Krystaly

Pásová teorie pevných látek se týká zejména krystalů. Krystaly jsou objekty s periodickým uspořádáním základních složek, z nichž jsou utvořeny, do prostorové krystalové mřížky. Problémem je, jak je možné, že krystaly drží pohromadě a vykazují ve své struktuře podivuhodnou pravidelnost. Mezi atomy, molekulami či ionty, jimiž je krystal tvořen, musí existovat interakce, které připouštějí existenci vázaných stavů krystalu a které jsou příčinou pozorovaných symetrií.

Podle známých vlastností uvedených interakcí třídíme krystaly do těchto základních skupin:

1. iontové krystaly (NaCl, ...) - přechodem elektronu od jednoho typu atomů v látce k druhému se vytvářejí ionty podobně jako u iontové vazby molekul. Ionty jsou udržovány v krystalickém uspořádání hlavně coulombovskou elektrostatickou silou. Mezi ionty je elektromagnetická interakce. Vazbová energie je rovna řádově několika elektronvoltům na dvojici iontů. Tyto krystaly vykazují tzv. iontovou elektrickou vodivost při teplotách blízkých bodu tání, za normálních podmínek jsou nevodivé.
2. valenční krystaly - vazba sousedních atomů je kovalentní vazbou nesenou dvěma elektrony. Čistě kovalentní krystaly jsou např. diamantová forma uhlíku, Ge, Si, ... Vazebná energie je řádově stejná jako u iontových krystalů.
3. kovové krystaly - vazba, která váže sousední atomy, je vazba kovová (nenasycená kovalentní). Protože každý z atomů přispívá do kovalentní vazby jen jedním elektronem, vyčerpává v průměru jedna vazba jen čtvrtinu elektronů místo dvou v nasycené kovalentní vazbě. Proto nazýváme kovovou vazbu nenasycenou kovalentní vazbou. Tato vazba vysvětluje relativně malou pevnost a snadnou deformovatelnost kovů ve srovnání s prvními dvěma typy krystalů. Tato vazba způsobuje také relativní volnost elektronů a opravňuje v jednoduchých přiblíženích uvažovat o elektronech vytvářejících vazbu v kovových krystalech jako o elektronovém plynu.

Např. Li má základní konfiguraci $1s^2 2s^1$ se šesti nezaplněnými stavy 2*p* s energií jen o málo vyšší než je energie stavu 2*s*. Zatímco dva atomy vodíku vytvářejí v molekule H_2 nasycený kovalentní systém ve slupce *K*, k molekule Li_2 lze připojit další atom Li, který bude připoután kovalentní vazbou. Přitom se zaplňuje slupka *L* a nedochází k rozporu s Pauliho vylučovacím principem. Li krystalizuje v prostorově centrované soustavě, uvnitř které má každý atom osm nejbližších sousedů.

4. molekulární krystaly - základem jsou silně kovalentně vázané molekuly. Pohromadě je udržují slabé van der Waalsovy síly, což jsou zbytkové elektromagnetické síly, které mají původ v interakci mezi vlastními resp. indukovanými elektrickými dipóly molekul. Tyto krystaly jsou málo mechanicky pevné, mají díky malé intenzitě interakce nízký bod varu a tání. Vazbové energie jsou řádově desetiny až setiny elektronvoltů na molekulu.

Řazení reálných krystalů do těchto skupin nemusí být vždy zcela jednoznačné z toho důvodu, že u některých krystalů se vyskytuje více z uvedených vazeb najednou.

Např. grafit. Atomy uhlíku jsou v jednotlivých atomových rovinách vázány silnou kovalentní vazbou, ale atomové roviny jsou k sobě vázány slabou Waalsovou vazbou. Proto se grafit snadno stírá a ulpívá na papíru.

Rozhodující interakcí udržující krystaly v pevném stavu je elektromagnetická interakce mezi elektrony z vnější vrstvy obalu atomů, molekul nebo iontů, které krystaly vytvářejí. Může se jednat o:

1. lokalizované elektrony - patří trvale do struktury daného atomu nebo molekuly;
2. kolektivizované elektrony - snadno přecházejí mezi jednotlivými atomy nebo přesněji řečeno přísluší celému krystalu. Přitom nemusí být pravděpodobnost jejich výskytu stejná pro všechna místa v krystalu. Proto se hovoří o elektronech, které jsou více či méně kolektivizovány.

Např. v kovech lze elektrony považovat za zcela kolektivizované, neboť jejich vazba k mřížce (mateřským atomům) je velmi slabá, což podmiňuje dobrou elektrickou vodivost kovů, výskyt fotoefektu, ...

Kvantově teoretický popis vlastností krystalu by byl značně náročný. Proto existuje řada modelů, jak danou problematiku pochopit snáze - např. model elektronového plynu.

© Encyklopedie Fyziky (http://fyzika.jreichl.com); Jaroslav Reichl, Martin Všetička
Licence http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/3.0/ zakazuje úpravy a komerční distribuci.