

## 2. Molekulová stavba pevných látek

### 2.1 Vznik tuhého tělesa krystalizace

Při přeměně kapaliny v tuhou látku vzniknou nejprve krystalizační jádra, v nichž nastává tuhnutí kapaliny.

Ochlazování kapaliny se zmenšuje pohybová energie kapaliny a začnou se projevovat přitažlivé síly molekul a molekuly se začnou pravidelně uspořádávat v krystalizačních jádrech.

Stavba vznikající tuhé látky závisí:

- 1) Na počtu krystalizačních jader vznikajících v časové jednotce.
- 2) Na rychlosti s jakou se krystalizační jádra zvětšují.

Je-li jedno jádro, vznikne **monokrystal**. Je-li více jader, vznikne **polykrystalická látka**. Je-li málo jader a rychlý růst – **hrubozrnná struktura**. Je-li mnoho jader, malý růst, vznikne **jemnozrnná struktura**. Při rychlém chlazení se může počet krystalizačních jader zmenšovat a molekuly zaujímají polohy jemnější potenciální energie bez uspořádání – **látka beztvářá amorfni**.

Při krystalizaci může dojít i k rozdělení molekul na atomy, ionty – jsou to stavební částice tuhých látek a dále sem patří i molekuly.

Geometricky pravidelné uspořádání stavebních částic tuhé látky v prostoru. Vznikne **krystalická mřížka**.

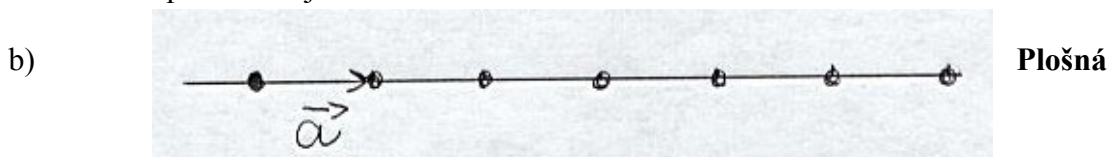
### 2.2 Geometrická a krystalová mřížka

Látka je v pevné fázi, má-li vnitřní krystalovou strukturu.

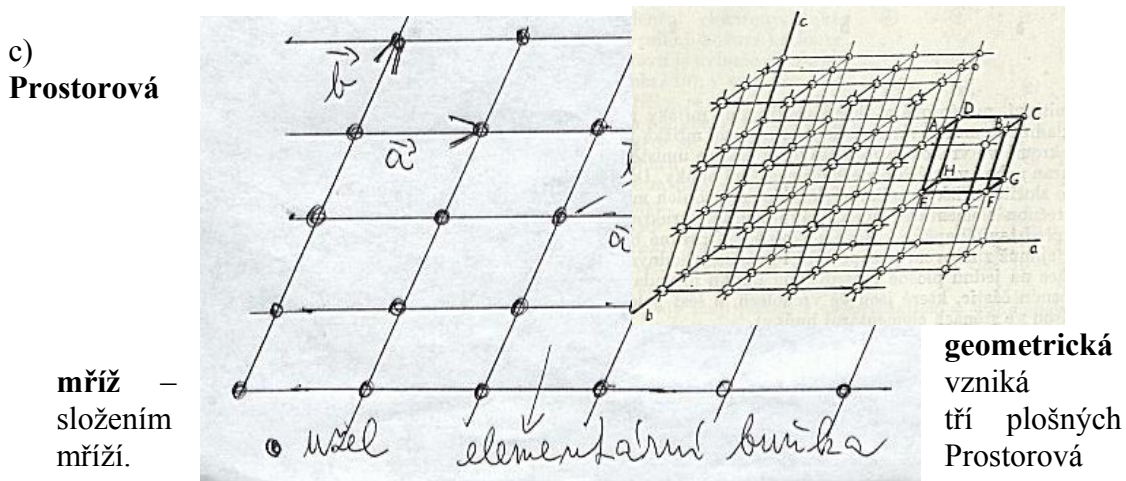
Dva druhy mříží:

#### 1) Geometrická (idealizace)

- a) **Lineární geometrická mříž** – soustava ekvidistantních (stejnovzdálenostních) bodů na přímce. Je jednoznačně určena vektorem  $\vec{a}$ .



**geometrická mříž** – vzniká složením dvou vektorů v různých směrech, uvnitř buňky, ani na hraně nesmí být další uzel. Každý uzel patří 4 buňkám, tedy do každé buňky patří jeho čtvrtina, celkem tedy do buňky patří jeden uzel. Hrana je společná pro dvě buňky.

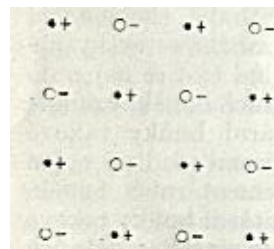


geometrická mříž vzniká složením třech vektorů v různých směrech, které neleží v jedné rovině. Celý prostor je vyplněný buňkami. U každé prostorové buňky: Vrchol patří osmi buňkám. Hrana patří čtyřem buňkám. Stěna patří dvěma buňkám.

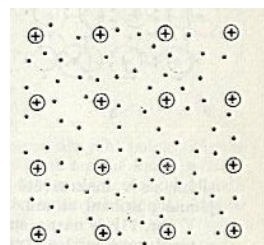
## 2) Strukturní (krystalová)

Strukturní mříž vznikne osazením uzlů geometrické mříže molekulami, atomy, ionty. Síly jimiž jsou ve strukturální mřížce vázány částice – vazebné síly. Podle vazebných sil existují:

- a) **Iontová vazba** – některé látky tvoří snadno ionty (Na, Cl) jejich spojení vzniká iontový krystal. Za normálních teplot jsou tepelné a elektrické izolanty. Jsou většinou průsvitné, pohlcují infračervené záření, jsou štěpné. Každý iont je rovnovážné poloze v silových polích. Sousedních iontů a zaujímá takovou polohu, aby energie byla minimální.



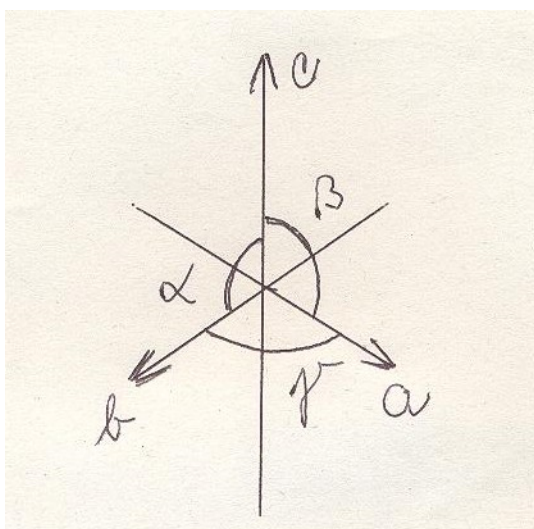
- b) **Kovová vazba** – je tvořena atomy – **atomová vazba**. U kovů se snadno uvolňují valenční elektrony a vznikají kationty. Z nichž je vybudována mřížka, mezi ionty mřížky se pohybují tepelným pohybem elektrony – **elektronový plyn**. Vazbu tvoří elektrické síly. Vlastnosti: tažnost, kujnost, kovový lesk, odraz světla, neprůhlednost.



- c) **Kovalentní vazba** – je tvořena na sdílení elektronů. Každý atom chce mít zaplněnou sféru. Atomy si půjčují elektrony a každý atom má na chvíli valenční sféru zaplněnou. Vlastnosti: tvrdé, málo štěpné, velký index lomu, elektrické a tepelné izolanty. Příklady: uhlík (diamant), křemík, germanium.

- d) **Molekulová vazba (van der Waalsova)** – je to vazba mezi neutrálními částicemi, jsou velmi slabé. Vlastnosti: měkké, nízká teplota látek.

## 2.3 Typy krystalových mřížek



### Sedm krystalografických soustav (Přehled)

- 1) **Trojklonná (triklinická)**  
 $a \neq b \neq c, \alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$
- 2) **Jednoklonná (monoklinická)**  
 $a \neq b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
- 3) **Kosočtverečná (orthorombická)**  
 $a \neq b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
- 4) **Čtverečná (tetragonální)**  
 $a \neq c, a = b, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
- 5) **Krychlová (kubická)**  
 $a = b = c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
- 6) **Klencová (rhomboedrická)**  
 $a = b = c, \alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$

### 7) Šesterečná (hexagonální)

$$a = a_1 = b \neq c, \gamma = 120^\circ, \alpha = \beta = 90^\circ$$

Jsou-li stavební částice jen v uzlech mřížky – primitivní mřížka P

Jsou-li stavební částice i ve středech protilehlých stěn – bazálně centrovaná B

Jsou-li i ve středech všech stěn – plošně centrovaná F

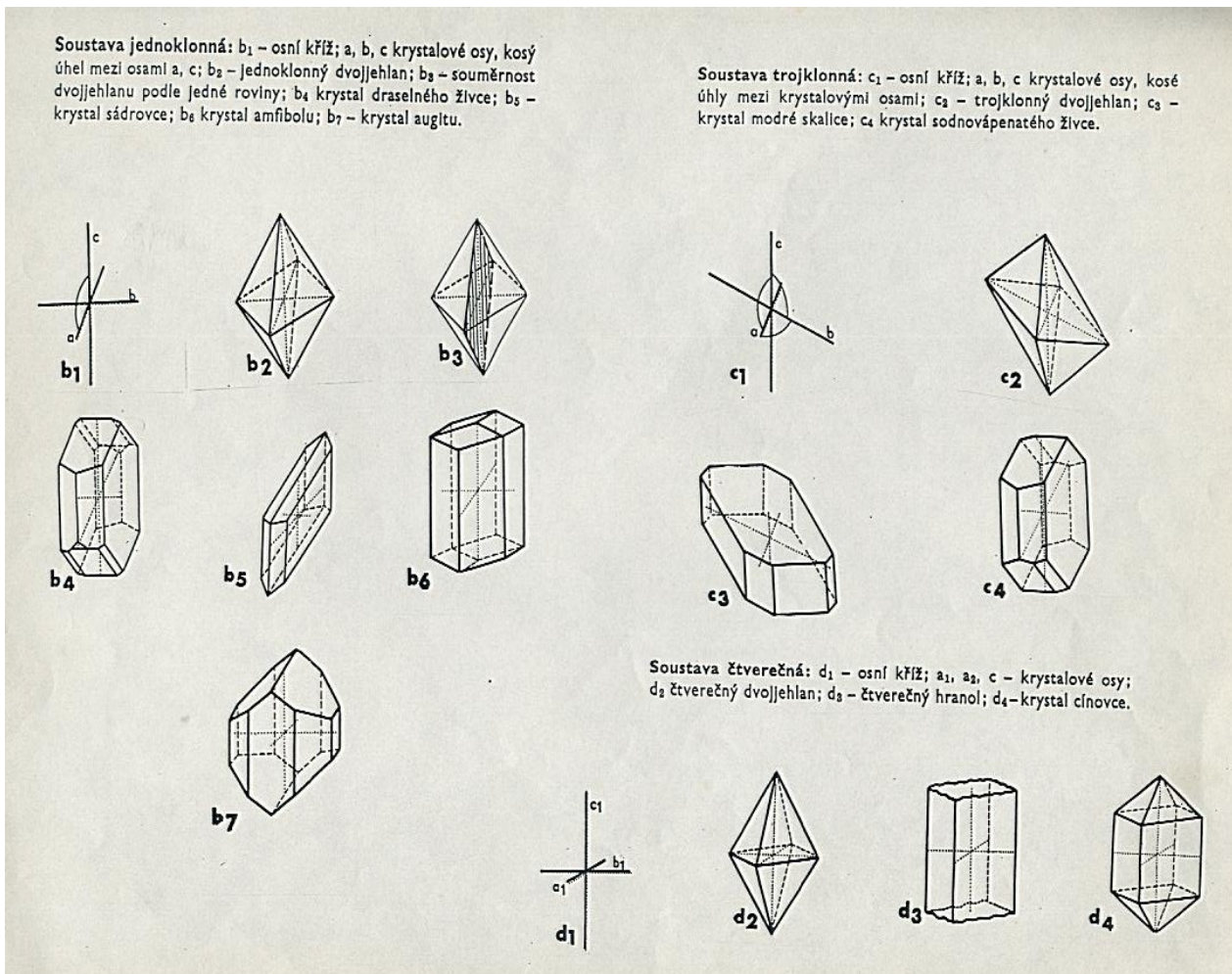
Je-li stavební částice i v těžišti – prostorově centrovaná J

Celkově existuje 14 Bravaisových mřížek:

- 1) **Trojklonná (triklinická)** - P
- 2) **Jednoklonná (monoklinická)** – P, B
- 3) **Kosočtverečná (orthorombická)** – P, B, F, J
- 4) **Čtverečná (tetragonální)** – P, J
- 5) **Klencová (rhomboendrická)** - P
- 6) **Šesterečná (hexagonální)** - P
- 7) **Krychlová (kubická)** – P, F, J

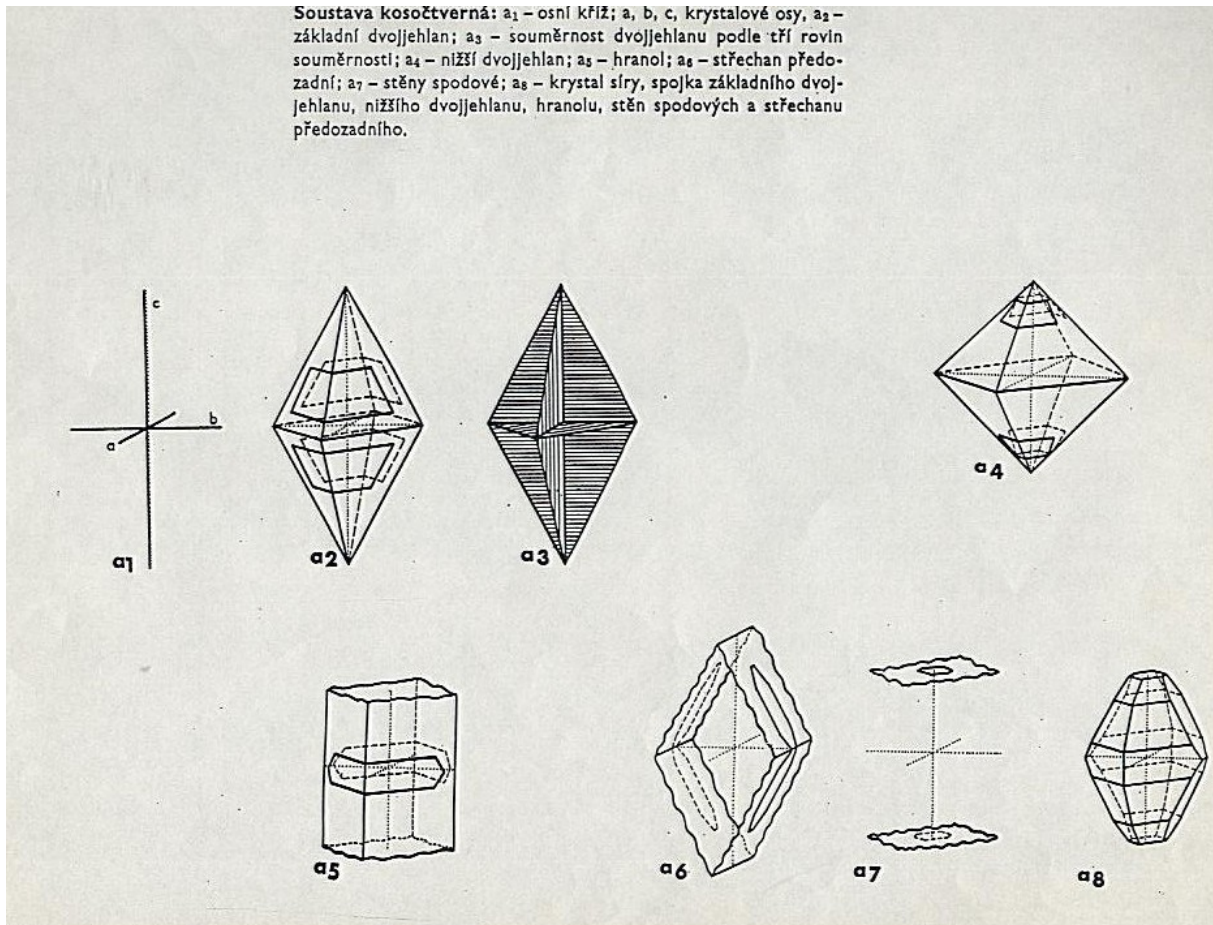
### Krystalografické soustavy podrobně

#### Soustavy: jednoklonná, trojklonná, čtverečná



## Soustava: kosočtverečná

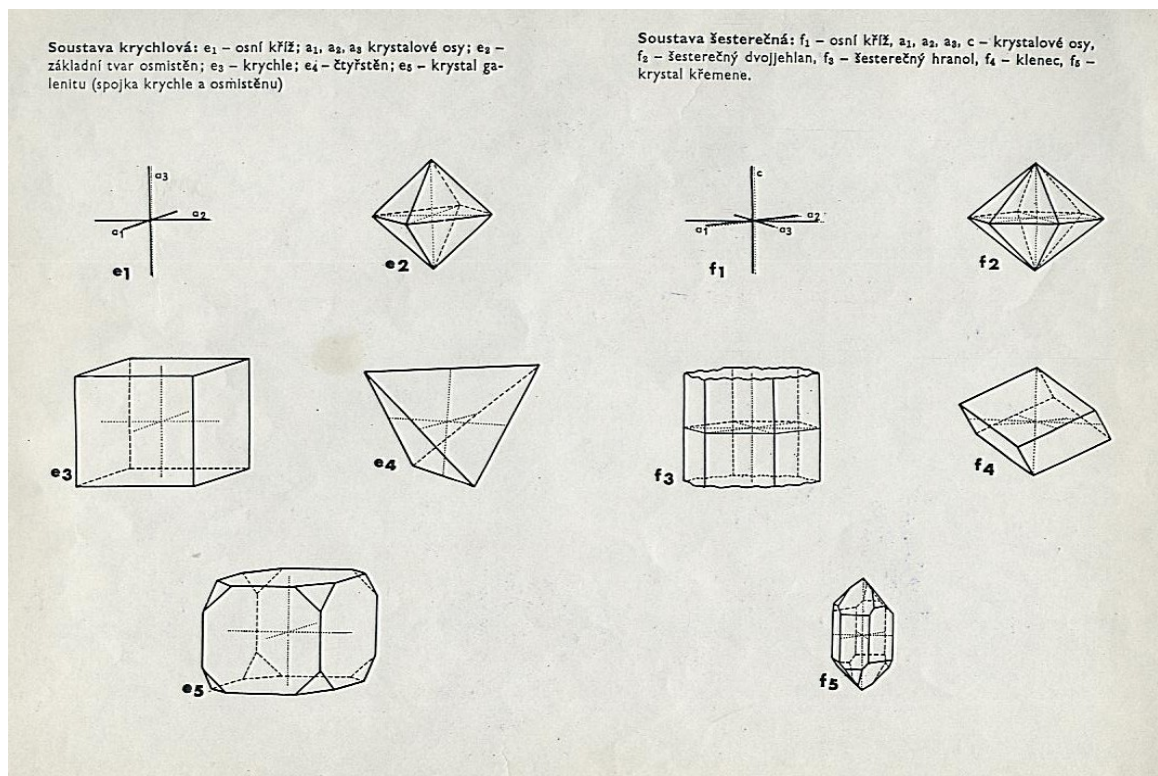
Soustava kosočtverečná:  $a_1$  – osní kříž;  $a, b, c$ , krystalové osy;  $a_2$  – základní dvojjehlan;  $a_3$  – souměrnost dvojjehlanu podle tří rovin souměrnosti;  $a_4$  – nižší dvojjehlan;  $a_5$  – hranol;  $a_6$  – střešchan předozadní;  $a_7$  – stěny spodové;  $a_8$  – krystal slíry, spojka základního dvojjehlanu, nižšího dvojjehlanu, hranolu, stěn spodových a střešchanu předozadního.



## Soustavy: krychlová, šesterečná (platí i pro klencovou)

Soustava krychlová:  $e_1$  – osní kříž;  $a_1, a_2, a_3$  krystalové osy;  $e_2$  – základní tvar osmistěn;  $e_3$  – krychle;  $e_4$  – čtyřstěn;  $e_5$  – krystal galenitu (spojka krychle a osmistěnu)

Soustava šesterečná:  $f_1$  – osní kříž;  $a_1, a_2, a_3, c$  – krystalové osy;  $f_2$  – šesterečný dvojjehlan;  $f_3$  – šesterečný hranol;  $f_4$  – klencec;  $f_5$  – krystal křemene.



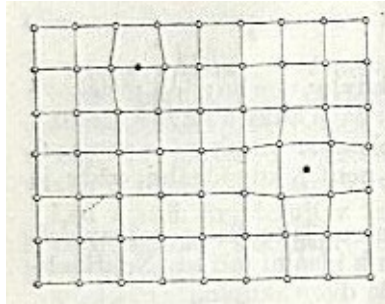
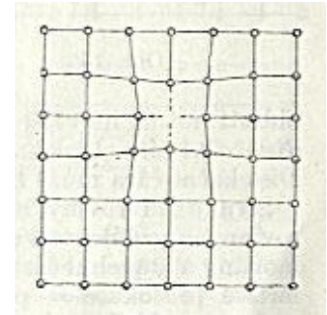
## 2.3 Poruchy strukturní mřížky

Strukturní mřížka by byla ideální, kdyby všechny její mřížkové body byly pravidelně osazené částicemi dané látky. Strukturní mřížka reálných krystalů není nikdy ideální. Vždy v ní existují nějaké poruchy – nepravidelnost v mřížce.

### a) Bodové poruchy

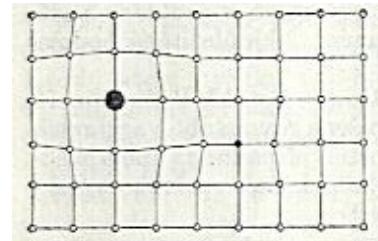
Projevují se jako nepravidelnosti v jediném bodě.

1) **Vakance** – neobsazený uzel. Je zde porušena rovnováha vazebných sil. Některý ze soustavy atomů se může do volného místa posunout (za působení mechanického či tepelného).



2) **Atom v intersticiální (mezimřížkové) poloze** – atom je v mezi mřížkové poloze. Může to být vlastní částice nebo příměs. Je zde porušena rovnováha – vzniká napětí. Částice se může difúzí pohybovat a při styku s vakancí se mohou obě zrušit (rekombinace).

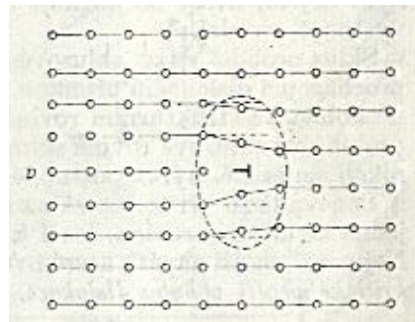
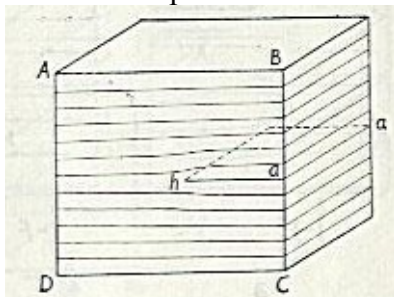
3) **Cizí atom v mřížkové poloze** - nečistota v krystalu. Počet poruch závisí na teplotě.



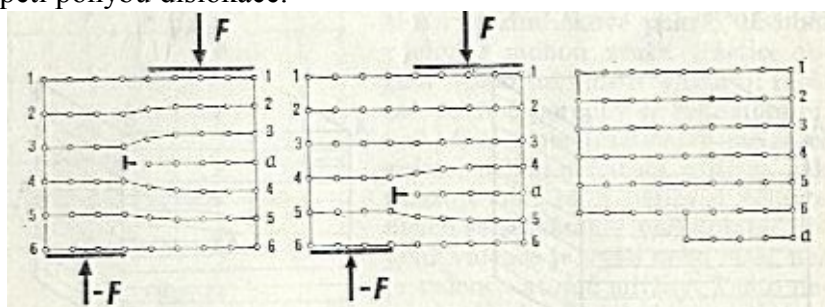
### b) Čárové poruchy (dislokace) mřížky – dochází

k deformaci strukturních rovin. Je to čára, která určuje porušení a označujeme jí jako **dislokační čára** a může procházet celým krystalem.

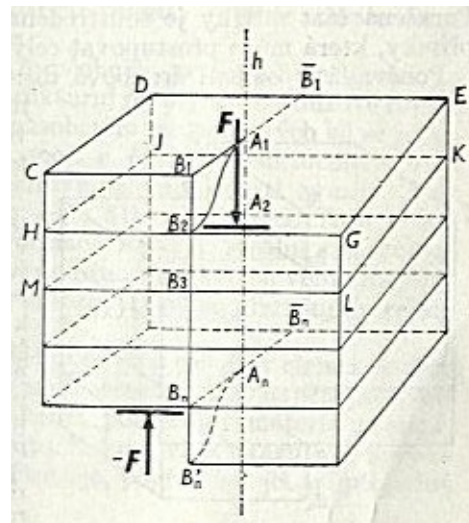
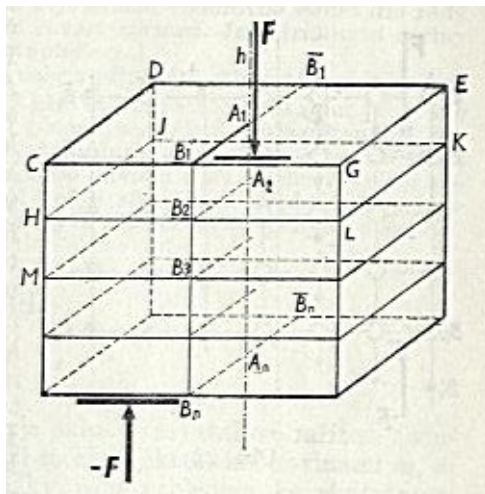
1) **Hranolová dislokace** – vzniká tím, že chybí část strukturní roviny. Částice se posouvají k dislokační přímce.



Působením vnějších sil se dislokace může v krystalu posouvat. Díky silovému působení dislokace vymizí (vystoupí z krystalu). Ději říkáme **skluz** a probíhá ve skluzové rovině. Probíhá u všech rovin současně. Nejmenší napětí, které vyvolá skluz označujeme jako kritické napětí pohybu dislokace.



2) **Šroubová dislokace** – v neporušeném krystalu se nic nestane. V deformovaném dochází k postupnému propadu o minimálně jednu úroveň. Například do  $B_1$ . Vzniká neuzavřená spirálová křivka. Budou-li působit síly po celé ploše výsledek bude vypadat jako na obrázku. vývoj mezi kapalnou a plynnou látkou můžete pozorovat na spodním obrázku.



## 2.4 Deformace tuhého tělesa

Vazby v mřížce dávají každému tělesu tvar. Změna tvaru – **deformace**. Chceme-li vyvolat deformaci, musíme na těleso působit silou. Základní rozdělení deformací:

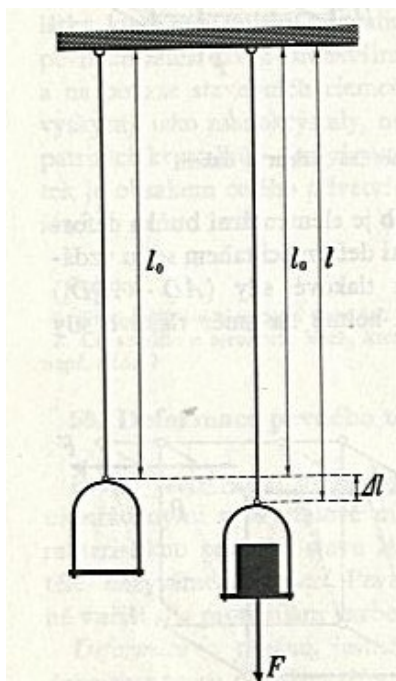
- pružná** – po působení síly zmizí
- trvalá** (plastická) – po působení síly zůstává

Schopnost zaujmout původní tvar se nazývá **pružnost**.

## 2.5 Druhy deformací

Podle druhu změn v mřížce rozlišujeme deformaci v tahu, v tlaku, v ohybu, smyku a v kroucení.

### a) tah



Napínejme pružný (ocelový) drát, který je na jednom konci upevněný a na druhém konci zatěžovaný závažími. Původní délku drátu označíme  $l_0$  a jeho průřez  $S$ . Závaží působí tíhovou silou  $G = m \cdot g$  a prohne (či natáhne) drát na délku  $l$ . Protážení drátu označíme  $\Delta l$  a je přímo úměrné velikosti působící síly  $F$ , původní délce drátu  $l_0$  a nepřímo úměrné průřezu drátu  $S$ .

Odvození:

$$\Delta l = \alpha \cdot \frac{l_0}{S} \cdot F - \text{zjistíme protážení drátu}$$

$\alpha$  - fyzické prodloužení drátu

$$\frac{\Delta l}{l_0} = \varepsilon - \text{tuto veličinu označíme jako **relativní podélné**}$$

**prodloužení** (relativní deformace).

$$\text{Veličina } \frac{F}{S} = P - \text{normálové napětí.}$$

Veličinu  $\alpha$  přepsat do tvaru:  $\alpha = \frac{1}{E}$ .

E – Youngův (čti jangův) modul pružnosti v tahu.

Rovnici pro protažení drátu napíšeme pak ve tvaru, kterou nazveme **Hookův zákon**:

$$\varepsilon = \frac{1}{E} \cdot P$$

**Hookův zákon:**

Relativní podélné prodloužení je přímo úměrné napětí v tahu. Hookův zákon platí jen pro pružné deformace.

Pokud  $P=E$  (modul pružnosti v tahu je rovný napětí, drát zdvojnásobí délku)

Pro délku drátu platí:  $l_p = l_0 \cdot (1 + \varepsilon)$

**b) tlak**

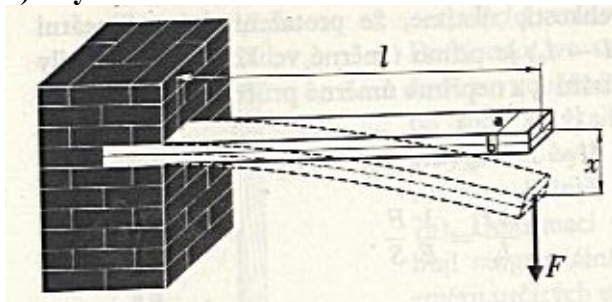
$$\Delta l = l_0 - l = \frac{1}{E} \cdot \frac{F \cdot l_0}{S}$$

relativní prodloužení:  $\varepsilon = \frac{1}{E} \cdot P$

E – je pro tah i tlak stejné

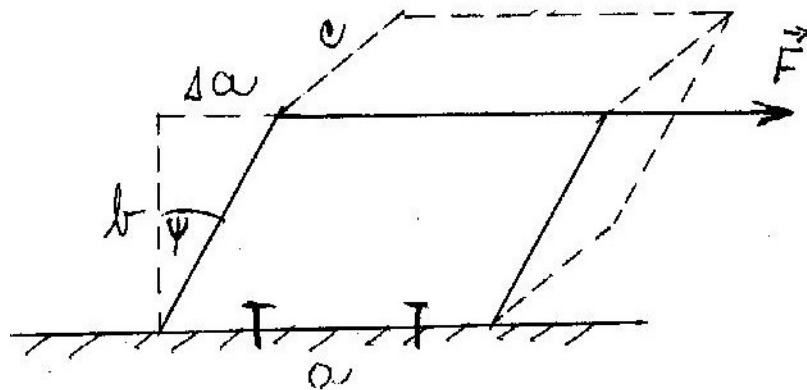
Pro délku platí:  $l_p = l_0 \cdot (1 - \varepsilon)$

**c) ohybu**



Je složená z tahu a tlaku. Existuje vrstva, která nemění svou délku – neutrální vrstva – prochází těžištěm.

**d) ve smyku**



$$\Delta a = \beta \cdot \frac{b \cdot F}{c \cdot a}$$

Příčemž  $\frac{F}{c \cdot a} = T$  -

tangenciální napětí na jednotlivou plochu

$$\frac{\Delta a}{b} = \text{tg} \Psi, \text{ pro malé úhly}$$

se  $\text{tg} \Psi = \Psi$  - je v radiánech

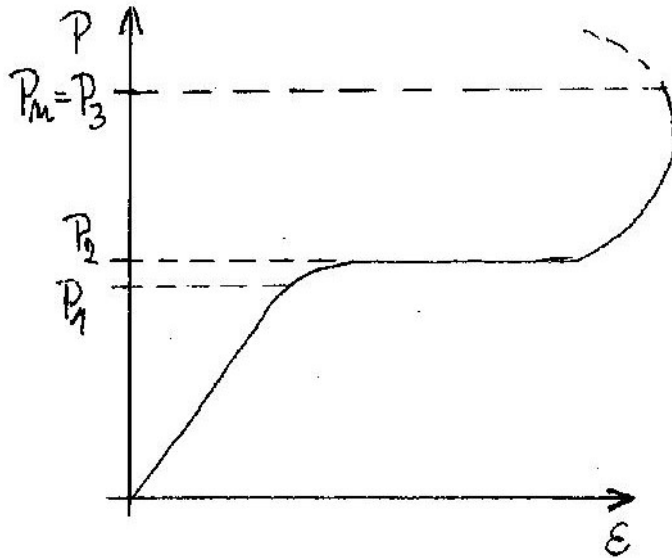
$$\beta = \frac{1}{G} - \text{Youngův modul}$$

kroucení

Vše vede k **Hookovu zákonu pro smyk**:

$$\psi = \frac{\Delta a}{b} = \frac{1}{G} \cdot \frac{b \cdot T}{b} = \frac{1}{G} \cdot T$$

## 2.6 Průběh poměrného podélného prodloužení v závislosti na napětí



$P_1$  – mez pružnosti – platí Hookův zákon, těleso se vrací do původního tvaru

$P_2$  – mez tečení – neplatí Hookův zákon – vzniká tvrdá deformace

$P_3 = P_m$  – mez pevnosti – materiál se trhá

Reálně u každé látky je jiný průběh. Periodickým opakováním námahy se mez pevnosti snižuje – **únava materiálu**.

Míra bezpečnosti:

napětí při mezním stavu

—————  
napětí při pracovním stavu

Vypočítáme jí:  $s = \frac{P_m}{P_{pr}}$