

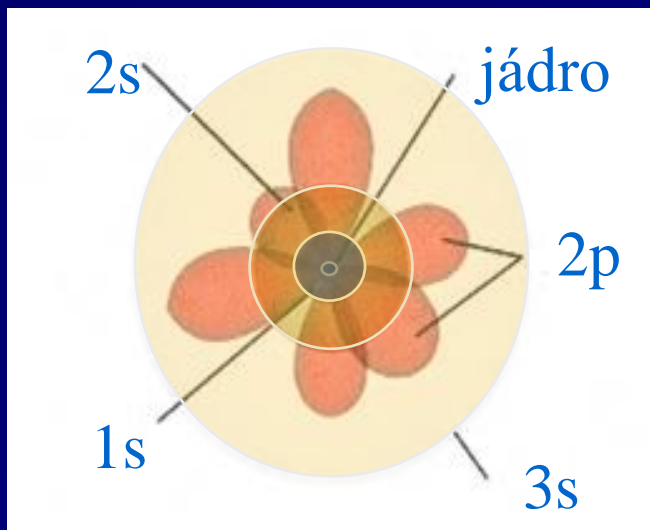
Vazby v pevných látkách

Hlavní body

1. Tvorba pevných látek
2. Van der Waalsova vazba elektrostatická interakce indukovaných dipólů
3. Iontová vazba elektrostatická interakce iontů
4. Kovalentní vazba
5. Kovová vazba
6. Úvod do pásové teorie pevných látek

Model atomu

Elektrony se nacházejí v orbitalech, jejich energie vzrůstá směrem od jádra



Energie atomu závisí na konfiguraci elektronů – základní stav = nejnižší energie

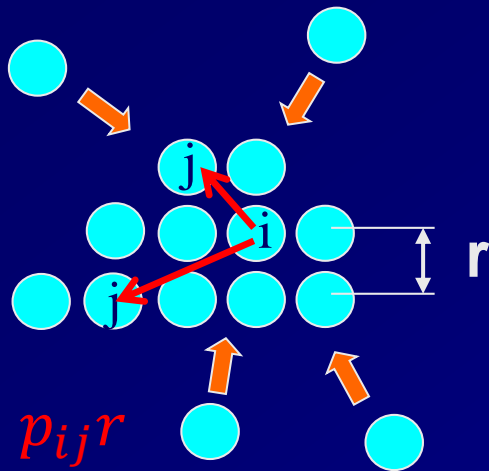
Periodická tabulka prvků

	Ia	IIa											IIIb	IVb	Vb	VIb	VIIb	VIIIb		
1	H																	He		
2	Li	Be													B	C	N	O	F	Ne
3	Na	Mg	IIIa	IVa	Va	VIa	VIIa	VIIIa			Ib	IIb	Al	Si	P	S	Cl	Ar		
4	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr		
5	Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe		
6	Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn		
7	Fr	Ra	Ac	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt											
Lanthanoidy			Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu				
Aktinoidy			Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr				

Atomy se mohou navzájem vázat různými způsoby. Způsob vazby má vliv na vlastnosti výsledných produktů – pevnost, bod tání,...

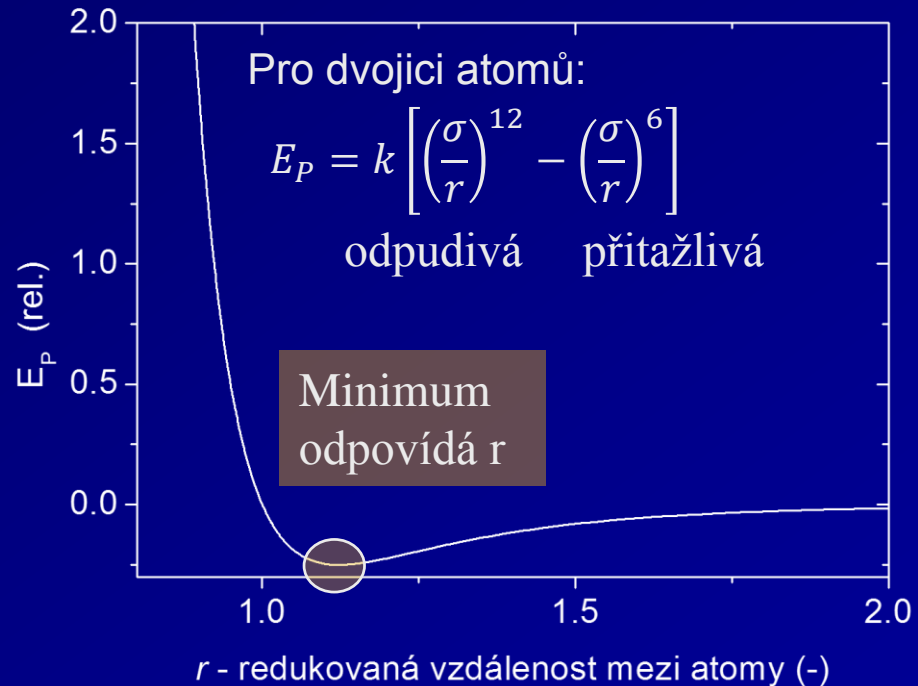
Van der Waalsova vazba

Kondenzace atomů argonu – tvorba krystalové mříže – kohezní energie



-základem je elektrostatická interakce mezi indukovanými dipóly mezi zvoleným atomem i a ostatními N atomy j

- kondenzaci látek na základě van der Waalsovy vazby vyjadřuje Lennard - Jonesův potenciál – celková **kohezní** energie je dána sumací všech atomů v krystalu. **V.-W. vazba je velmi slabá**



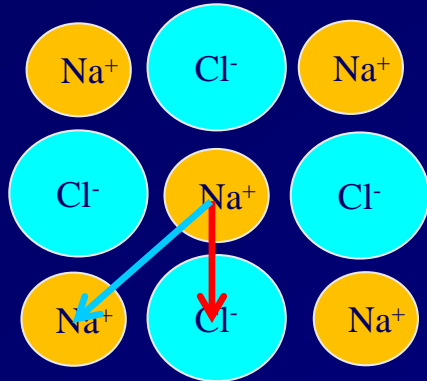
$$E_P(\text{celková}) = \frac{1}{2}nk \left[\sum_j \left(\frac{\sigma}{p_{ij}r} \right)^{12} - \sum_j \left(\frac{\sigma}{p_{ij}r} \right)^6 \right]$$

odpudivá přitažlivá

Vrstevnaté sloučeniny
 Bi_2Se_3 , TiS_2 , C(grafit)...**LEPIDLA**

Iontová vazba

Kondenzace atomů sodíku a chloru – tvorba krystalové mříže



-základem je elektrostatická interakce mezi opačně nabitými ionty atomů i a j . Vždy se míchá s vazbou kovalentní.

$$E_{Pi}(\text{celková pro } i\text{-tý iont}) = \sum_j E_{ij}$$

$$E_{ij} = k_1 \exp\left(\frac{-r_{ij}}{k_2}\right) + k_3 \frac{q^2}{r_{ij}}$$

odpudivá

(reálně pouze pro nejbližší sousedy)
místo r^{-12} u VdW vazby

coulombická

(**přitažlivá** a **odpudivá**)

Pro dvojici
atomů:



Ionizace plynného sodíku a chloru



Kondenzace chloridu sodného

$$E_3 + E_2 - E_1 = \text{kohezní energie krystalu} > 0$$

(vzhledem k prvkům)

$$E_P(\text{celková pro } N \text{ molekul}) = N \sum_j E_{ij}$$

$$E_P = N \left(Z k_1 \exp\left(\frac{-r_{ij}}{k_2}\right) + \beta k_3 \frac{q^2}{r_{ij}} \right)$$

$$\beta = \sum_j \frac{1}{p_{ij}}$$

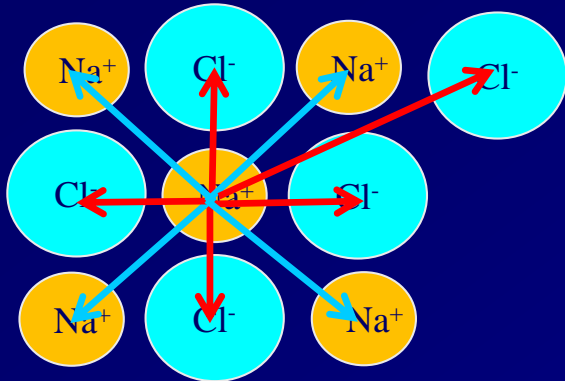
Z

Madelungova konstanta

Počet nejbližších sousedů

Iontová vazba

Výpočet Madelungovy konstanty



-počítáme elektrostatickou energii referenčního iontu se všemi ostatními. Vždy musíme u dané sady nejbližších sousedů respektovat znaménka nábojů q . Iontová vazba je velmi pevná

$$E_P = N \left(Zk_1 \exp \left(\frac{-r_{ij}}{k_2} \right) + \beta k_3 \frac{q^2}{r_{ij}} \right)$$

Hledáme minimum energie pro zjištění rovnovážné vzdálenosti iontů r_0 :

$$\frac{dE_P}{dr} = - \frac{NZk_1}{k_2} \exp \left(\frac{-r_{ij}}{k_2} \right) + N\beta k_3 \frac{q^2}{r_{ij}^2} = 0$$

$$r_0^2 \exp \left(\frac{-r_0}{k_2} \right) = \frac{k_2 k_3 \beta q^2}{Zk_1}$$

$$\beta = -\frac{6}{1} + \frac{12}{\sqrt{2}} - \frac{8}{\sqrt{3}} + \frac{6}{\sqrt{4}} \dots \quad \beta = \sum_j \frac{1}{p_{ij}}$$

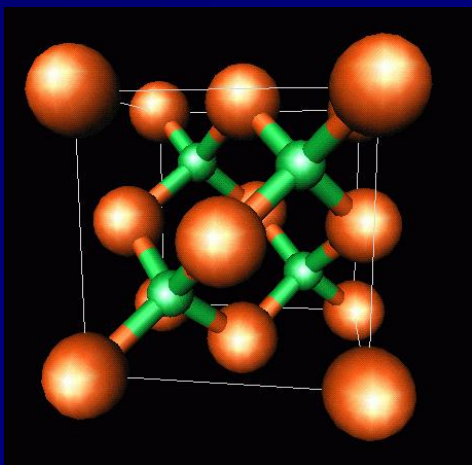
β : 1.747 / NaCl
1.638 / ZnS

Kovalentní vazba

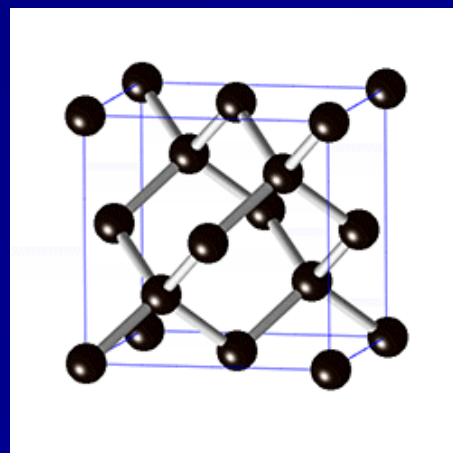
Kondenzace atomů uhlíku – tvorba krystalové mřížky diamantu

Základem kovalentní vazby je sdílení elektronových párů = **dva elektrony s opačnými spiny**. Je to **velmi pevná** vazba.

Nacházíme ji u většiny **organických a nepolárních látek**. Pro binární a vyšší sloučeniny se míchá s iontovou vazbou na iontově-kovalentní vazbu.

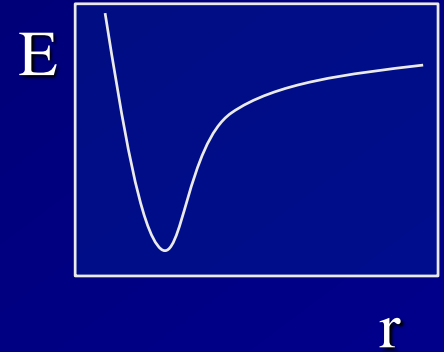


iontově-kovalentní ZnS



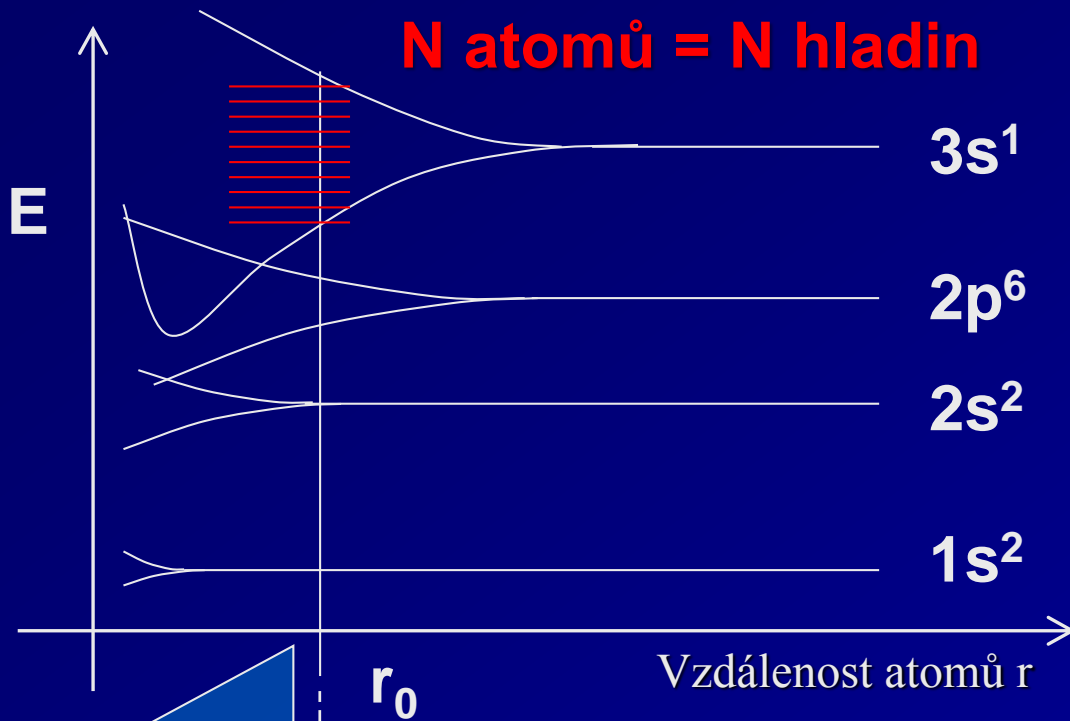
kovalentní C

Kovová vazba

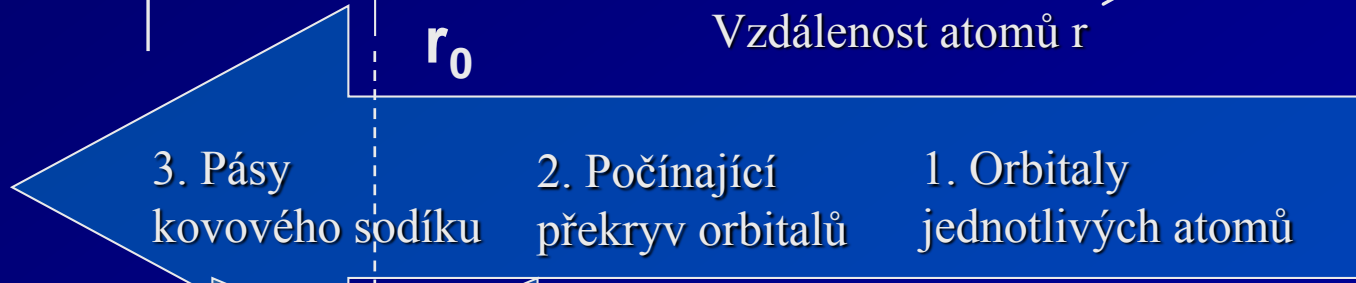
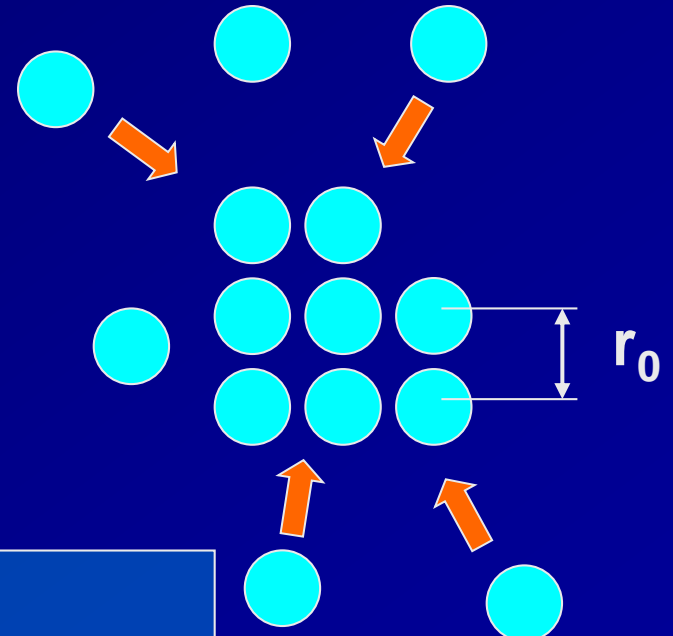


1. Preferuje ji většina prvků vyskytujících se v přírodě
2. Kov je tvořen kladně nabitými ionty (s “konfigurací vzácného plynu“) a relativně velmi volnými elektrony.
3. Kovy mají velká koordinační čísla 8-12 oproti 4-6 u kovalentních a iontových látek.
4. Vysoká koordinace a poměrně malé počty valenčních elektronů omezují směrovost vazeb. To má za následek kujnost kovů.
5. “Dostatek místa“ a nesměrovost vazeb v mřížce kovů má za následek snížení energie valenčních elektronů ve srovnání s lokalizovaným stavu na jednotlivých atomech. To vysvětluje vysokou stabilitu kovů.
6. Počet vazebných elektronů do značné míry určuje bod tání.

Pásová teorie pevných látek (nemolekulární povahy-viz. kondenzace Ar)

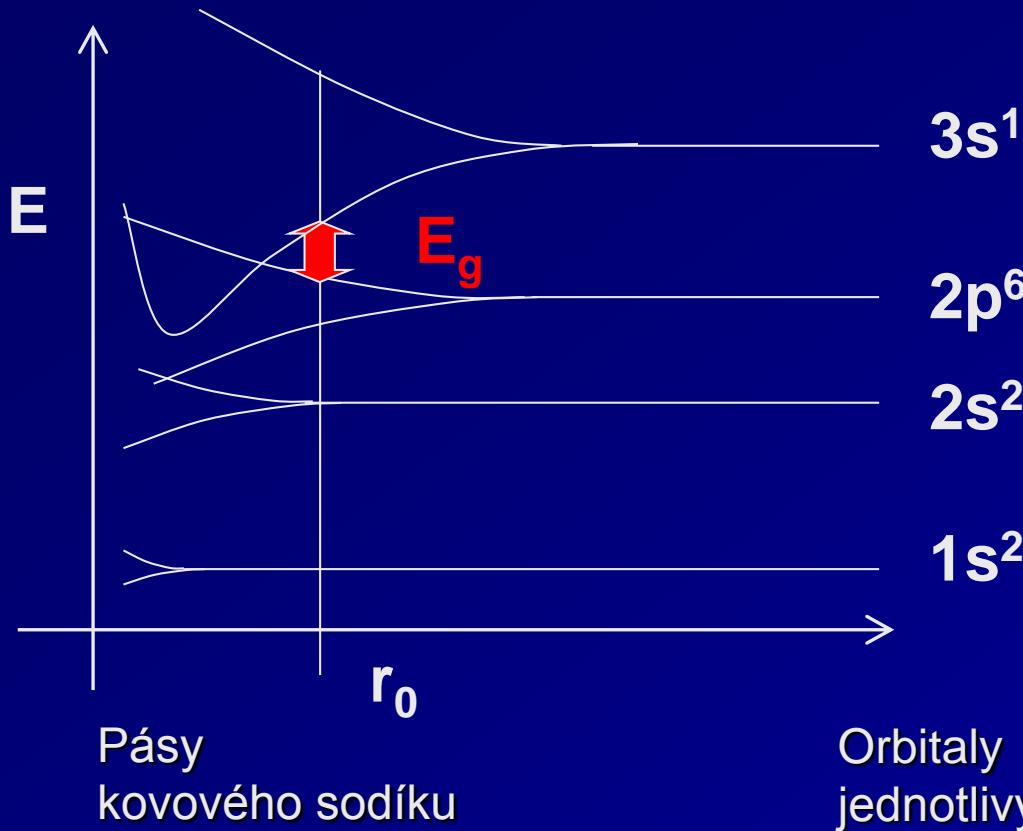


Kondenzace sodíkových atomů – vznik energetických pásů



- U **kovů** se energetické pásy **překrývají** nebo jsou **neúplně zaplněné**
- U **polovodičů / izolantů** se nepřekrývají a jsou **zcela plné** nebo **zcela prázdné**

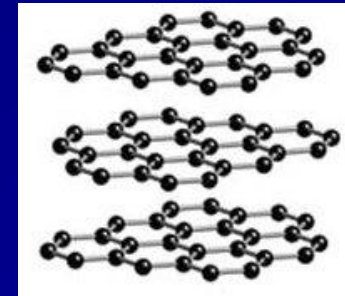
Pásová teorie pevných látek



Na tom, jaké atomy a jakým způsobem uspořádáme závisí vlastnosti výsledného materiálu!

Saze

grafit



diamant

