

# Požadavky z materiálové chemie ke státní doktorské zkoušce programu Chemie se specializací v oboru Materiálová chemie

## Struktura materiálů:

Chemická vazba. Základní typy vazeb v pevných látkách. Energie vazeb. Mřížková energie. Born-Haberův cyklus. Atomové a iontové poloměry.

Prostorová mřížka, Bravaisovy mřížky, krystalová mřížka, reciproká mřížka. Základní strukturní typy kovů, iontových a kovalentních sloučenin. Primitivní, tělesně a plošně centrované kubické uspořádání. Hexagonální a kubické nejtěsnější uspořádání.

Strukturní typy CsCl, NaCl, kubický a hexagonální diamant, ZnS-sfalerit a wurzite, NiAs, WC, CaF<sub>2</sub>, TiO<sub>2</sub>-rutil, SiO<sub>2</sub>, BiF<sub>3</sub>, ReO<sub>3</sub>, perovskit, spinel, korund, vrstevnaté struktury, CdCl<sub>2</sub>, grafit, h-BN. Silikáty. Allotropie a polymorfie.

Poruchy ve struktuře. Defekty bodové, čárové, plošné, klastrové. Dislokace. Nestechiometrie. Hranice zrn. Amorfni materiály.

Elektronová struktura pevných látek, Drudeho model elektronového plynu, elektrická a tepelná vodivost elektronového plynu, Sommerfeldův model, Fermiho sféra, elektronové vlnové funkce, hustota stavů, nábojová hustota, elektrony v periodickém potenciálu, pásová struktura, Fermiho plocha. Charakteristika kovu, polovodiče, izolantu. Souvislost mezi elektronovou strukturou a krystalickou strukturou materiálů.

Kmity krystalové mřížky, klasický popis harmonického krystalu, akustické a optické fonony, interakce fononů s elektromagnetickým polem, polaritony, elementy kvantového popisu, Debyeho model.

Fázové a chemické rovnováhy. Fyzikální přeměny čistých látek. Jednoduché směsi. Rovnovážné fázové diagramy. Chemická rovnováha.

## Vlastnosti materiálů:

Elektrické vlastnosti materiálů. Vodiče. Polovodiče, dopování, p-n přechod, bipolární tranzistor, unipolární tranzistor. Izolanty. Iontové vodiče, tuhé elektrolyty. Supravodiče. Termoelektrické materiály. Organické vodiče. Feroelektrika. Piezoelektrika. Nanostrukturované materiály.

Mechanické vlastnosti materiálů. Tah, smyk, krut. Napětí a deformace. Elastická a plastická deformace. Hookův zákon. Pevnost. Tečení, lom, únava, tvrdost. Tvorba a šíření trhlin. Zpevňování. Vysoce tvrdé materiály.

Tepelné vlastnosti materiálů. Teplota tání, tepelná vodivost, tepelná roztažnost. Materiály s negativním koeficientem tepelné roztažnosti.

Optické vlastnosti materiálů. Index lomu, odrazivost, absorpce, propustnost. Lasery. Optická vlákna.

Magnetické vlastnosti materiálů. Feromagnetické, ferimagnetické, antiferomagnetické materiály. Molekulární magnety. GMR. CMR.

Principy, techniky a výsledné informace získané základními metodami fyzikálně chemické charakterizace materiálů: rentgenová prášková difrakce, neutronová difrakce, SAXS, termická analýza TG, DTA, DSC, NMR v pevné fázi, EPR, vibrační spektroskopie (infračervená a Ramanova), NIR, optická mikroskopie, SEM, TEM, EDAX, AFM, SPM, EXAFS, XANES, Augerova spektroskopie, LEED, SIMS, měření pevnosti a tvrdosti. Adsorpční metody. Metody pro měření velikosti částic a velikosti pórů.

## Příprava materiálů:

Základní technologie výroby kovů, rafinace kovů, vliv nečistot na vlastnosti kovů, sornční rafinační procesy, extrakční rafinační procesy, rozdělovací rovnováha.

Fe-C fázový diagram. Základní typy železných slitin. Litina. Ocel, strukturní složky ocelí. Třídy materiálů, legované oceli, ovlivňování struktury ocele – tepelné zpracování.

Základní typy neželezných slitin. Pájky, slitiny lehkých kovů, slitiny se střední teplotou tání, slitiny s vysokou teplotou tání.

Intermetalické sloučeniny. Speciální kovové materiály. Kompozity, porézní kovy, nanokrystalické kovové materiály, kovová skla, svařování kovů, slinuté kovy, prášková metalurgie, příprava nanočástic.

Struktura a názvosloví polymerů. Přírodní a syntetické polymery. Molekulární hmotnost a distribuce makromolekul. Vztahy mezi strukturou polymerů a jejich vlastnostmi. Termodynamické podmínky vzniku makromolekul. Reakční kinetika a mechanismy přípravy. Chemické reakce polymerů. Reologie a zpracování polymerů. Degradace a stabilizace polymerů. Kompozitní materiály s polymerní maticí.

Příprava polymerů. Monomery. Iniciační reakce. Propagace. Radikálové polymerace. Aniontové polymerace. Kationtové polymerace. Koordinační polymerace. Kopropagace a kopolymery. Terminační reakce a přenos. Kinetika polymerací. Řetězové reakce. Polykondenzace, násobná polyadice.

Reakce v pevné fázi. Difúze, Fickovy zákony. Nukleace homogenní a heterogenní. Rychlost chemických reakcí a parametry ovlivňující reakční rychlost. Kirkendallův poměr. Kinetika komplexních reakcí. Procesy na tuhých

površích. Karbotermální redukce. Samoudržitelné reakce. Spalné reakce. Pyrolýza polymerů. Mechanochemická metoda. Reakce v mikrovlnném poli. Reakce za vysokých tlaků. Syntéza diamantů a tvrdých materiálů. Přenos v plynné fázi. Pyrolýza aerosolů. Příprava fullerenu a uhlíkových nanotrubic. Metoda prekurzorů, koprecipitace, citrátová metoda. Reakce v eutektických taveninách. Iontové kapaliny. Sonochemické reakce. Sol-gelová metoda. Koloidní a alkoholátová metoda. Syntéza prekurzorů, hydrolyza, kondenzace, sušení, vypálení. Aerogely. Hybridní materiály. Hydrotermální a solvotermální syntéza. Reaktory, mineralizátor, superkritický stav. Zeolity a zeolitické materiály. Hlinitokřemičitany, metalofosfáty. Syntéza, struktura, vlastnosti a použití. Primární a sekundární stavební jednotky. Sodalit, faujasit, Linde A, X, Y. Templátová syntéza. Löwensteinovo pravidlo. Katalytické vlastnosti zeolitů. Mezoporézní materiály, tenzidy, tvorba micel, lyotropní fáze. Supramolekulární templátování. Vrstevnaté materiály, interkalace. Příprava materiálů v požadovaném tvaru. Ingoty, kuličky, prášky, krystaly, tenké vrstvy a filmy, vlákna, trubice, whiskery, póry, kvantové body. Metody přípravy monokrystalů. Czochralského, Stockbargerova a Bridgmanova metoda, zonální tavení, Verneuilova metoda, hydrotermální metoda, pěstování krystalů z roztoku, gelu, plynné fáze. Chemická depozice z plynné fáze. Aparatury. Syntéza a vlastnosti prekurzorů. Depozice kovů, oxidů, nitridů, polovodičů, supravodičů. Příprava tenkých filmů. Chemická depozice, anodická oxidace, porézní alumina, napařování, nastříkávání, epitaxe. Monomolekulární samspořádané vrstvy. Nanostrukturální materiály. Odlišnosti ve fyzikálních a chemických vlastnostech od makroskopických materiálů. Metody přípravy. Biokompatibilní materiály. Kombinatorická syntéza nových materiálů.

### **Vybraná literatura:**

- Müller, Ulrich. Inorganic Structural Chemistry. 2. vyd. : John Wiley & Sons., 1993.
- Callister, William D., Jr. Materials Science and Engineering, An Introduction. 4. vyd. : John Wiley and Sons, 1997.
- Schubert, Ulrich - Hüsing, Nicola. Synthesis of Inorganic Materials. Weinheim : Wiley-VCH, 2000.
- Smart, Lesley - Moore, Elaine. Solid state chemistry : an introduction. 2. vyd. : London : Chapman & Hall, 1995.
- West, Anthony R. Basic Solid State Chemistry. Second Edition. Chichester : John Wiley & Sons, 1999.
- White, Mary Anne. Properties of Materials. Oxford University Press, NY, 1999.
- Weller, Mark. Inorganic Materials Chemistry. Oxford, UK : Oxford University Press, 1994.
- Atkins P. W.: Physical Chemistry, Oxford Univ. Press, Oxford 1990
- Atkins P. W., de Paula J.: Fyzikální chemie, VŠCHT Praha, Praha 2013
- Inorganic nanoparticles :synthesis, applications, and perspectives. Edited by Claudia Altavilla - Enrico Ciliberto. Boca Raton: CRC Press, 2011. xviii, 558. ISBN 9781439817612.