

Kvantová fyzika pevných látek

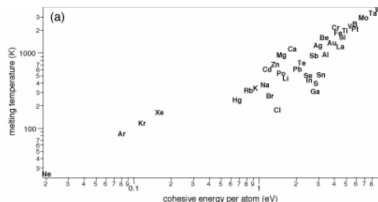
Přednáška 3: Vazby v pevných látkách

Pavel Márton

30. října 2013

Vazby v krystalech (iontová, kovalentní, Van der Waalsova, kovová)

- Kohezní energie je energie získaná uspořádáním atomu do krystalového stavu oproti energii v plynném stavu.
- Silná korelace s teplotou tání.



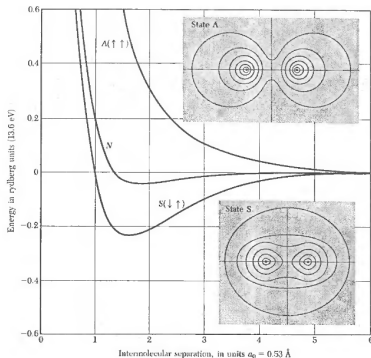
Obrázek: Kohezní energie vs. teplota tání http://users-phys.au.dk/philip/pictures/solidi_thermalproperties/cohesivelindemann.g

Van der Waalsova interakce

- Velmi slabá. Má původ v dynamické polarizaci elektronů náležejících interagujícím atomům.
- Mezimolekulová vazba
- $\approx -\frac{1}{R^6}$
- Krystaly inertních plynů, grafit
- Musí být doplněna o repulsi. Co způsobuje repulsi?

Repulse

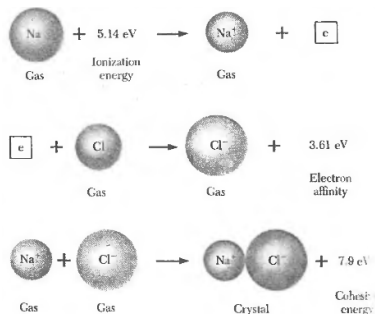
- Původ v Pauliho vylučovacím principu
- Empirické pravidlo: $\approx \frac{1}{R_{12}}$
- Někdy též aproximováno vztahem $\lambda \exp(-R/\rho)$
- Lenard-Jonesův potenciál pro dva atomy: $U(R) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{R}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{R}\right)^6 \right]$
- L.-J. je anharmonický potenciál. Popisuj dobře vazbu v intertních plynech



Obrázek: Vazebný a antivazebný stav ve vodíku N odpovídá klasickým výpočtům ISSP 3.12

Iontová vazba

- Elektrostatická interakce mezi kladně a záporně nabitými ionty.
- Madelungova konstanta α
 - Struktura NaCl: $\alpha = 1.747565$
 - Struktura CsCl: $\alpha = 1.762675$
 - Kubická struktura ZnS
 $\alpha = 1.6381$
- Madelungova energie
- Přitažlivá $\approx -\frac{1}{R}$



Obrázek: Energie je menší o $(7.9-5.1+3.6)$ eV=6.4 eV v porovnání s oddělenými neutrálními atomy ISSP

Kovová vazba

- Elektrostatická přitažlivá síla mezi delokalizovanými elektrony (elektrony, které nepatří žádnému konkrétnímu atomu).
- Slabší než iontová vazba.
- Těsně uspořádané struktury.
- Kovová vazba je zodpovědná za mnoho fyzikálních vlastností kovů, např. pevnost, kujnost, poddajnost, tažnost, elektrická vodivost, neprůhlednost, lesk
- V anglické terminologii je preferovaný termín "bonding" (v protikladu k termínu "bond"), protože tento typ vazby je ve své podstatě kolektivní, nejde tedy o vazbu mezi konkrétními atomy.

Kovalentní vazba

- Silná vazba tvořená elektronem/elektrony lokalizovanými (sdílenými) mezi atomy.
- Síla vazby je srovnatelná s iontovou vazbou
- Směrovost vazby - diamantová struktura (uhlík, křemík, germanium), velmi malý index zaplnění prostoru 0.34. Těsné uspořádání má index zaplnění 0.74.
- Elektrony tvořící vazbu jsou lokalizované, oproti kovové vazbě.
- Typické v materiálech tvořených pouze jedním prvkem, v takovém případě není možný (ze symetrie) přesun náboje z jednoho atomu na druhý. Pokud jde o sloučeninu binární, ternární, ... vždy se jedná o vazbu s iontově-kovalentním charakterem, nikdy čistě kovalentní.
- Vazba v molekule H_2 .