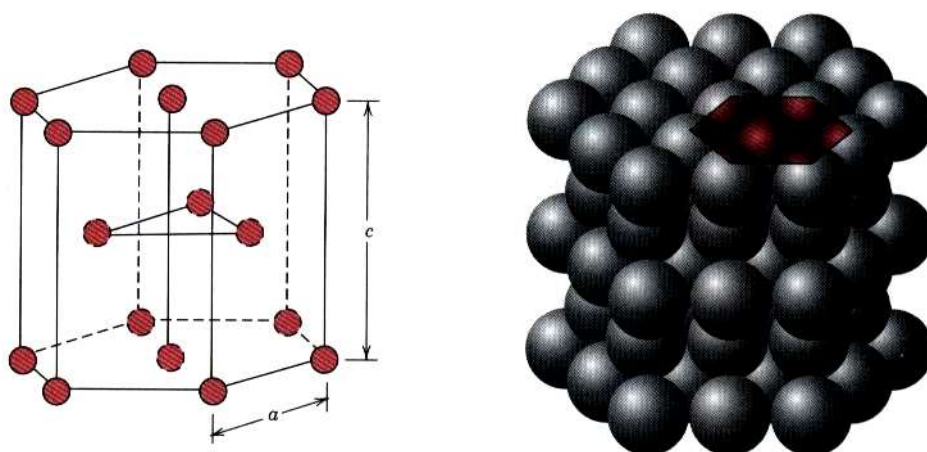
Obr. 3.3. Kubická plošně centrovaná soustava (f.c.c.)

3.2. Směry a roviny v krystalech.

Již z pouhého kvalitativního popisu struktury krystalů plyne, že nejsou izotropní, tj. že mají v různých směrech různé vlastnosti (už třeba jenom proto, že v různých směrech jsou atomy od sebe vzdáleny o různou vzdálenost). Proto je důležité orientovat se v krystalech a umět popisovat přesně směry a roviny v nich.



Obr.3.4. Kubická prostorově centrovaná soustava (b.c.c).



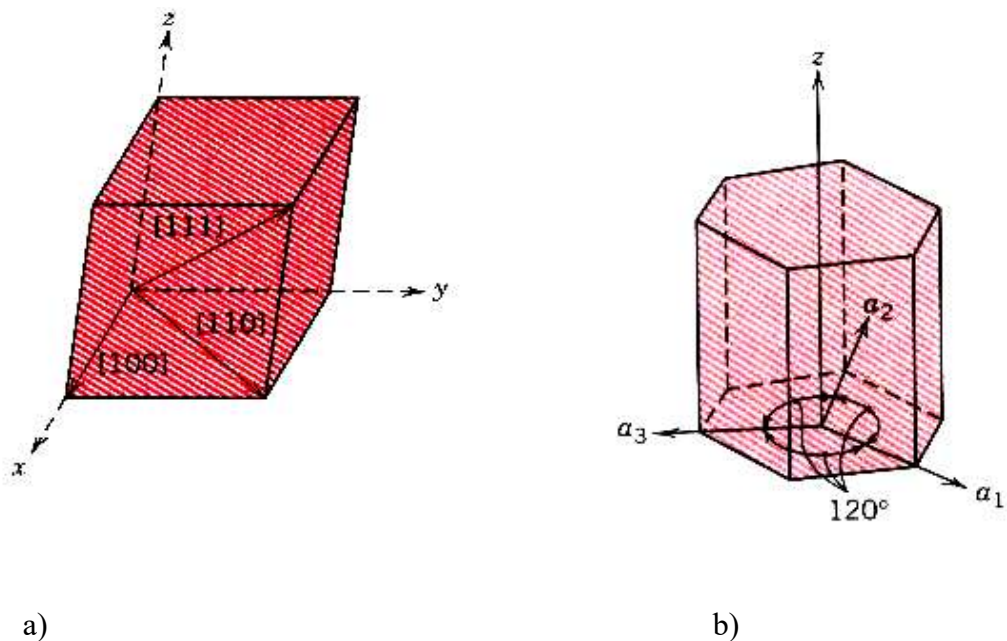
Obr.3.5. Soustava hexagonální s těsným uspořádáním (h.c.p.)

3.2.1. Krystalografické směry.

Směry v krystalech (tj. v elementární buňce, umístěné v pravoúhlé soustavě souřadnic, popisujeme pomocí vektoru, který má tyto vlastnosti:

- Má počátek v počátku soustavy souřadnic a končí v jednom z uzlů elementární buňky.
- Průměty vektoru do jednotlivých os soustavy souřadnic jsou rovny celistvému násobku rozměrů elementární buňky a, b, c .
- Tato tři čísla upravíme společným dělitelem tak, aby byla nejmenší.
- Získaná tři čísla zapíšeme do hranatých závorek $[m \ n \ p]$. Pokud je některé z nich záporné, napíšeme znaménko minus nad toto číslo., např. $[\bar{1} \ 1 \ 1]$.

V důsledku libovolné volby počátku soustavy souřadnic jsou směry $[100]$, $[\bar{1}00]$, $[010]$, atd. totožné, takže tvoří skupinu, kterou označíme lomenými závorkami a jako reprezentanta skupiny vybereme libovolného zástupce, např. $\langle 100 \rangle$ a zapíšeme ho do lomených závorek. (Obr. 3.6 a).



Obr.3.6. Krystalografické směry v kubické a hexagonální soustavě.

V krystalech s hexagonální strukturou se volí tzv. Millerova – Bravaisova soustava souřadnic s osami a_1 , a_2 , a_3 a z (Obr.3.6 b). Směry v hexagonálních krystalech jsou pak dány čtyřmi souřadnicemi $[m\ n\ s\ p]$, z nichž první tři jsou závislé, jak plyne z obrázku a platí pro ně vztah $s = -(m + n)$.

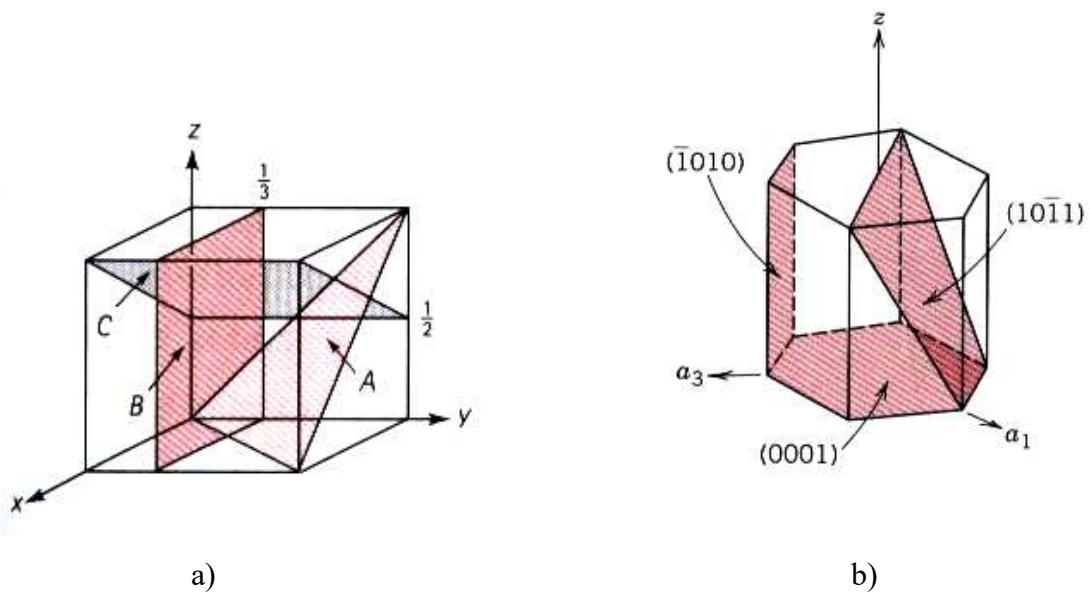
3.2.2. Krystalografické roviny.

Roviny v krystalech popisujeme pomocí tzv. Millerových indexů $(h\ k\ l)$. Přitom volba souřadnic je stejná, jako při určování směrů. Indexy h , k , l určíme následujícím způsobem:

- Úseky, které vytíná vybraná rovina na jednotlivých osách vyjádříme pomocí mřížkových parametrů a , b , c (pro roviny, rovnoběžné s některou stěnou buňky je takový úsek $\rightarrow \infty$).
- Vyjádříme převrácené hodnoty těchto úseků (pro roviny, rovnoběžné s rovinami xy , xz a zy je to 0).
- Tato tři čísla převedeme na nejmenšího společného jmenovatele.
- Čitatele potom zapíšeme jako Millerovy indexy dané roviny $(h\ k\ l)$.

Podobně jako u směrů, lze i v případě rovin říci, že existují skupiny rovin, které jsou identické co se týká fyzikálních vlastností (např. roviny $(\bar{1}\bar{1}1)$, $(\bar{1}1\bar{1})$, $(11\bar{1})$ atd.). Zástupce takových rovin pak napíšeme do složených závorek, např. $\{111\}$ (Obr. 3.7.a).

V případě hexagonálních krystalů použijeme stejně jako v případě směrů Millerovu – Bravaisovu soustavu souřadnic a Millerovy indexy rovin budou mít čtyři čísla $(h\ k\ i\ l)$, z nichž první tři jsou závislá a platí mezi nimi vztah $i = -(h + k)$ (viz Obr. 3.7 b).

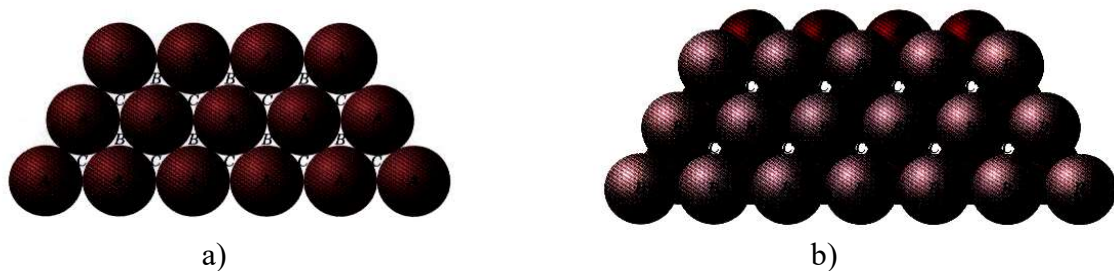


Obr.3.7. Krystalografické roviny ve struktuře kubické a) a hexagonální b).

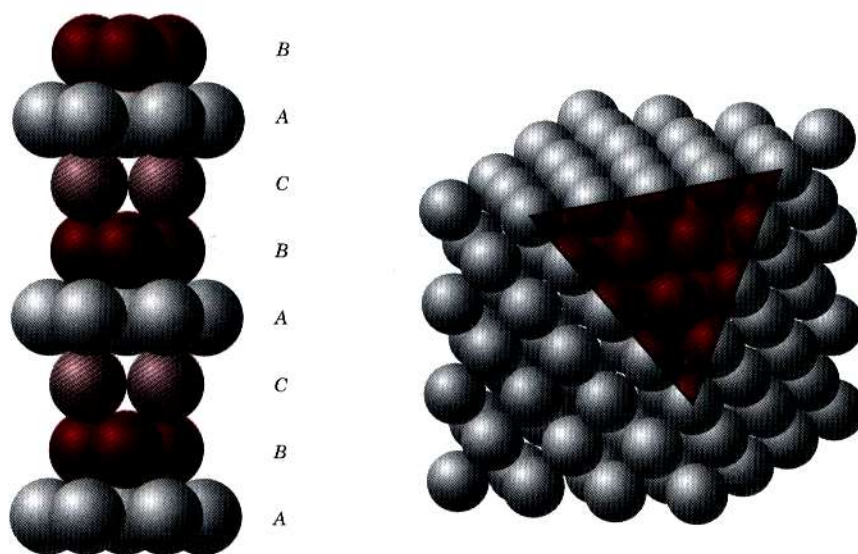
3.3. Krystaly s nejtěsnějším uspořádání atomů.

Již jsme uvedli, že krystaly s f.c.c a h.c.p strukturou mají nejvyšší koeficient zaplnění. V obou případech se jedná o tzv. *strukтуры s nejtěsnějším uspořádáním*. Jinými slovy, chceme – li uspořádat tuhé kuličky (atomy) tak, aby se jich do daného objemu vešlo co nejvíce, musíme to udělat jedním, nebo druhým způsobem (f.c.c , nebo h.c.p). V praxi to znamená, že např. na rovinu stolu poskládáme tuhé kuličky podle Obr. 3.8. a). Na ně poskládáme do jamek, označených písmeny B další vrstvu kuliček (Obr. 3.8.b)). Třetí vrstvu můžeme buď umístit do míst C (a tím vznikne struktura f.c.c), nebo nad původní vrstvu A (tím vznikne struktura h.c.p). Pro strukturu f.c.c tedy platí střídání rovin ABCABCABC...(Viz Obr.3.9). a pro strukturu h.c.p střídání ABABABAB.....(viz Obr.3.10)

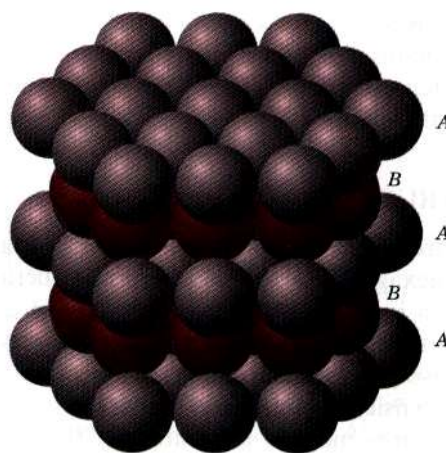
Poznámka: naruší-li se pořadí rovin, např. ABABCABAB, nebo ABCABABCABC, hovoříme o *vrstvené chybě* v daném místě krystalu (koeficient zaplnění se samozřejmě nezmění).



Obr. 3.8. Ilustrace vzniku nejtěsnějšího uspořádání.



Obr.3.9. Kubická plošně centrovaná struktura (nejtěsnější uspořádání)

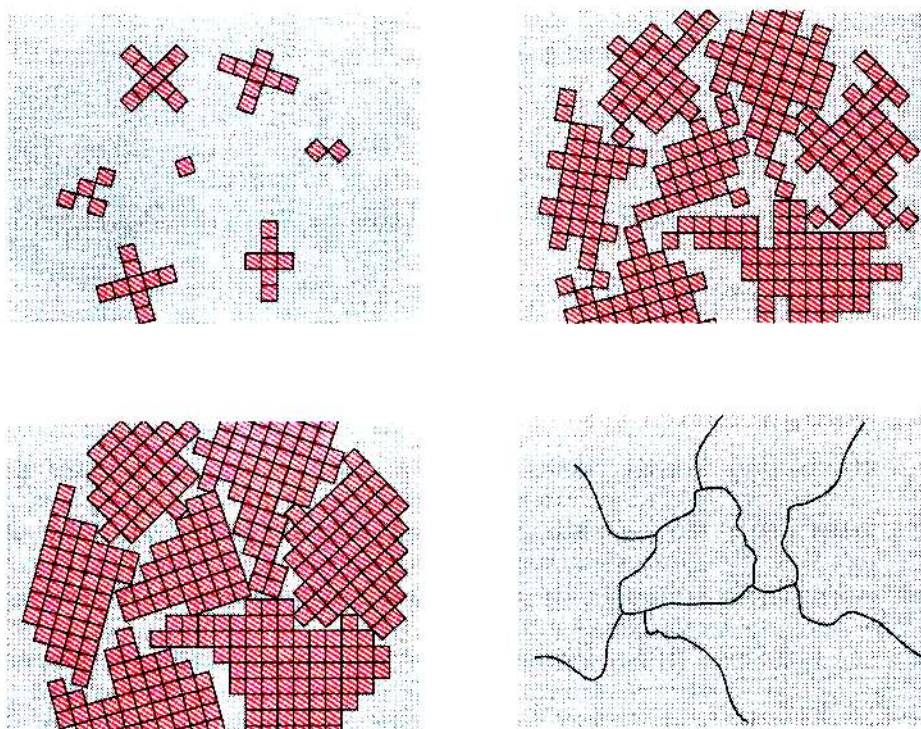


Obr.3.10. Mřížka hexagonální s nejtěsnějším uspořádáním

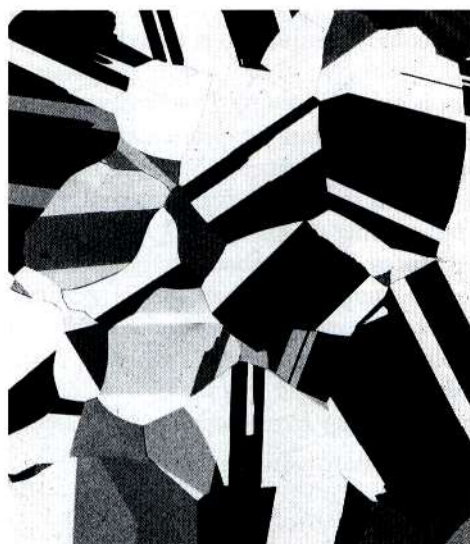
3.4. Polykrystalické materiály, anizotropie, amorfní látky.

Pokud se elementární buňka opakuje translačně v celém objemu, hovoříme o *monokrystalu*. Pouze některé látky se však v přírodě vyskytují ve formě monokrystalů (např. diamant a další drahé kameny, oxid křemičitý apod.). Většina ostatních látek (zejména kovy) krystalizuje ve formě *polykrystalů*, tj. konglomerátů, složených z drobných monokrystalků (tzv. *zrn*), oddělených od sebe *hranicemi zrn* (Obr.3.11). (Důvodem je zřejmě skutečnost, že polykrystalové mají ve srovnání s monokrystalami nižší energii a vyšší entropii). Na Obr.3.12 pak je uvedena polykrystalická struktura oceli, získaná leštěním a následným leptáním vzorku. Pozorováno v optickém mikroskopu.

Významnou vlastností monokrystalů je tzv. *anizotropie* fyzikálních vlastností, tj. často značně se lišící vlastnosti v různých směrech (např. modul pružnosti, optické a elektrické vlastnosti, apod.). U polykrystalů je anizotropie potlačena tím, že zrna mají různou orientaci. Přesto i u nich se může objevit anizotropie, způsobená tím, že polykrystalové jsou zpravidla během výroby deformovány (válcovány, protlačovány) v jednom směru a zrna pak mají v tomto směru protáhlejší tvar – tzv. *texturu*. Potom i u polykrystalů pozorujeme anizotropii fyzikálních vlastností, závislou na směru textury.



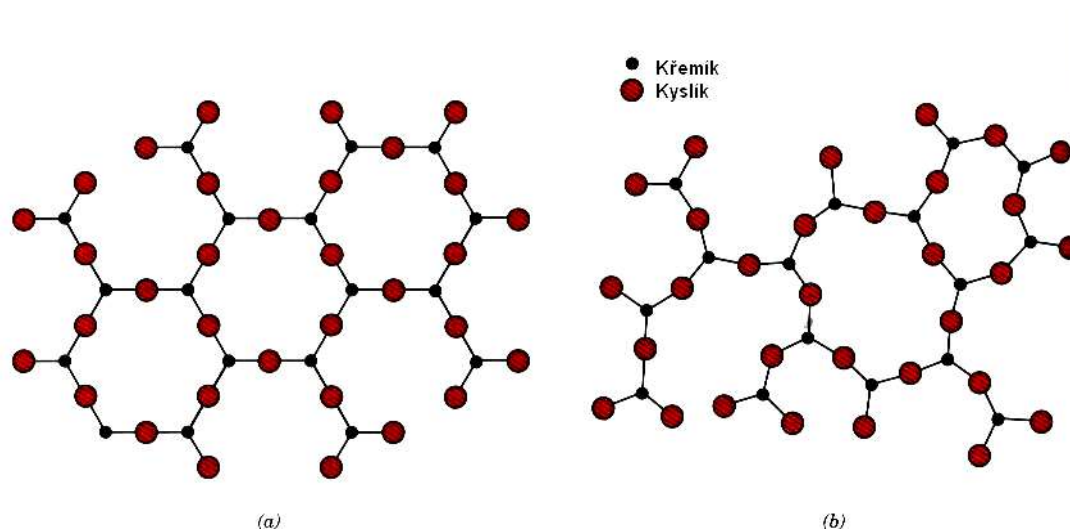
Obr.3.11. Vznik polykrystalů (tuhnutím)



Obr.3.12. Polykrystalická struktura (ocel)

Amorfni látky.

Kromě krystalických a polykrystalických látek se v přírodě vyskytují i *látky amorfni*, tj. takové, které nemají žádné významné uspořádání. Patří sem např. sklo, asfalt, vosk, apod., tj. látky, které svojí strukturou připomínají spíše kapaliny. Proto je někdy též nazýváme přechlazenými kapalinami (skutečně pozorujeme, že pomalu tečou – například asfalt a dokonce i sklo, i když velice pomalu). Jako příklad uvádíme na Obr. 3.13 a) a b) strukturu amorfniho a krystalického SiO_2 .



Obr.3.13. Struktura krystalického a) a amorfniho SiO_2

Krystalická struktura látek byla potvrzena a je stále zkoumána zejména pomocí difrakčních metod. Podrobněji je popíšeme ve zvláštní kapitole, neboť se jedná o velmi rozsáhlou a důležitou oblast experimentální fyziky.



3.5. Kontrolní otázky

- 3.5.1. Definujte pojem *elementární buňka*.
- 3.5.2. Popište rozdíl mezi elementární a složenou buňkou.
- 3.5.3. Zdůvodněte, proč krychlová bazálně centrovaná buňka nemůže být Bravaisovou buňkou.
- 3.5.4. Zdůvodněte, proč při výpočtu Millerových indexů rovin užíváme převrácené hodnoty úseků, vytknutých rovinou na jednotlivých osách (proč např. nepoužíváme přímo délky zmíněných úseků).
- 3.5.5. Určete koeficient zaplnění a koordinační číslo pro:
- buňku kubickou prostou,
 - buňku kubickou plošně centrovanou,
 - buňku kubickou prostorově centrovanou,
 - buňku hexagonální s těsným uspořádáním.
- 3.5.6. Na základě obecných fyzikálních principů (minimum energie a maximum entropie) vysvětlete, proč kovy krystalizují převážně jako polykrystaly a ne jako monokrystaly, nebo látky amorfni.