

Úvod

Počátek procesu, který nazýváme technický pokrok je v dávné historii naší civilizace spjatý především s rukodělnou prací (z řeckého *techné* – zručnost) a jednoduchým využíváním přírodou nabízených materiálů. Využívání materiálů vytvořených na základě lidského přičinění je dlouhý proces s rozeznatelnými technologickými skoky (doba bronzová, doba železná...), který sám sebe urychluje. O všeobecně rozšířeném využívání uměle vytvořených materiálů můžeme před nástupem průmyslové revoluce, to pro Evropu znamená od druhé poloviny 18. století, mluvit jen výjimečně. Takové výjimky najdeme nejčastěji ve výrobě zbraní, skla a textilu.

Cílený materiálový výzkum nastartovala až poptávka po materiálech schopných naplnit představy prvních vynálezců a techniků.

Nauka o materiálech je typickým představitelem nauky multidisciplinární. Je téměř nemožné najít přírodovědní obor, který by s problematikou materiálů nesouvisel. Podíl fyziky, chemie, matematiky a celé řady experimentálních metod v materiálové vědě nelze přehlédnout.

Není třeba zvlášť obhajovat názor, že se lidská civilizace, respektive její technické schopnosti, rozvíjí obrovským tempem. V čase přibývá jedinců našeho druhu přibližně exponenciálně a s technickými poznatky je to podobné. V době vynálezu technologie výroby kamenných šípových hrotů bylo na planetě asi 100 000 našich předků. 5 miliónů lidí bylo na Zemi, když byla objevena keramika, 10 miliónů při vynálezu technologie výroby skla. 100 miliónů lidí bylo současníky objevu slitin barevných kovů, v době vynálezu automobilu už byla lidí jedna miliarda. V současné době, kterou lze charakterizovat expanzí nanotechnologií, obývá Zemi řekněme 7 miliard lidí. Jaká bude technika v době, kdy bude na planetě 10 miliard lidí, lze jen stěží odhadovat.

Při bližším pohledu zjistíme, že toto tempo růstu technicko-technologických schopností přímo souvisí s rozvojem informačních technologií, komunikací a aplikací nových materiálů. Z této úvahy plyne, že když budeme studovat vlastnosti materiálů, budeme se zabývat problematikou, která je pro rozvoj civilizace klíčová. Osou našeho snažení a hlavní myšlenkou je hledání souladu mezi použitým materiálem a projektovanými vlastnostmi budoucího výrobku.

Vzhledem k prostoru, který pro seznámení s problematikou technických materiálů máme k dispozici, nemůžeme než tento text označit pouze za stručný úvod do nauky o materiálu. Motivaci ke studiu hledáme v předpokladu, že pro absolventa přírodovědecké fakulty je orientace v technických materiálech nezbytná anebo jinak, že neznalost rozdílů mezi ocelí a litinou, materiály označenými zkratkami PVC a PET nebo keramikou a sklem je těžko přijatelný handicap.

1. Třídění materiálů

Materiály lze klasifikovat podle řady různých kritérií. Můžeme je dělit podle složení, struktury, použití, vlastností atd. Naprostou většinu technických materiálů lze zařadit do některé ze čtyř následujících skupin.

- I. Kovy
 - a) železo a jeho slitiny
 - b) neželezné kovy a jejich slitiny

- II. Nekovy
 - a) látky anorganické
 - přírodní
 - umělé
 - b) látky organické
 - přírodní
 - umělé

- III. Skla, slinuté materiály a kompozity

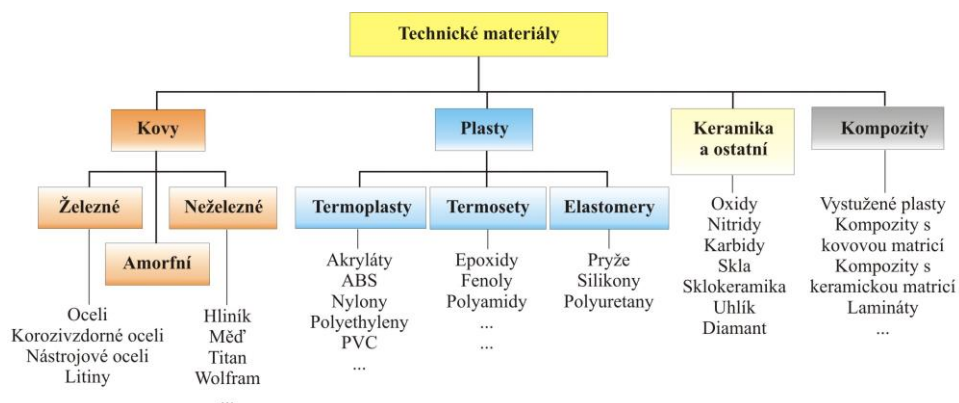
- IV. Pomocné technologické materiály

Výše uvedené třídění materiálů je založeno částečně na chemickém složení, z části na způsobu výroby a z části na způsobu použití. Toto třídění není zjevně ze systematického pohledu optimální, ale pohledu praxe je výhodné. V dalších podkapitolách tohoto textu následuje stručná charakteristika uvedených čtyř základních skupin technických materiálů.

Systematicky správný přístup ke klasifikaci technických materiálů je například třídění podle jejich struktury, na materiály:

- monokrystalické (křemík, ..)
- polykrystalické (křemík, kovy, keramika, ..)
- částečně krystalické (keramika, plasty, ..)
- amorfni (plasty, sklo, ..).

Následující schéma na obr. 1 vystihuje tradiční přístup ke třídění technických materiálů [Kalpakjian, Schmid - Manufacturing Processes for Engineering Materials].



Obr. 1: Ukázka možného třídění technických materiálů.

1.1 Kovy

Kovy a slitiny kovů jsou mezi využívanými technickými materiály deset tisíc let. V zemské kůře je kovů poměrně málo (7 % železa a 4 % hliníku).

Charakteristická je kovová vazba, která udržuje atomy kovů pohromadě prostřednictvím sdílení valenčních elektronů. Kovová vazba je mezi vazbami primárními (silnými) ta nejslabší. Typické vlastnosti kovů jsou vysoká houževnatost, pevnost a elektrická a tepelná vodivost. Kovové materiály jsou snadno obrobitelné, dají se dobře tvářet, slévat, svařovat.

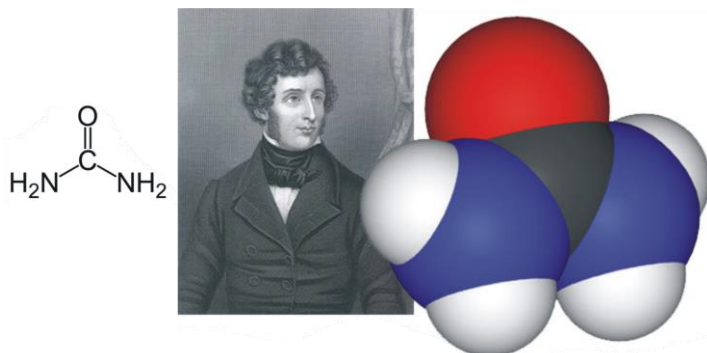
Železo má mezi kovy výsadní postavení. Je to dáno tím, že jeho slitiny s uhlíkem mohou mít natolik různorodé vlastnosti, že možnosti jeho využití jsou nepřeberné. Přihlédneme-li k variabilitě železných materiálů, které lze získat pomocí legování železa jiným kovem, shodneme se na tvrzení, že železné materiály jsou pro nás naprosto zásadní.

Člověk se naučil používat některé kovy podstatně dříve než železo (zlato, stříbro, měď, cín), a to i ve formě slitin. Nejznámější je asi *bronz*, což je slitina mědi a cínu. Obecně se pojmem bronz označují i slitiny mědi s jinými kovy (hliník, nikl, mangan, beryllium, olovo) mimo zinek. Slitina mědi a zinku má zvláštní název - *mosaz*. Novodobé technologie nejsou myslitelné bez těchto „ostatních“ kovů. Význam zlata je nejen technologický, protože bylo motivací pro mnoho kapitol našich dějin.

1.2 Nekovy

Obecně lze mezi nekovy zařadit všechny materiály, nespádající do kategorie *kovy*. Podle chemického složení dělíme nekovové materiály na anorganické a organické. Za organické látky byly dříve považovány všechny látky rostlinného nebo živočišného původu. Když však v roce 1828 německý chemik Friedrich Wöhler syntetizoval močovinu ($(\text{NH}_2)_2\text{CO}$ – první syntetickou organickou sloučeninu (Obr. 2), bylo nutné zavést novou definici.

Organické sloučeniny jsou všechny sloučeniny uhlíku vyjma oxidu uhelnatého, uhličitého, kyseliny uhličitá a jejich solí, kyanidů, karbidů a karboxylů kovů¹.



Obr. 2: Močovina [www.chemistryland.com].

Anorganické i organické materiály dále rozdělujeme podle původu na přírodní a umělé. Dále jsou uvedeny příklady jejich zástupců.

- | | | |
|----------------------|-------------|---|
| a) látky anorganické | - přírodní: | žula, písek, kaolin, vápenec, čedič, křišťál, diamant, helium, voda |
| | - umělé: | cement, technické sklo |
| b) látky organické | - přírodní: | ropa, asphalt, kaučuk, celulóza, škrob, dřevo, bavlna, hedvábí |
| | - umělé: | obecné označení - umělé hmoty, plasty |

¹ Karboxyl - sloučenina kovu s oxidem uhelnatým; karbid - sloučenina uhlíku s kovem; kyanid - sůl kyseliny kyanovodíkové HCN.

Významnou skupinu nekovů tvoří látky *makromolekulární (polymerní)*, a to anorganické i organické. Makromolekulární látky jsou tvořeny dlouhými řetězci sestavenými z pravidelně se opakujících stavebních jednotek, délka řetězce je tak velká, že se většina vlastností polymeru nezmění na základě malé změny počtu stavebních jednotek. Příkladem může být *polyetylén*.

Schéma přípravy polyetylénu má zjednodušeně tři kroky:

1. monomer $\text{CH}_2 = \text{CH}_2$ etylén
2. mer $-\text{CH}_2 - \text{CH}_2 -$ přechodná forma, konstituční jednotka
3. polymer $[-\text{CH}_2 - \text{CH}_2]_n^2$ práškový polyetylén

Monomer, strukturální jednotka – nízkomolekulární organická sloučenina, ze které při polyreakcích vznikají polymery, získávána z primární suroviny (ropa, uhlí...) krakováním. V našem příkladu je prvním stupněm etylén. Etylén je nenasycený uhlovodík³, bezbarvá kapalina s nízkým bodem varu (10,4 °C), nasládlou vůní a hustotou menší než je hustota vody. Odpařený etylén je ve směsi se vzduchem explozivní a má narkotizační účinky.

Mer, monomerní jednotka - největší konstituční (základní) opakující se jednotka, kterou jedna molekula *monomeru* přispívá ke struktuře makromolekuly. Je to přechodná forma vznikající během polyreakce. mer je jednotka skutečně nebo koncepčně odvozená z molekul o nízké základní mol. hmotnosti.

Monomer a mer jsou vzájemně ve velmi úzkém vztahu. Za mer však není vždy považována největší strukturální chemická jednotka. V případě polyetylénu je mer $-\text{CH}_2-\text{CH}_2-$, nicméně za strukturální jednotku bývá označováno $-\text{CH}_2-$ s tím, že nerespektujeme původní definici, ale za konstituční jednotku považujeme naopak nejmenší opakující se jednotku (CRU – constitutional repeating unit). První varianta zápisu je výhodnější pro znázornění původu látky v polymeraci. Podle „Zákona o chemických látkách ...“ je monomerní jednotka zreagovaná forma monomeru v polymorfní molekule.

Obecně polymerní látky mají malou hustotu, jsou měkké, lehce zpracovatelné (lisování, vstřikování do forem), jsou elektrickými i tepelnými izolanty, jsou měkké a rozkládají se na jedovaté zplodiny. Polymerní látky je možné dělit podle několika kritérií:

1. Podle původu

přírodní – původní, modifikované

syntetické – podle typu *polyreakce*, při které vznikají, je dále dělíme na:

polymery (polyethylen, polypropylen, polyvinylchlorid)

- polymerace - násobná *adice* činidla na dvojnou vazbu – vznikne vazba jednoduchá

polykondenzáty (polyestery, polyamidy)

- polykondenzace - *adice* + *eliminace* - základní molekuly mají aspoň dvě funkční skupiny anebo aktivní vodík, odštěpením vznikne jednodušší vedlejší sloučenina, například voda

polyadukty (polyuretany)

- polyadice - nedochází k odštěpování vedlejší sloučeniny, ale k přesmykům

² n – polymerační stupeň, který vyjadřuje počet jednotek v molekule a určuje délku polymerního řetězce.

³ Nenasycené uhlovodíky obsahují alespoň jednu dvojnou vazbu.

2. Podle typu řetězení molekul

lineární	-	stavební jednotky uspořádány za sebou
rozvětvené	-	minimálně tři místa v molekule schopná vázat vedlejší molekulu
plošně zesíťované	-	příčným spojením lineárních řetězců
prostorově zesíťované	-	stavební jednotky se váží do trojrozměrné sítě

3. Podle chování za vyšších teplot

termoplasty	-	po zahřátí měknou a jsou tvárné, po následném ochlazení opět tvrdnou, tyto změny jsou opakovatelné, cyklováním teplot dochází k postupné degradaci původních vlastností
	-	složeny z vzájemně nepropojených řetězců
	-	při změnách teplot se nemění chemické složení, ale zkracují se molekulární řetězce
	-	polyethylen, nylon, polystyren
reaktoplasty	-	termosety
	-	vytvrzovány pomocí záření, zvýšené teploty a tlaku, po vytvrzení je nelze převést zpět do plastického stavu, dalším zvyšováním teploty křehnou a rozpadají se (oxidace, karbonizace)
	-	zesíťovaná struktura, prostorové sítě jsou podobné krystalové mřížce nebo síťování ve skle
	-	první umělé hmoty – bakelit
	-	elastomery
	-	do jisté míry podobné termosetům, mají zesíťovanou strukturu
	-	ohřevem se také nestávají plastickými, ale jejich vytvrzování probíhá chemickou cestou pomocí síry – <i>vulkanizací</i>
	-	kaučuk (typický příklad přírodního polymeru)

4. Podle technických vlastností

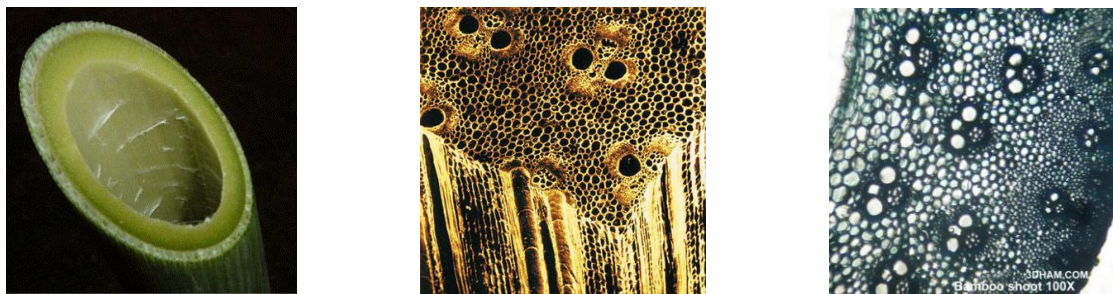
konstrukční plasty
vstřikovací hmoty
fólie
...

1.3 Skla, slinuté materiály a kompozity

Skla jsou amorfni homogenni pevné látky, které vznikají z taveniny skleným přechodem. Výchozím materiálem může být sklářský kmen různého složení (křemenné, křemičité písky s tavidlem), což odpovídá tradiční představě o sklu. Současné technologické postupy umožňují výrobu skel na bázi různých materiálů, například kovů.

Slinuté (spékané, sintrované) materiály - hutné polykrystalické materiály, které nevznikají krystalizací z taveniny, roztoku, plazmatu nebo z plynu. V tomto případě jde o technologii vzniku materiálu přímo z pevné fáze v disperzním stavu. Výchozí surovina ve formě prášku je za zvýšených teplot a tlaku zhuštěna. Vlastnosti slinutého materiálu jsou dány jednak původními složkami, jednak vznikající mezivrstvou, která je sice objemově zanedbatelná, ale pro nový materiál má význam zásadní. Touto technologií je získávána většina umělých materiálů – keramika, cihlářské výrobky.

Kompozity - materiálové systémy, které jsou složeny z více (nejméně dvou) složek nebo fází (konstituentů), z nichž alespoň jedna je pevná, a tyto fáze mají makroskopicky rozeznatelné rozhraní (přechodové oblasti – mezivrstvy, mezifáze). Cílem vývoje a výroby kompozitního materiálu je získat materiál se synergickým účinkem v jeho struktuře tak, aby měl lepší vlastnosti, než mají jednotlivé jeho složky samy nebo ve směsi. Výroba prvních moderních kompozitů je technologicky zvládnuta od 30. let 20. století (sklolaminát, pertinax) a zhruba posledních třicet let jsou kompozity používány pro moderní konstrukce (rakety, letecký a automobilový průmysl, sportovní vybavení, stavebnictví atd.). Kompozitní materiál může být vytvořen na bázi organických i neorganických složek. Například z polymerů se vytváří řada kompozitů přidáním jiných materiálů. Na závěr je třeba říci, že velká většina konstrukčních materiálů v živé přírodě jsou právě materiály kompozitní (bambusový stvol, křídlo vážky, skořápka kokosového ořechu a další).



Obr. 3: Řez stvolem bambusu [www.sword-buyers-guide.com, www.spinnerschoice.com, www.3dham.com].



Obr. 4: Křídlo vážky [www.flickr.com, www.scienceblogs.com].

1.4 Pomocné technologické materiály

V této skupině lze najít i materiály, které by bylo možné morfologicky zařadit do některé z výše uvedených skupin. Specifikem pomocných materiálů je to, že nejsou konstrukční, nosné nebo obráběné, ale zajišťují funkčnost stojů a často jsou vyčerpány a musí se nahrazovat. Příklady: pohonné hmoty, maziva, hydraulické oleje, lepidla, tmely, abraziva, čisticí látky, barvy, laky, náplně do tepelně regulačních zařízení apod.

2. Uspořádání hmoty v prostoru

Hmota se v přírodě obvykle vyskytuje ve třech základních skupenstvích. *Pevné skupenství* je charakteristické tvarovou pružností určitou mírou schopností vracet se po odlehčení zatížení do původního stavu. *Kapaliny* nezachovávají tvar, ale zachovávají objem. *Plyny* nezachovávají tvar ani objem, tj. jsou stlačitelné.

Různé objemy volných prostorů v okolí částic hmoty v různých skupenských uspořádáních ovlivňují možnost volného přemísťování částic a obecně jejich pohyblivost (translaci, rotaci i vibrace okolo neutrálních poloh). Malé volné prostory, kdy jsou molekuly a atomy v menších vzdálenostech, než je dvojnásobek jejich poloměrů jsou typické pro kondenzované látky a jsou důvodem pro vysoký stupeň vzájemného silového ovlivňování částic a koordinaci jejich pohybů. Kondenzované látky, do kterých řadíme i kovy, se vyznačují vysokým stupněm vzájemné koordinace a uspořádanosti částic.

Obecně rozeznáváme základní tři stupně uspořádání látky. Soubory *neuspořádané, uspořádané na krátkou vzdálenost* a soubory *uspořádané na velkou vzdálenost*. Příkladem neuspořádané látky je inertní plyn v uzavřeném objemu. Volná vodní pára je příkladem látky uspořádané na krátkou vzdálenost, kdy jsou atomy uspořádány v přesných polohách jen v nejtěsnějším okolí náhodně vybraného atomu. Soustava uspořádaná na velkou vzdálenost, u níž je zachována prostorová symetrie i v makroskopickém měřítku, je reprezentována krystalem. Krystaly existují díky prostorově orientovaným silám navzájem přitahujících jednotlivé částice, které se nacházejí v periodicky rozmístěných uzlových bodech.

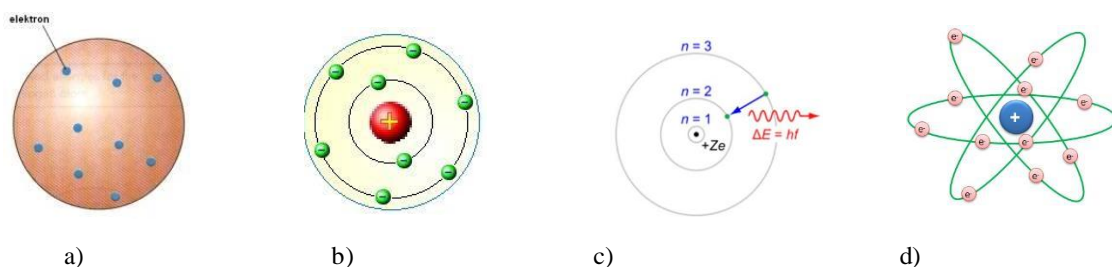
2.1 Stavba atomu

Molekula je část hmoty složená z atomů (minimálně dvou). Fyzikální, chemické a technologické vlastnosti materiálů jsou významně ovlivněny vazbami mezi atomy. Pro pochopení těchto vazeb je důležitá představa o stavbě atomu. Atomy tvořící molekulu jsou vzájemně vázány chemickou vazbou. Některé prvky se mohou samostatně vyskytovat ve formě samostatných atomů a jiné tvoří molekuly. Chemické sloučeniny jsou složeny z molekul tvořených z minimálně dvou různých atomů.

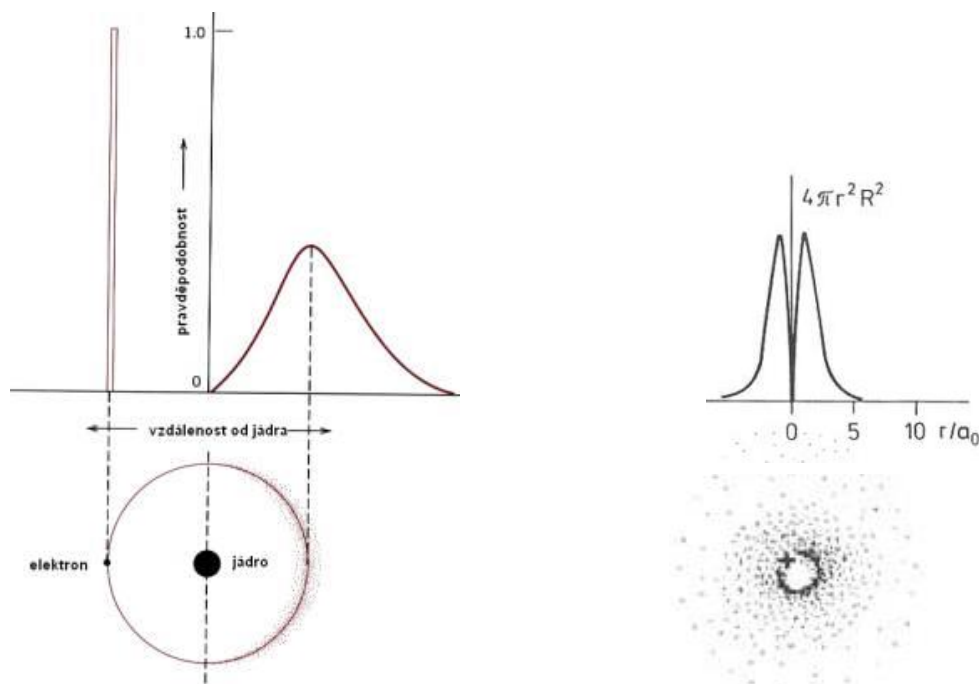
Koncepce atomu se od doby **Demokrita**, který postuloval **atom** jako dále nedělitelnou část hmoty, postupně vyvíjí. Původní představa o nedělitelnosti atomu dostala povážlivé trhliny s objevem elektronu.

Ernst Rutherford navrhl první planetární model atomu s centrálním jádrem, které je obklopeno elektrony na rovnoměrně rozložených drahách, nahradil tak předcházející pudingový model (**J.J.Thomson**).

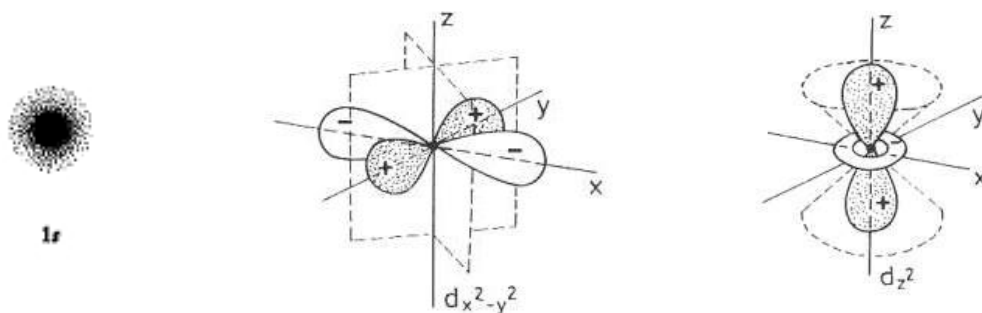
Niels Bohr opravil tuto představu dalším planetárním modelem atomu, ve kterém je centrální jádro obíháno elektrony, které se pohybují jen po povolených drahách, na kterých nevyzařují energii a mezi kterými mohou elektrony přeskakovat. Kvantování, jako reakce na fakt, že elektrický náboj nelze měnit plynule, ale existuje jeho minimální množství (elementární náboj), muselo být v tomto modelu postulováno. **Sommerfeldův** model pokládal elektrony stále za kuličky, ale na eliptických drahách (čtyři kvantová čísla, Pauliho vylučovací princip)



Obr. 5: Modely atomů a) Thomsonův, b) Rutherfordův, c) Bohrův, d) Sommerfeldův.



Obr. 6: Při srovnání pravděpodobnosti výskytu elektronu v atomu vodíku vidíme, že se Bohrov model s moderním pojetím kvantově - mechanického modelu dobře shoduje.



Obr. 7: Grafická představa v kvantově-mechanickém modelu atomu pracuje s orbitály, které jsou znázorněním pravděpodobnosti výskytu elektronu / www.ped.muni.cz/wphy/FyzV1a/index.htm, <http://artemis.osu.cz/www.odbornecasopisy.cz/imagesold/e1206641.gif> /

Studium moderního kvantově mechanického modelu atomu jde nad rámec tohoto textu, který je zaměřen na nauku o materiálech. Nicméně pro pochopení struktury atomu přijmeme při hledání polohy elektronu jako fakt, že ze Schrödingerovy rovnice lze určit hodnotu **vlnové funkce ψ** , která je sice sama o sobě neměřitelná, ale z hustoty pravděpodobnosti již lze určit pravděpodobnost nalezení elektronu v konkrétním místě. Hodnota vlnové funkce ψ se může měnit od 0 do 1 s tím, že tam kde je její hodnota nulová se elektron nemůže vyskytovat a pro atom vodíku, který má nejjednodušší sférický orbitální model s, je nulová hodnota vlnové funkce v nekonečnu. Modely prvků se složitou strukturou mají několik nulových řešení vlnové funkce. Na obrázku č. 6 můžeme vidět, že pokud porovnáme nejpravděpodobnější řešení Schrödingerovy rovnice s Bohrovým modelem atomu vodíku, jsou oba modely ve shodě.

Současný model atomu vycházející z kvantové fyziky je samozřejmě s představou částic existujících ve formě kuliček vyskytujících se na diskrétních drahách neslučitelný. Pro chápání struktury uspořádání hmoty je třeba paralelně vnímat jádro, které představuje pevnou realitu složenou ze subjaderných částic a vedle něho elektron, u kterého je otázkou zda z tohoto úhlu pohledu je částicí (neurčitá skvrna). Pro elektron nemůžeme současně určit směr pohybu, hybnost ani místo jeho výskytu (Heisenbergovy relace neurčitosti), elektron je charakterizován pravděpodobnostní funkcí. Nicméně pokud si budeme vědomi přijatých zjednodušení, kdy **orbitály** (části prostoru ve kterých se elektrony nacházejí s nějakou pravděpodobností add. řešení Schrödingerovy rovnice) nahrazují jednoduché trajektorie (orbity), duální charakter elektronů (částicový a současně vlnový), pak je Bohrov model pro potřeby nauky o materiálech dostačující.

Atom je složen z jádra tvořeného **nukleony (protony, neutrony)** a elektronového obalu. Počet *protonů a elektronů* v atomu je shodný, pokud je toto pravidlo porušeno stává se z atomu **iont** (+ *kationt*, - *aniont*). Změnou počtu neutronů v jádře (**izotopy**) se podstatné vlastnosti konkrétního uspořádání hmoty nemění, jedná se o stejný prvek. Elektrony a protony nesou opačný elektrický náboj $-1,602 \cdot 10^{-19}$ C resp. $1,602 \cdot 10^{-19}$ C, zatímco neutrony jsou bez náboje – neutrální. (Pozn. 1 C – coulomb je podle definice v SI náboj přenesený proudem jednoho ampéru za jednu sekundu – 1 ampérsekunda.)

Hmotnost protonu $1,672 \cdot 10^{-27}$ kg (nebo jinak 938,272 MeV/c) je **téměř** stejná jako hmotnost neutronu $1,648 \cdot 10^{-27}$ kg, ale hmotnost elektronu je o čtyři řády menší $9,11 \cdot 10^{-31}$ kg. Tento rozdíl hmotností opravňuje k zanedbání hmotnosti elektronu při stanovení **atomové hmotnostní jednotky (AHJ, angl. AMU) - u**, která slouží k určování hmotností atomů. AHJ je stanovena jako 1/12 hmotnosti izotopu uhlíku ${}^6\text{C}^{12}$, $u = 1,66054 \cdot 10^{-27}$ kg.

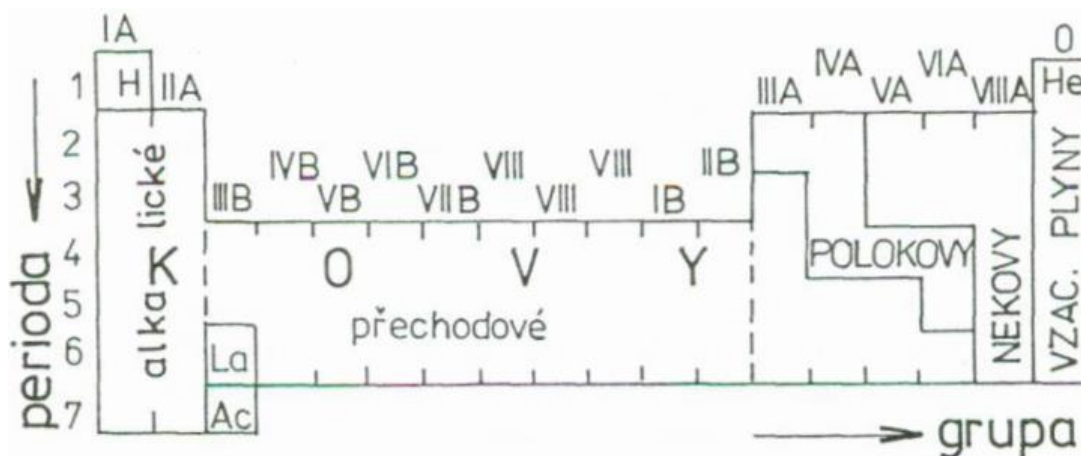
Relativní atomová hmotnost A_r je dána poměrem m_a klidové hmotnosti atomu k u ($A_r = m_a/u$). Obě veličiny reprezentují hmotnost vyjádřenou v kg, proto je relativní atomová hmotnost bezrozměrná veličina. Z uvedeného vztahu je vidět, že A_r používáme pro stanovení hmotnosti atomů. (Pozn. Číselně rel. atomová hmotnost odpovídá molární hmotnosti v g.) Relativní atomová hmotnost atomu izotopu uhlíku ${}^6\text{C}^{12}$ je přesně 12. Všimněme si, že pokud mluvíme o relativní atomové hmotnosti uhlíku (všech izotopů) odpovídá hodnotě 12,0107. Rozdíl v obou hodnotách je dán existencí dalšího stabilního izotopu uhlíku (asi 1,1 % z celkového množství uhlíku), který má v jádru 13 nukleonů tedy i vyšší hodnotu $A_r = 13,038$. Důsledkem je vyšší průměrná hodnota relativní atomové hmotnosti.

Stanovíme-li hmotnost nukleonu prostým součtem hmotností protonů a neutronů vyděleným jejich počtem v jádře, dostaneme odlišnou (větší) hodnotu než, když vydělíme hmotnost jádra počtem nukleonů. Tento deficit jde na vrub **vazebné energie jádra**.

Rozměry atomů se pohybují v řádu 10^{-10} m (Å - angströmy), jádra atomů jsou výrazně menší, pohybují se v řádu 10^{-15} m (fm - femtometry). Víme, že a elektron může být v rámci svého atomu prakticky kdekoli v okolí jádra (orbital elektronu H je koule). Když omezíme objem atomu na prostor, ve kterém se elektron nachází s 90% pravděpodobností (po 10% času může být jinde), pak průměr jádra je 1/10 000 průměru atomu. Na základě uvedeného si můžeme představit atom vodíku jako broskvi (jádro) o průměru 10 cm, která je obletována octomilkou (elektronem) ve vzdálenosti 10 km. Toto přiblížení ukazuje na překvapivý objem volného prostoru uvnitř hmoty (99.999 %), která se nám přesto jeví jako kompaktní a na druhou stranu, když ještě přihlídneme k hmotnostem nukleonů a elektronů, vidíme obrovskou koncentraci hmoty v jádře atomu s hustotou 10^{12} g.cm⁻³. Kubický centimetr objemu vyplněný jádry atomů by vážil 10 000 000 tun. Pro zajímavost uveďme, že celkový počet protonů ve vesmíru je odhadován na 10^{80} (G.H.Hardy).

Periodická tabulka chemických prvků (Mendělejevova tabulka)

Přesná identifikace chemických prvků se provádí pomocí **protonového Z**, **neutronového N** a **nukleonového čísla A**, platí $A = Z + N$. V dostupné literatuře můžeme najít nejasnosti, protože označení N je mimo označení pro neutronové číslo někdy používáno i pro nukleonové číslo. Navíc je obvyklé psát nukleonové číslo na pozici horního indexu a protonové číslo na pozici dolního indexu obě před obecné označení prvku (X), ale vzhledem k používání textového editoru, který tuto variantu uspořádání dvou indexů nad sebou neumožňuje, dochází často k posunu nukleonového čísla na pozici horního indexu za označení prvku – ${}^Z\text{X}^A$ (viz. výše ${}^6\text{C}^{12}$).



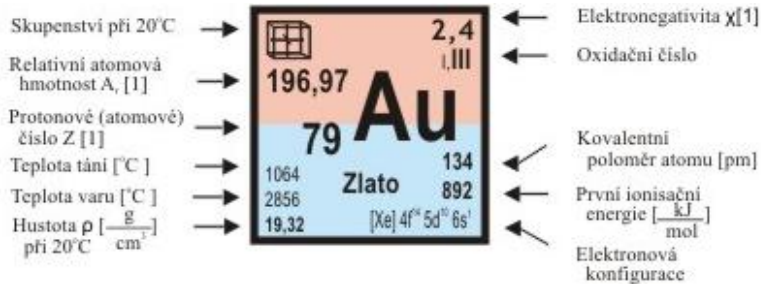
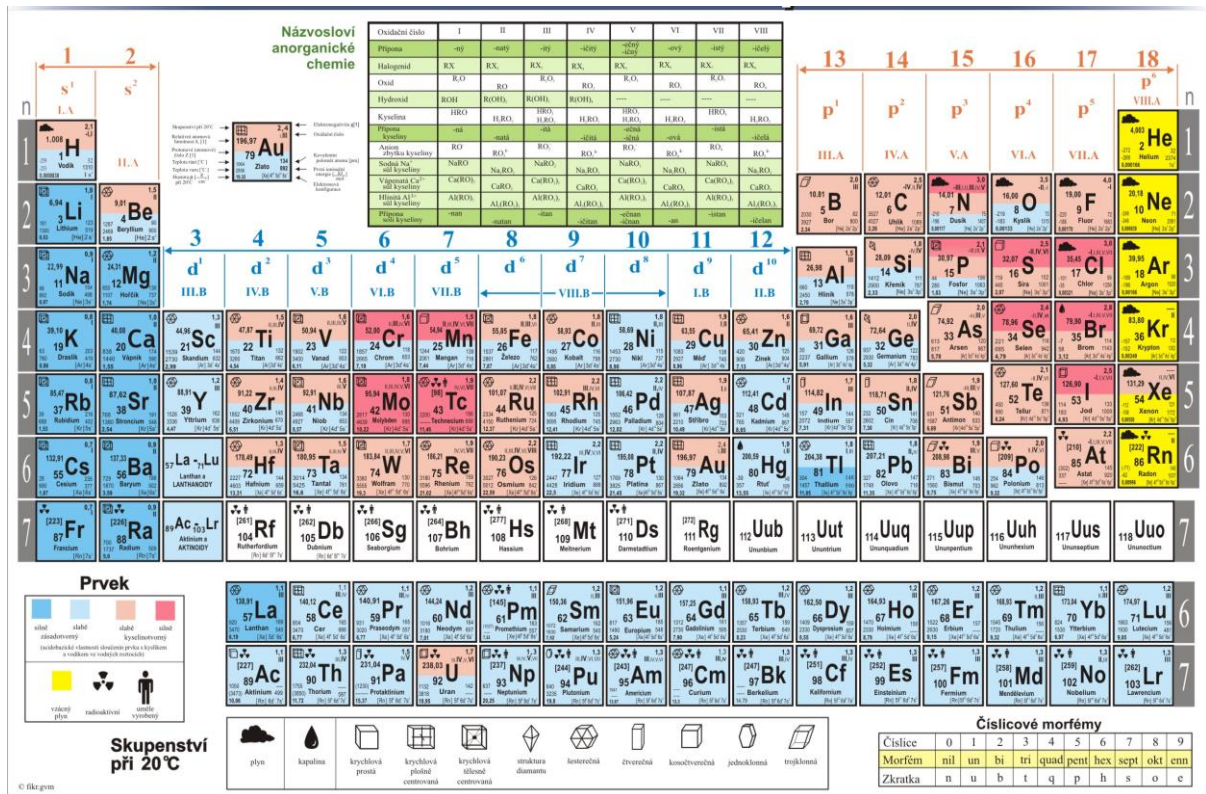
Obr. 8 Schéma uspořádání chemické tabulky prvků

Do standardní tabulky jsou prvky uspořádány v 7 řádcích (*periodách*) a 18 sloupcích (*skupinách, grupách*). Hlavní skupiny 1,2 a 13 až 18 obsahují základní nepřechodné prvky. Vedlejší skupiny 3 až 12 obsahují vedlejší přechodné prvky. Lathanoidy a aktinoidy jsou vyčleněny do vlastních řádků pod tabulkou. Poslední verze tabulky obsahuje 118 prvků, ze kterých se na Zemi vyskytuje 94, ostatní jsou nestabilní. Do začátku 18.století bylo známo 12 prvků. Periodická tabulka prvků je grafická forma *periodického zákona* – „Fyzikální a chemické vlastnosti prvků jsou periodickou funkcí jejich protonového čísla (Dimitrij Ivanovič Mendělejev 1869)“. Prvky jsou v tabulce seřazeny za sebou podle počtu protonů v jádře (podle hmotnosti), protože protonové číslo je pro každý prvek specifické a pro vlastnosti prvku určující.

1 proton H, 2 protony He, 3 protony Li , 6 protonů C etc.

Přidáním dalšího protonu do jádra uhlíku by vznikl atom dusíku, naopak odebráním bor.

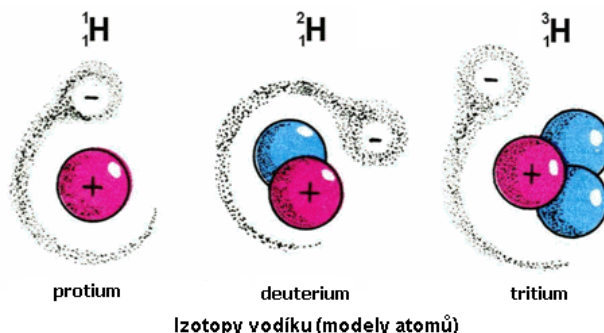
Ve skupinách pod sebou jsou uspořádány prvky se stejným počtem valenčních elektronů (mají proto podobné vlastnosti). Valenční sféra je vnější slupkou elektronového obalu. Zcela vlevo v I.skupině jsou spolu s vodíkem alkalické kovy – prvky s jedním elektronem ve valenční sféře. Valenční vrstvy jsou typu s,p,d nebo f, navzájem se liší počtem míst pro elektrony. Zcela vpravo jsou ve II.skupině inertní plyny s osmi elektrony ve valenční sféře a tudíž velmi malou chemickou aktivitou. Významná je VII.skupina se sedmi valenčními elektrony – velmi aktivní halogenidy. V rámci periody se postupně směrem zleva doprava zvětšuje počet elektronů v elektronové slupce prvků. Číslo periody informuje o tom v jaké vrstvě, počítáno od jádra, má prvek valenční elektrony



© JAROSLAV FIKR - Gymnázium Velké Meziříčí, Sokolovská 27, fikr@gym

Obr. 9: Periodická tabulka prvků

Již bylo uvedeno, že v neutrálním izotopu každého prvku je stejný počet protonů, neutronů a elektronů. Počet neutronů charakterizuje různé izotopy téhož prvku.



Obr. 10: Izotopy vodíku se odlišují počtem neutronů v jádře
http://home.tiscali.cz/chemie/images/izotopy_vodiku.gif

Změnou počtu elektronů ve valenční sféře obalu atomů dochází ke změně elektrického chování. Původně neutrální atom se mění na *elektricky nabitý ion*.

Atomy jsou stabilní pokud mají zaplněnou a nebo prázdnou valenční sféru. Uspořádání elektronů – elektronová konfigurace je klíč k chemii a existenci vazeb mezi atomy různých nebo stejných prvků, stejně jako počet protonů v jádře, má zásadní vliv na jeho vlastnosti.

Z hlediska materiálové nauky je důležitou vlastností kovů (obecně všech prvků) *elektronegativita* – schopnost přitahovat v molekule sdílené vazebné elektrony – tvořit vazbu pomocí elektronu jiného atomu. V jednotlivých periodách narůstá směrem doprava, ve skupinách roste směrem nahoru. Z již zmíněných halogenidů má tedy nejvyšší elektronegativitu fluor. Opačnou vlastností je *elektropozitivita*. Hodnota elektropozitivity se v tabulce u prvků mění s opačnou tendencí, nejvyšší elektropozitivitu vykazuje cesium. Prvky nacházející se ve středu tabulky mají nízkou elektronegativitu i elektropozitivitu. Stejně jako elektronegativita se v periodické tabulce mění ionizační energie – energie nutná k odštěpení valenčního elektronu. S pojmem elektronegativita úzce souvisí elektronová afinita.

Elektronovou afinitou – rozumíme energii, která je uvolněna doplněním elektronu do neúplně podslupky valenční sféry dosud neutrálního atomu (pro vznik záporného iontu – anionu). Elektronegativní prvky mají vysokou afinitu – vysokou schopnost tvořit záporné aniony. Prvky s nízkou elektronovou afinitou snadno odštěpují elektrony – snadněji tvoří kladné ionty. Elektronová afinita postupně roste v periodách směrem zleva doprava a ve skupinách klesá směrem shora dolů.

Ionizační energie (potenciál) – energie nutná k odtržení elektronu z valenční sféry neutrálního atomu při vzniku kationu (ionizace je proces směřující k vytvoření iontu odtržením elektronu). Vidíme souvislost ionizační energie s elektronovou afinitou. Pokud je ve valenční sféře pouze jeden elektron, vyžaduje jeho odtržení málo energie, je zřejmé, že z velikosti ionizační energie můžeme odhadnout počet elektronů ve valenční sféře atomů konkrétního prvku. Ionizační energie roste v periodě s rostoucím počtem protonů a klesá ve skupině směrem dolů (toto pravidlo má řadu výjimek, jejichž důvody jsou různé). Pro studium vlastností materiálů je podstatné, že vazebné síly, které váží elektrony k jádru, jsou u kovů menší než u materiálů nekovových. Jinak řečeno hodnoty ionizačních energií kovových materiálů jsou nízké, a proto snadno tvoří kationy.

Dále můžeme podle umístění prvku odhadovat rozměr atomů. Velikost atomů se v periodě zvětšuje směrem zprava doleva a ve skupině směrem dolů. V periodě se projevuje velikost vazební síly (malá síla – velký průměr atomu), v rámci skupin narůstá směrem dolů počet slupek elektronového obalu a s tím se zvětšuje průměr atomů prvků.

Další z technického pohledu důležitou tendencí vysledovatelnou v periodické tabulce je, že s rostoucím počtem protonů (zleva doprava) v periodě a zdola nahoru roste teplota varu a tání chemických prvků.

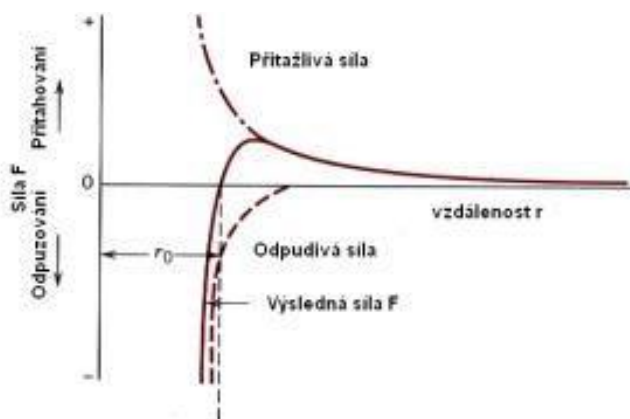
Kovalentní poloměr je polovina průměru atomu vázaného pomocí kovalentní vazby. Teoreticky odpovídá dvojnásobek kovalentního poloměru délce kovalentní vazby. Prakticky je problém složitější, protože kovalentní vazba má několik typů a je významně ovlivněna okolím, uvádí se v tabulce průměrná délka. Kovalentní poloměr se určuje pomocí rentgenové strukturní analýzy, případně na základě difrakce neutronů.

3. Vazby v atomech a molekulách

Obecnou vlastností pevných látek je jejich soudržnost - molekuly, krystaly, atomy a ionty „drží pohromadě“. Je evidentní, že tuto skutečnost logicky vysvětluje působení přitažlivých sil. Při hledání původu přitažlivých sil vyloučíme gravitaci a magnetizmus, protože gravitační působení mezi částicemi je nepatrné a ani magnetická síla není dostatečná k vytvoření pevné vazby. Přitažlivé síly na úrovni eV mezi elektricky nabitými částicemi mohou vytvářet trvalé vzájemné vazby (1eV – energie dodaná elektronu při průchodu polem o napětí 1V). Působení elektrostatische energie mezi částicemi s kladným a záporným nábojem poskytuje konzistentní vysvětlení vzniku vazeb.

Následující text se zabývá vazbami mezi atomy, které tvoří molekuly a krystaly, zmíníme také vazby mezimolekulární. (Molekula – stabilní uspořádání minimálně dvou atomů. Stabilní v použitém významu slova znamená, že pro disociaci molekuly je třeba dodat energii. *Krystal* – pevná látka vytvářející bodovou difrakci.) Vazebné mechanismy jsou pro první dva případy velmi podobné, principy fungování budou vysvětleny na příkladu molekulárních sil.

Na základě obecných zkušeností předpokládáme, že vedle sil přitažlivých zároveň existuje skupina sil odpuzivých. Vzhledem k tomu, že okolo sebe nacházíme pevné látky, můžeme předpokládat, že přitažlivé síly jsou dominantní. Předpoklad dominance přitažlivých sil platí ovšem pro síly působící na dlouhé vzdálenosti (viz. r_0 na obrázku 11), při působení na krátké vzdálenosti, kdy dojde k úplnému překrytí valenčních elektronových drah atomů, je situace opačná. Pro dvojici nabitých částic lze tedy najít vzdálenost r_0 (R_0), ve které je jejich působení v rovnováze. Na obr. 11 vidíme, že výslednice sil je v bodě r_0 nulová. Vzdálenost atomů je v řádu angströmů a je to vzdálenost, ve které by se jejich poloha stabilizovala, pokud by byly jinak izolované. Atomy nacházející se v této vzdálenosti tedy naplňují **podmínku rovnováhy**.



Obr. 11: Silové působení mezi dvěma atomy <http://www.ped.muni.cz/wphy/FyzVla/index.htm>

Energetickou podmínkou pro existenci meziatomové vazby je **podmínka stability**. Jádra atomů vázaných stabilní vazbou musí mít hodnotu vzájemné potenciální energie minimální. Pro existenci vazby je postačující dosažení lokálního energetického minima. Systém částic směřuje vždy k uspořádání s minimální energií – atomy vytvoří molekuly nebo krystaly za předpoklad, že se celková energie soustavy sníží.

Pokud je výslednice sil mezi atomy gradientem jejich vzájemné polohové energie U , platí

$$U = U_A + U_R,$$

kde U_A je energie přitažlivá a U_R je energie odpuzivá. Minimální hodnota této potenciální energie odpovídá energii vazby mezi atomy, to znamená, že k uvolnění částic musíme vynaložit práci této energii odpovídající – **disociační** resp. **vazebnou energii**. Velikost disociační energie lze použít jako měřítko pevnosti vazby. Pro každý materiál je hodnota vazebné energie specifická a pohybuje se v desítkách až stovkách kJ mol^{-1} , což na jeden atom představuje desetiny až jednotky eV.

Vazby mezi částicemi můžeme klasifikovat na základě odlišných přístupů a v literatuře lze najít různé způsoby třídění vazeb, které se navzájem nemusí shodovat, protože autoři kladli důraz na jimi preferované fyzikální nebo chemické vlastnosti, které byly základem pro jejich variantu kategorizace vazeb. V této kapitole si povšimneme několika způsobů klasifikace vazeb v molekulách a pevných látkách a tyto vazby budeme stručně charakterizovat

Vazby lze například dělit na primární nebo sekundární, podle toho zda jsou způsobeny přímou interakcí nabitých částic (primární) nebo jiným typem silového působení (sekundární),

PRIMÁRNÍ VAZBY

- kovalentní
- iontová
- kovová (elektronová)

SEKUNDÁRNÍ VAZBY

- vazby založené na působení Van der Waalsových sil
- vodíkové můstky

Podle způsobu vzájemné interakce vázaných atomů dělíme jejich vazby do tří základních typových skupin – v. **iontová**, v. **kovalentní**, v. **kovová**. Tyto vazby společně označujeme jako **silné vazby** nebo jako **vazby primární**. Obecně platí, že vyjmenované příklady vazeb, tak jak je následně vysvětlíme v jejich elementárních formách, nejsou příliš časté. Realita je taková, že se vazby v různých materiálech překrývají a doplňují navzájem. To znamená, že většina vazeb je nějakou kombinací prezentovaných typových vazeb.

3.1 Iontová vazba – vzniká na základě působení elektrostatických sil, je charakteristická pro atomy prvků, které si mohou vyměnit jen malý počet elektronů. Iontová vazba spojuje atomy s velkým rozdílem v počtu valenčních elektronů. Vzhledem k relativní elektronegativitě, elektronové afinitě nebo ionizační energii (viz. předcházející kapitola) může dojít ke vzniku iontové vazby v případě, že jeden z atomů vznikající vazby má tyto parametry vysoké (tendence tvořit anion) Cl a druhý atom relativně nízké (tendence k tvorbě kationu) Na. Vazba vzniká tak, že přiblížením obou atomů na vzdálenost řádově 10^{-10} m, dojde působením elektrostatických sil k situaci, ve které atom s vysokou elektronegativitou přitáhne elektron s nízkou elektronegativitou na svoji stranu. Takto vzniklé ionty se pak váží elektrostaticky bez vzájemného sdílení elektronů, vazba je relativně pevná.



Obr. 12: Příklad iontové vazby – molekula NaCl

Nejstabilnější variantou uspořádání elektronů jsou uzavřené podslupky, které můžeme najít u grupy vzácných plynů (proto jsou téměř inertní). Grupy prvků s minimem elektronů vně uzavřených podslupek (alkalické kovy Na, ...) mohou dosáhnout stabilního uspořádání tím, že se těchto elektronů zbaví. Proto dochází k iontové vazbě mezi atomy prvků z krajních skupiny periodické tabulky.

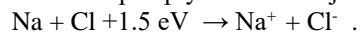
Výše uvedená pravidla můžeme shrnout do tří bodů, jejichž naplnění upřednostní vznik iontové vazby před vazbou kovalentní:

- vzniklé ionty musí dosáhnout stabilního uspořádání odpovídající kulově symetrické valenční sféře,
- pro oba ionty je typický nízký elektrický náboj,
- kation vznikne z atomu o velkém objemu a anion z atomu o malém objemu.

Příkladem vzniku molekuly s tímto typem vazby může být dvouatomová molekula chloridu sodného:

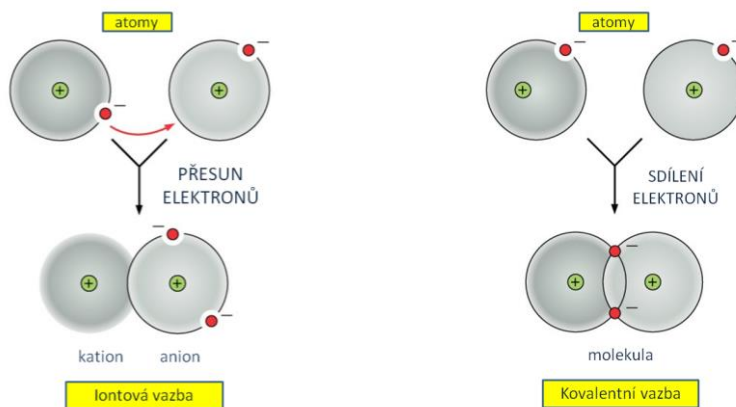
- vznik kationu $\text{Na} + 5,1 \text{ eV} \rightarrow \text{Na}^+ + \text{e}^-$
- vznik anionu $\text{Cl} + \text{e}^- \rightarrow \text{Cl}^- + 3,6 \text{ eV}$.

Energie potřebná ke vzniku iontů pak plyne z následujícího:



Iontová vazba je založena na přitažlivém působení elektromagnetické síly náboje, která je všesměrová, takže ani iontová vazba není prostorově orientovaným (lokalizovaným) typem vazby.

Elektrony uzavřených podslupek odstiňují působení kladného náboje protonů v jádře a tím snižují vazební sílu poutající okrajové elektrony valenční sféry. Proto je u atomů se složitou stavbou elektronového obalu elektrostatická síla protonů působící na valenční elektrony více oslabována a k uvolnění elektronu je pak třeba menší energie. Iontová vazba není obvykle základem pro tvorbu molekul. Individuální molekuly vodíku, které jsou složeny ze dvou atomů vodíku tvořící vodíkový plyn, jsou schopné samostatné existence ve formě částic, které lze pozorovat. Kamenná sůl je uspořádána do krystalů s periodickou strukturou krystalové mřížky na základě iontové vazby a to nikoli ze vzájemně vázaných dvojic iontů Na^+ a Cl^- , které by ve struktuře krystalu byly pozorovatelné jako molekula. Nicméně mezi sousedícími ionty v krystalu existuje interakce, která je také variantou chemické vazby.



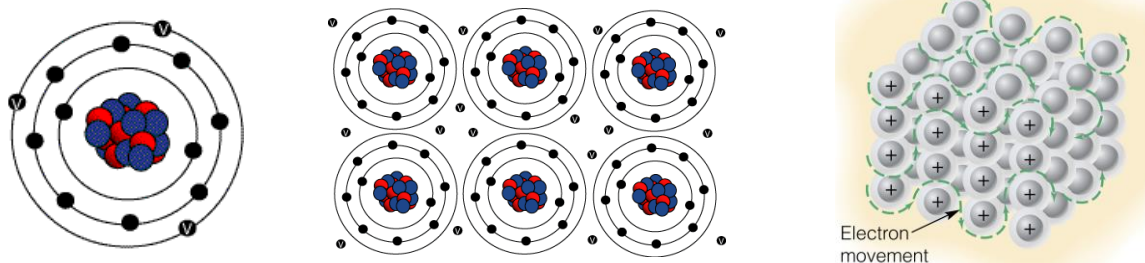
Obr. 13: Srovnání schémat iontové a kovalentní vazby

3.2 Kovalentní vazba – obvykle, pokud mluví o vazbě mezi atomy chemik, myslí tím vazbu kovalentní. Kovalentní vazba je zřetelně lokalizována na sdílené elektrony, které se s nejvyšší pravděpodobností (po nejdelší čas) nacházejí na spojnici jader vázaných atomů. Ke sdílení jednoho nebo více elektronových páru může dojít při vhodném překrytí elektronových obalů vázaných atomů. Kovalentní vazba je potom realizována nepárovými elektrony ve valenčních sférách, které společně vytvoří sdílený elektronový pár. Pole vytvořená elektrostatickým nábojem okolo jader atomů fungují podle představy vybudované na základě klasické fyziky jako nepřekročitelné potenciálové bariéry, za kterými již není výskyt elektronů možný. Elektron by tak nemohl přejít do elektronového obalu jiného atomu. Oproti tomu kvantová fyzika nachází pravděpodobnost přechodu elektronu mimo tuto bariéru různou od nuly s tím, že pravděpodobnost návratu elektronu na původní pozici je stejná. Tento výsledek připouští existenci vazby pomocí sdílení elektronů. Vypočtená hodnota pravděpodobnost průchodu elektronu potenciální bariérou okolo jádra je silně závislá na vzdálenosti sousedního jádra. V případě, že vzdálenost jader atomů vznikající vazby je na úrovni 10^{-10} m, překonává tuto bariéru elektron každých 10^{-15} s. Toto je překvapivě vysoká pravděpodobnost výskytu elektronu v oblasti umožňující vznik kovalentní vazby. Když bude vzdálenost jader desetkrát větší, přejde elektron potenciálovou bariéru jen jednou za vteřinu, pak už je pravděpodobnost vzniku vazby prakticky nulová.

Učebnicovým příkladem čisté kovalentní vazby je molekula vodíku. V periodické tabulce najdeme vodík na pozici prvního tedy nejjednoduššího prvku. V jádře atomu vodíku je jeden proton, jehož náboj v neutrálním atomu vyrovnává jeden elektron. V předešlé kapitole byla zmíněna existence dalších izotopů vodíku, jejichž jádra již obsahují neutrony (deuterium, tritium). Vodíková molekula vznikne sdílením nepárových elektronů obou atomů s tím, že vazba je orientovaná do středu spojnice jader atomů. Molekula má vyšší stabilitu než volný atom vodíku, protože vzájemným sdílením elektronů si oba atomy zaplnily valenční vrstvu.

<http://www.zschemie.euweb.cz/vodik/vodik4.html>

3.3 Kovová vazba – vzniká mezi atomy prvků s malým, ale dostatečným počtem valenčních elektronů, které jsou jen slabě vázány k jádru atomu. Přiblížením jader atomů na vzdálenost v řádu 10^{-10} m může dojít ke sdílení valenčních elektronů. Protože se jedná o vazbu se shodnými nebo velmi podobnými atomy, je mezi nimi jen malý rozdíl v elektronegativitách, což vylučuje vznik iontové vazby (krádež elektronu). Elektrony nejsou poutány určitou lokalizací, ale množství relativně volných (itinerantních) elektronů vytváří **elektronový plyn** (obrázek), kovová vazba není směrově orientovaná.



Obr. 14: Kovová vazba

Právě pohyblivost elektronů v kovové vazbě způsobuje dobrou tepelnou a elektrickou vodivost nebo vysokou odrazivost povrchů (lesk), což souvisí s tím, že elektrony nejsou vázány na diskretních hladinách se širokými zakázanými pásmy a tím mohou absorbovat (následně vyzářit) energii v téměř spojitém spektru vlnových délek.

Z pohledu materiálového inženýra je podstatný význam existence relativně volných elektronů pro plastické chování kovů.

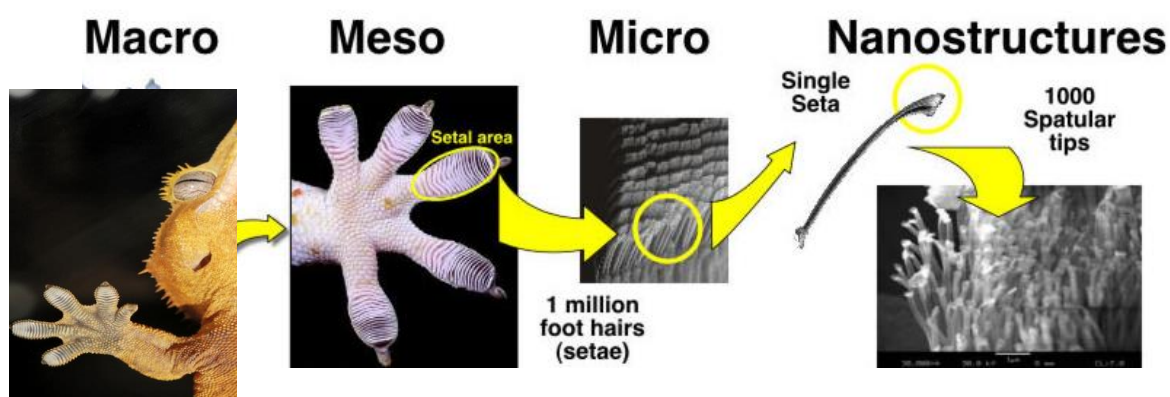
Pro využití předcházejících informací v problematice materiálové nauky je užitečné vědět, že uvedené typy vazeb jsou charakteristické pro jiné odlišné druhy materiálů a to:

- iontová vazba pro nekovy (izolanty) a iontové krystaly,
- kovalentní vazba pro polokovy (polovodiče) a kovalentní krystaly,
- kovová vazba pro kovy (vodivé materiály) a kovové materiály.

3.4 Silné a slabé vazby

Předcházející tři **typy primárních** vazeb můžeme jinak označit jako **silné vazby**, protože jsou odvozeny od silných vazebních sil. Nyní zmíníme dva typy sil, které jsou příčinou vzniku **vazeb slabých (Van der Waalsovy, vodíkové můstky)**, v jiném kontextu označovány jako **vazby sekundární**.

Van der Waalsovy síly jsou sice slabé, v řádu desetin eV na atom, ale existují ve všech látkách a to, jak na úrovni atomů, tak mezi atomy. Ve většině případů jsou V.d.W. síly překryty silami způsobujícími silné vazby, nicméně jejich působení je zřetelné například u prvků ze skupiny vzácných plynů. Existence kapalného He je vysvětlena právě těmito silami.



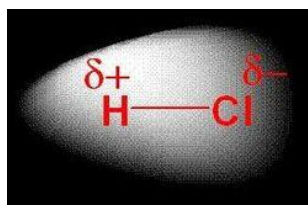
Obr. 15: Gekon se udrží na svislém skle díky působení Van der Waalsovy síly.

V.d.W. síly také spojují molekuly organických látek jako je například parafin do *molekulových krystalů*. Podstatou těchto sil je vzájemné působení elektrostatických sil mezi dipóly (atomy, molekuly) se stejně velkým, ale opačným nábojem na protilehlých koncích.

V.d.W. jsou buď indukované anebo stálé, lze je podrobně dělit do několika skupin, v tomto textu se budeme zabývat třemi kategoriemi podle způsobu, kterým je tvořen *dipól*.

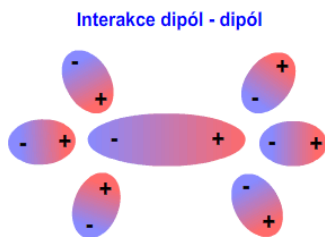
Disperzní V.d.W síly jsou způsobeny vibračním pohybem elektronů okolo jejich rovnovážné polohy. Vlastní atomy mají elektrony rozmístěné symetricky a jsou proto elektricky neutrální, ale vychylováním elektronů z neutrální polohy je symetrie narušována a dochází k jejich polarizaci. V případě kdy se atomy přitahují, je celková energie systému menší a tím je naplněna jedna z podmínek pro vznik vazby. Pokud je v kontaktu velké množství atomů, jejichž krátkodobě vznikající dipóly se vzájemně ovlivňují a tím orientují, může dojít k synchronizaci dipólů a vzniku vazby. Energie vazby klesá se vzdáleností s koeficientem $1/r^6$.

Indukované V.d.W. síly jsou způsobeny dipóly, které existují přirozeně v polárních molekulách. Polární molekula indukuje polarizaci v jindy neutrální molekule, čím je vytvořen předpoklad pro vznik vazby. Příkladem může být molekula HCl, ve které vlastní molekula vzniká polárním typem kovalentní vazby na základě významného rozdílu elektronegativit prvků (viz. dále). Silové působení se mění s faktorem $1/r^6$.



Obr.16: Polární molekula HCl

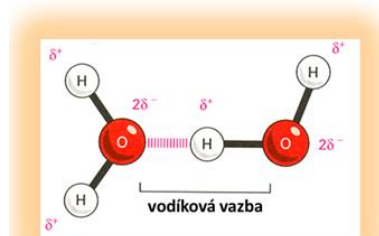
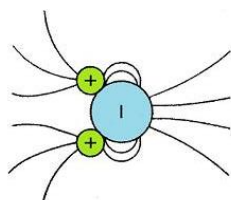
V.d.W. síly mezi permanentními dipóly vznikají mezi permanentně polarizovanou molekulou a dalším přirozeným dipólem. V polárním rozpouštědle je rozpouštěna jiná polární látka, navázaným dipólem je buď jiná přirozeně polarizovaná molekula, nebo atom, případně iont. Tato síla se mění v závislosti vzdálenosti podle $1/r^3$ a je v této kategorii sil největší.



Obr.17: Schéma vazby mezi permanentními dipóly. <http://chemvazba.moxo.cz/Lekce/lekce9.html>

Nejsilnější vazbou způsobenou slabou silou je **vodíková vazba – vodíkový můstek**. Tato vazba vzniká na základě reakce elektronegativních prvků s vodíkem. Atom kyslíku, dusíku nebo fluoru přitáhne do valenční sféry elektron z obalu atomu vodíku, čímž vznikne vodíkový kation, který je schopen vazby s jiným elektronegativním atomem. Na základě všeobecných znalostí by se mohlo zdát, že vodíkové můstky mají význam pro organickou chemii, ale nelze přehlédnout vliv této vazby na teploty tání a varu některých pevných látek.

Vodíkové můstky mohou být základem pro vznik prostorových vazeb. Například prostorově zasítovaná vazba molekul vody realizovaná pomocí vodíku, který váže další dvě molekuly vody přes jejich kyslík, je řešení umožňující existenci kapalné vody. Molekula vody má polární charakter, to znamená, že jeden její okraj má částečný záporný náboj δ^- (kyslík) a část s nedostatkem elektronů (vodík) má částečný náboj kladný δ^+ . Elektronegativní kyslíkový atom (elektronegativita 3,5) silně přitahuje vodíkový elektron (elektronegativita 2,1) další molekuly vody za vzniku dipólu. Vodíková vazba je příčinou abnormálních vlastností vody.



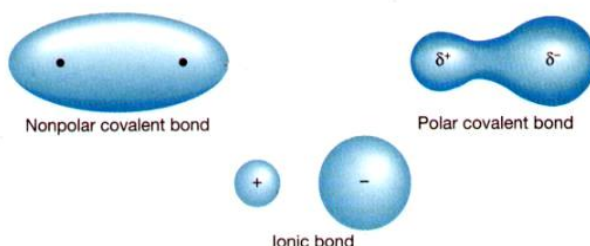
Obr. 18: Vodíkový můstek

3.5 Klasifikace vazeb podle polaritavy vazeb

- **vazba homopolární – nepolární** je kovalentní vazba **homonukleární** (opak vazby **heteronukleární** viz. poznámka). Klasickým příkladem je dvouatomová molekula kyslíku, dva vázané atomy mají shodné vlastnosti ani jeden z nich není v rámci molekuly nositelem **parciálního elektrostatického náboje**.

Parciální náboj vzniká v situaci, kdy vazební elektron nalezneme s větší pravděpodobností v pozici bližší k jednomu z jader. Situaci si můžeme přiblížit tak, že atomu, kterému je elektron blíže, náleží větší část náboje, rozdělená právě v poměru vzdáleností. Tyto nestejně části náboje náležející k celkovým nábojům vázaných atomů se podílejí na středních hodnotách jejich celkového náboje.

- **vazba semipolární – polarizovaná** v tomto případě jsou polarizované oba atomy, mají stejně velký, ale opačný parciální náboj.
- **vazba heteropolární – silně polarizovaná** – iontová - elektrovalentní, elektron přejde do valenční sféry druhého atomu, oba vázané atomy se stávají ionty.



Obr. 19: Schématické znázornění vazby homopolární, semipolární a heteropolární

(pozn. Heteronukleární molekula spojující atomy prvků s rozdílnou elektronegativitou, ve které nemají elektrony stejnou pravděpodobnost výskytu u obou z jader je realizována vazbou polárně kovalentní. Vazebné elektrony upřednostňují atom s vyšší elektronovou afinitou. Příkladem může být nejjednodušší heteronukleární molekula LiH s jedním vazebným elektronovým párem. Prvky mají s konfiguraci, takže orbitály jsou sférické. V této molekule má vodík větší elektronovou afinitu a ionizační energii než lithium, je tedy v souladu s očekáváním, že vazebné elektrony budou s vyšší pravděpodobností nalezeny blíže atomu vodíku. Molekula bude mít dipólový moment a náboj na straně vodíku bude čtyřikrát větší než na straně lithia. Vazba je asymetrická částečně kovalentní a částečně iontová.)

Lokalizace vazeb – komplexní náhled na teorii vazeb musí nutně zahrnovat názor na prostorovou lokalizaci vazeb. V zásadě jsou dva možné přístupy.

Sto let starý **model lokalizovaných vazeb** podle Lewise a Kosela (1916) vnímá vazby jako záležitost sousedních atomů, kde vazba není ovlivňována okolní látkou. Tento model dobře vysvětluje vazby v anorganické chemii vyjma vazeb v kovových materiálech a nevyhovuje vazbám organických látek.

Model **delokalizovaných vazeb** je mnohem náročnější, ale ob stojí při aplikaci na vazby ve všech látkách, tento model nahlíží molekuly jako celek.

4. Vazebné síly v pevných látkách

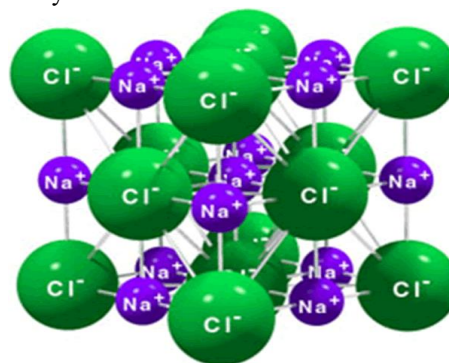
Pevné látky jsou vystavěny z molekul, atomů a iontů, jejich soudržnost vysvětlujeme existencí přitažlivých sil mezi elektricky nabitými částicemi, podobně jako je tomu u sil mezi atomy vytvářejícími molekuly. Tyto síly jsou schopny působit na různou vzdálenost.

- Dalekodosahové síly vytvářejí krystaly.

- Krátkodosahové síly jsou základem amorfních tuhých látek, které si můžeme představit jako kapaliny s vysokou viskozitou, vzniklé jejich přechlazením. Vnitřní uspořádání amorfních tuhých látek je podobné kapalinám, podobá se v podstatě i uspořádání plynů, protože zahříváním mění svůj charakter, až při jejich odpaření neshledáme rozdíl. Existují kapaliny, které vykazují dvojlomné vlastnosti podobně jako anizotropní krystaly. Na druhou stranu hustota kapalin je obvykle podobná pevným látkám.

V krystalických pevných látkách existují síly způsobující iontovou vazbu, která vzniká na podobném principu jako molekulární iontová vazba. Jedná se o vazbu mezi elektronegativním a elektropozitivním prvkem. Platí vše, co bylo výše konstatováno o elektromagnetickém silovém působení v molekulárních vazbách.

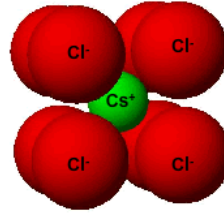
4.1 Iontové krystaly jsou dvojího typu, buď je tvoří prvky snadno odštěpující elektron anebo prvky elektron snad přijímající. Příkladem z první skupiny je Na. V krystalech kuchyňské soli jsou atomy uspořádány tak, že kationy sodíku vyplňují volné prostory v objemu krychle, jejíž rohy a středy povrchových ploch obsadily větší atomy chlóru. Takto vzniklá struktura se nazývá kubická plošně centrovaná mřížka (KFC), pro kterou je typická různá velikost iontů. Jsou-li ionty tvořící krystal velikostí vzájemně podobné, vytváří kationy a aniony vlastní krychle s osmi ionty v rozích krychle tak, že je iont s opačným nábojem umístěn v rohové pozici ve vlastní krychli současně vložen do středu krychle opačně nabitých iontů.



Obr. 20: Model krystalové kubické plošně centrované mřížky NaCl

<http://chemvazba.moxo.cz/Lekce/lekce2.html>

V krystalové mřížce nemůžeme mluvit jednoznačně o dvojicích iontů vzájemně spojených vazbou, tato vazba by byla jednoznačná až po roztavení a odpaření látky tvořící krystal. Ve struktuře krystalu je každý ion obklopen několika opačně nabitými ionty a tak můžeme iontový krystal považovat za určitou formu makromolekuly.

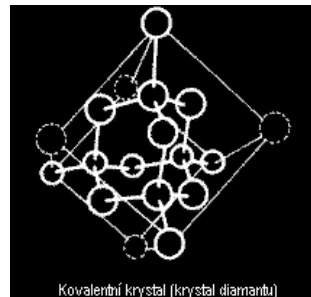
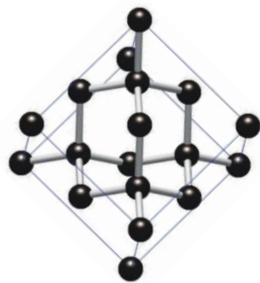


Obr. 21: Kubická prostorově centrovaná mřížka CsCl

Příkladem prvků druhé skupiny prvků, které elektrony snadno váží je Cs. Cesium tvoří iontové krystaly chloridu cesného uspořádané do kubické prostorové mřížky. V každé krychli tvořené aniony chloru najdeme v centrální poloze rohový kation z krychlového uspořádání cesia a opačně. Takto vzniklý typ uspořádání krystalu se jinak také nazývá kubická tělesově středěná mřížka (KBC). Podrobně bude téma mřížek krystalů vysvětleno dále. Energie vazby iontového krystalu odpovídá energii, kterou by všechny neutrální atomy uvolnily při jeho vzniku. Tato energie, ale není shodná s energií odpovídajícího počtu molekul vzniklých iontovou vazbou z iontů stejných prvků. Důvodem je reakce iontů v krystalových mřížkách se všemi sousedními ionty. Ve zmíněných typech mřížek je to 6 respektive 8 iontů s opačným nábojem. Celkovou energii vazby v iontových krystalech navíc ovlivňují kmity iontů okolo jejich rovnovážných poloh v uzlových pozicích mřížky, které ji snižují. Zvýšení celkové energie vazby krystalové mřížky způsobují přitažlivé Van der Waalovy síly mezi sousedními ionty.

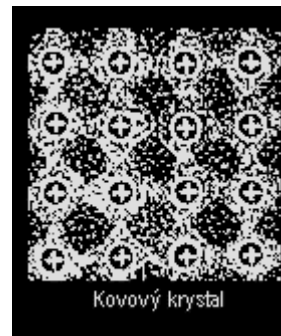
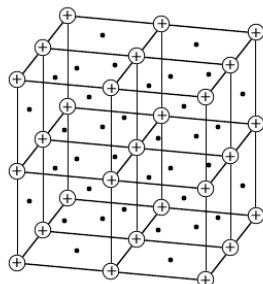
Iontové krystaly jsou poměrně tvrdé, křehké, mají vysokou teplotu tání a elektrický proud vedou až při vysokých teplotách.

4.2 Kovalentní krystaly (valenční kr.) jsou spojeny silami, které jsou paralelní k silám kovalentní vazby v atomech a molekulách. Kovalentní vazba je velmi pevná díky sdíleným elektronovým pářím, ale v pevných látkách není příliš častá. Typickou ukázkou je krystalová mřížka diamantu, kde je každý uhlíkový atom tvoří čtyři kovalentní vazby. Všechny kovalentní krystaly (Si, Ge, SiC, ...) se vyznačují vysokou tvrdostí, vysokou teplotou a chemickou odolností, většinou nevedou elektrický proud. Velmi často se v krystalech vyskytují vazby, které jsou kombinací kovalentní a iontové vazby.



Obr. 22: Schématické znázornění kovalentního krystalu diamantu

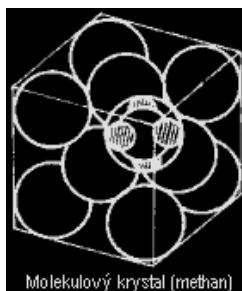
4.3 Kovové krystaly Stejně jako v případě kovové vazby můžeme mluvit o elektronovém plynu s relativně pohyblivými elektrony protože každý z atomů přispívá pouze jedním z elektronů, další není tolik vázán. Slabě vázané elektrony jsou sdíleny celou mřížkou. Krystalické kovové materiály jsou díky typu vazby dobrými vodiči a jsou dobře tvářitelné.



Obr. 23: Sdílení slabě vázaných elektronů v mřížce kovových krystalů

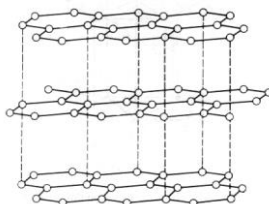
<http://www.rtg.wz.cz/kryststr.html>

4.4 Molekulární krystaly vznikají působením V.d.W. sil, z toho, co o těchto silách víme, lze odhadnout, že tyto krátkodosahové sekundární síly poskytují krystalům mnohem menší soudržnost než krystaly iontové a kovalentní. Vedle nízké pevnosti se molekulární krystaly vyznačují velmi nízkým bodem tání a varu (tuhý metan CH_4 - 183°C resp. - 140°C).



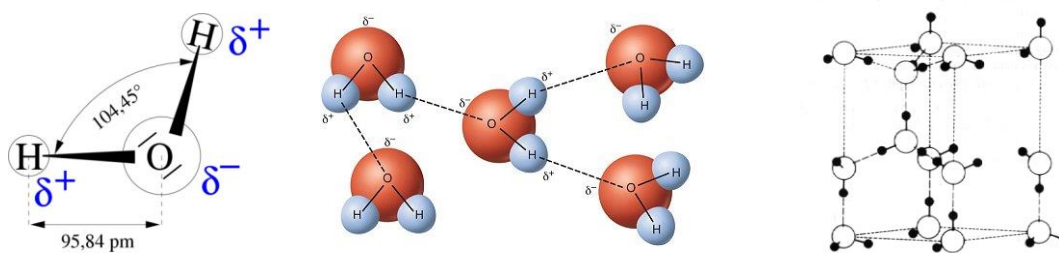
Obr. 24: Metan vytváří za velmi nízkých teplot molekulární krystaly, které jsou vytvořeny působením velmi slabých sil.

Podobně je realizována vazba uhlíkových atomů u tuhy, rovinné vrstvy jsou vzájemně vázány slabými V.d.W. silami.



Obr. 25: Vrstvy uhlíkových atomů v krystalech tuhy.

4.5 Krystaly s vodíkovou vazbou Vodíková vazba se také může podílet na tvorbě pevných látek s krystalovou strukturou. Příkladem je voda, molekulární krystal běžného ledu je uspořádán do čtyřstěny, protože molekula vody není v osovém přímkovém uspořádání, ale na kyslíkovém iontu je zalomena pod úhlem 104,45°. Na vysunutém kyslíku je náboj δ^- a konce s vodíky mají náboj δ^+ . Tvorba nadmolekul je potom prostřednictvím vazby dipól – dipól snadná přes společné sdílení vodíkových atomů. Nejčastější formou krystalů vody je hexagonální uspořádání v jednotlivých rovinách, které jsou mezi sebou vázány vodíkovými můstky.



Obr. 26: Krystaly ledu jsou příkladem krystalů vytvořených působením vodíkové vazby.

http://hgf10.vsb.cz/546/Flotace/text_2.htm , <http://fyzika.jreichl.com/main.article/view/628-vazby-v-krystalech> ,
<http://www.xray.cz/kryst/str07a.htm>

/Poznámka k odstavci 3/

Koordináčně-kovalentní vazba (*DA vazba*) - vzniká překrytím orbitalu obsazeným elektronovým párem (dárce elektronového páru = donor) s prázdným (vakantním) orbitalem (příjemce elektronového páru = akceptor). Tento typ vazby má stejné vlastnosti jako vazba kovalentní, liší se pouze způsobem vzniku. Nejčastěji se vyskytuje u komplexních sloučenin, většinou ji vytvářejí d-prvky.

