

	str.
ÚVOD	6
1. ELEKTRONOVÁ STRUKTURA ANORGANICKÝCH MATERIÁLŮ	7
1.1 Základy teorie chemické vazby	7
1.1.1 Kvantová mechanika	8
1.1.2 Elektron	10
1.1.3 Aproximace v teorii chemické vazby	10
1.1.3.1 Zanedbání vnějších polí	11
1.1.3.2 Zanedbání relativistických efektů	11
1.1.3.3 Zanedbání neelektrostatických interakcí	11
1.1.3.4 Jednoelektronová aproximace	12
1.1.4 Přesná řešení v teorii chemické vazby	13
1.1.4.1 Volný elektron	13
1.1.4.2 Elektron v potenciálové jámě	14
1.1.4.3 Elektron v periodickém potenciálovém poli	17
1.1.4.4 Elektron v krabici	21
1.1.4.5 Elektron v poli jednoho jádra	22
1.1.4.6 Elektron v poli dvou stejných jader	23
1.1.5 Víceelektronové systémy	24
1.1.5.1 Pertubační metoda	25
1.1.5.2 Variační metoda	25
1.1.5.3 Interakce mezi elektrony	25
1.1.5.4 Efektivní potenciály	28
1.2 Vazba v pevných látkách	29
1.2.1 Model téměř volných elektronů	30
1.2.1.1 Model volných elektronů	30
1.2.1.2 Interakce s ionty	32
1.2.1.3 Mezielektronové interakce	34
1.2.2 Model těsně vázaných elektronů	34
1.2.2.1 Model MO - LCAO	34
1.2.2.2 Hybridizace atomových orbitalů	37
1.2.2.3 Krystalové orbitály	37
1.2.3 Srovnání přístupů NFE a TBE	38
1.3 Semiempirické přístupy k vazbě pevných látek	39
1.3.1 Vazebné typy	40
1.3.2 Elektronegativita	42
1.3.3 Vazebná energie a Bornův-Haberův cyklus	44
1.3.4 Iontový model	46
1.3.4.1 Ionizační potenciál a elektronová afinita	50
1.3.4.2 Iontové poloměry	52
1.3.4.3 Odhad stability iontových sloučenin	53
1.3.4.4 Použitelnost iontového modelu	55
1.3.5 Model kovalentní vazby	56
1.3.6 Model kovové vazby	57

2. ATOMÁRNÍ STRUKTURA ANORGANICKÝCH MATERIÁLŮ	60
2.1 Ideální krystal	60
2.1.1 Symetrie krystalových struktur	61
2.1.1.1 Symetrie rovinných mřížek	63
2.1.1.2 Symetrie prostorových mřížek	70
2.1.1.3 Mikroskopická symetrie	74
2.1.1.4 Strukturní typy	77
2.1.2 Faktory ovlivňující koordinaci atomů	78
2.1.2.1 Vazebný faktor	78
2.1.2.2 Geometrický faktor	79
2.1.2.3 Valenční faktor	84
2.1.2.4 Stechiometrický faktor	86
2.2 Reálné krystalické látky	88
2.2.1 Klasifikace poruch krystalové struktury	90
2.2.1.1 Bodové poruchy	90
2.2.1.2 Plošné poruchy	92
2.2.1.3 Povrch	93
2.2.1.4 Tenké vrstvy	95
2.2.1.5 Objemové poruchy	95
2.2.2 Vibrační pohyb atomů	96
2.3 Nekrystalické materiály	99
3. VLASTNOSTI ANORGANICKÝCH MATERIÁLŮ	101
3.1 Mechanické vlastnosti	102
3.1.1 Elastická deformace	103
3.1.2 Plastická deformace	104
3.1.3 Fázová přeměna	107
3.1.4 Lom	108
3.1.5 Vliv vazebného typu a atomární struktury	110
3.1.6 Pevné a tvrdé materiály	112
3.1.7 Kompozitní materiály	115
3.2 Elektrické vlastnosti	116
3.2.1 Vodiče	117
3.2.2 Supravodiče	119
3.2.3 Polovodiče	120
3.2.3.1 Vlastní vodivost	121
3.2.3.2 Příměsová vodivost	123
3.2.3.3 Amorfni polovodiče	126
3.2.4 Izolanty	127
3.2.4.1 Polarizace dielektrik	127
3.2.4.2 Feroelektrické materiály	129
3.2.4.3 Piezoelektrické materiály	131
3.2.5 Iontové vodiče	133
3.2.6 Elektronová struktura přechodů	135
3.2.6.1 Přechod vodič - vodič	135
3.2.6.2 Přechod polovodič - polovodič	136
3.2.6.3 Přechod vodič - polovodič	137
3.2.6.4 Přechody izolantů	138

3.2.6.5	Vícevrstvé přechody	139
3.3	Magnetické vlastnosti	140
3.3.1	Diamagnetismus	141
3.3.2	Paramagnetismus	142
3.3.3	Feromagnetismus	143
3.3.4	Ferimagnetismus	144
3.3.5	Další typy magnetického uspořádání	146
3.3.6	Magnetické materiály	146
3.3.6.1	Magneticky měkké materiály	146
3.3.6.2	Magneticky tvrdé materiály	148
3.4.	Optické vlastnosti	149
3.4.1	Optická odrazivost materiálů	150
3.4.2	Optická absorpce materiálů	152
3.4.2.1	Barva materiálů	152
3.4.2.2	Materiály vykazující fotoefekty	155
3.4.3	Optická propustnost materiálů	156
3.4.4	Optická emise materiálů	158
3.4.4.1	Tepelná emise	158
3.4.4.2	Luminofoxy	158
3.4.4.3	Lasery	160
3.5.	Chemická reaktivita materiálů	161
3.5.1	Termodynamické hnací síly	162
3.5.2	Kinetika reakcí materiálů	164
3.5.2.1	Difúze	164