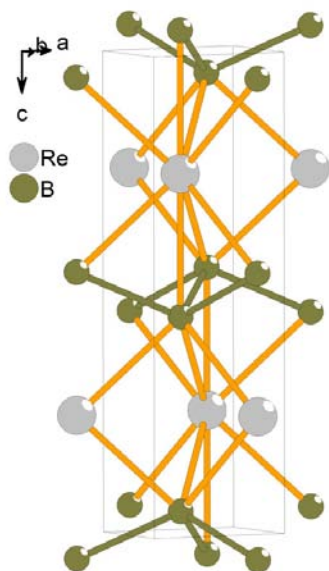




Proč je tvrdost krystalů závislá na jejich orientaci?

Nedávno uměle připravené krystaly ReB_2 a osmia OsB_2 jsou dostatečně tvrdé, aby se jimi poškrábal i povrch diamantu. Tuto velkou tvrdost, supertvrdost, však projevují pouze v některých směrech, při jiné orientaci krystalů je jejich tvrdost mnohem menší. Tuto neobvyklou vlastnost objasňuje teorie Antonína Šimůnka z Fyzikálního ústavu AV ČR v článku publikovaném v Rapid Communications srpnového čísla časopisu Physical Review B. Poměrně jednoduchá teorie může pomoci při vyhledávání dalších nových supertvrdých materiálů.



Tvrdost a pružnost materiálu jsou odlišné veličiny popisující vlastnosti pevné látky. Pružnost popisuje odpor materiálu při takovém stlačování či roztahování látky, při kterém se po uvolnění působících sil materiál vrátí zpět do původního tvaru podobně jako pružina po svém roztážení nebo stlačení. Naproti tomu tvrdost je veličina, která popisuje nevratnou změnu původního tvaru, jeho odpor vůči poškození způsobeném z mikroskopického pohledu posunutím atomů látky do jiných stabilních poloh. Tvrdost krystalu se měří pomocí zatím nejtvrďší známé látky, krystalkem diamantu a je experimentálně určena poměrem velikosti síly, kterou diamantovým hrotem působíme na povrch látky a velikostí plošného poškození povrchu měřeného vzorku.

Od roku 2005 jsou na světě uměle připravovány látky s velkou tvrdostí mezi něž patří také diboridy těžkých tranzitivních kovů, diborid rhenia ReB_2 a osmia OsB_2 . Tvrdost těchto krystalů se přibližuje tvrdosti diamantu, jejich výhodou ovšem je, že ve srovnání s diamantem není při jejich výrobě zapotřebí tak vysokých teplot a

tlaků a lze je využívat i tam, kde diamant použít nelze. Pozoruhodnou vlastností těchto diboridových krystalů ovšem je, že jejich tvrdost velice záleží na orientaci jejich krystalů vůči působícím silám. Krystaly tedy projevují velmi silnou anizotropii tvrdosti jejíž pochopení dosud chybělo.

Kontakt

Jiří Kocourek - specialista mediální komunikace

Odbor mediální komunikace Akademie věd ČR, Národní 3, 110 00 Praha 1

Telefon: +420 221 403 354; mobil: +420 733 785 077

E-mail: kocourek@ssc.cas.cz; www.press.avcr.cz



Závislost tvrdosti na orientaci krystalu tj. anizotropii tvrdosti poprvé objasňuje teorie Antonína Šimůnka z Fyzikálního ústavu AV ČR ve výše zmíněném článku. Už ve svých předchozích člancích z let 2006 a 2007 autor prezentoval metody, které umožňovaly výpočty tvrdosti krystalů, a to dokonce z prvních principů. Druhým zcela neočekávaným poznatkem odporujícím dosavadním názorům na mikroskopické chápání tvrdosti byl výsledek prokazující, že větší koordinační číslo tj. větší počet nejbližších atomů ve vazbě způsobuje menší tvrdost než v případě látek s nižším koordinačním číslem. V metodách z let 2006 a 2007 však byly všechny meziatomové vazby v krystalu započteny bez ohledu na jejich směrovanost. Důležitost směrovanosti vazeb sice byla zřejmá již tehdy, nebylo však jasné, jak tento fakt a efekt orientace krystalu vůči vnějšímu tlaku popsat.

Inspiraci k řešení problému směrovanosti přinesl A. Šimůnkovi článek v časopisu Science Vol.321 z července minulého roku. Autoři článku Lee, Wei, Kysar a Hone z Columbia University NY, USA, měřili elastické vlastnosti grafenu a zjistili, že grafen je nejpevnější látkou, která byla doposud změřena. Grafen je z atomového pohledu dvourozměrný krystal uhlíkových atomů, atomy vytvářejí rovinné, vzájemně propojené šestiúhelníky, takže každý atom má pouze tři nejbližší sousedy. Podobně jako mýdlovou bublinu, lze také grafenovou membránu prohýbat silou kolmou k membráně a měřit průhyb v závislosti na síle až k překročení elasticity a protržení membrány, přetržení meziatomových sil. Při tomto experimentu jsou meziatomové síly natahovány vnější silou, která je kolmá ke směru sil meziatomových tj. podobně jako je tomu při namáhání trampolíny vahou sportovce. Meziatomové vazby kolmé k působení vnější síly – a jiné meziatomové vazby grafen nemá – tedy určují pevnost grafenové membrány. Nabízí se zde domněnka, že i při stlačování normálního, trojrozměrného materiálu, mohou mít při jeho porušování struktury tvrdoměrem větší význam vazby mezi atomy, které jsou spíše kolmé ke směru tlaku a jsou tlakem napínány než vazby, které jsou se směrem tlaku rovnoběžné a stlačovány. I když dosavadní názor o tvrdosti vycházel z představy, že tvrdost určuje odpor atomů vůči zkracování meziatomových vzdáleností vnějším tlakem, ukázalo se, že zdravý selský rozum opět selhal.

Prvopřincipelní metoda prezentovaná v článku, ve které je při výpočtu tvrdosti daná větší váha vazbám příčným než vazbám podélným ke směru tlaku, velmi dobře kvantitativně určila tvrdost nejen zkoumaných diboridů. Výpočty tvrdosti jsou ve velmi dobrém souhlasu s naměřenými hodnotami a objasňují příčinu anizotropie tvrdosti látek. Jsou to nikoliv podélné ale příčné meziatomové vazby ke směru vnější síly, které jsou rozhodující pro velikost tvrdosti z daného směru. U diboridů ReB₂ a OsB₂ je největší tvrdost ve směru kolmém na vrstvy, ve kterých jsou silné vazby mezi atomy boru, které tak určující nejen velikost ale také směr, ve kterém je tvrdost těchto krystalů největší.

Spoluobjevitel tvrdosti diboridů tranzitivních kovů Richard Kaner z Kalifornské university v Los Angeles k srpnovému článku v Physical Review B 80, 060103(R) (2009) poznamenal: „*Na tomto článku je hezké to, že umožňuje výpočty, kterými lze sledovat tvrdost krystalu z libovolného směru. Je totiž velice obtížné měřit tvrdost v různých směrech.*”

Detailnější informace:

RNDr. Antonín Šimůnek, CSc., Fyzikálního ústavu AV ČR, v. v. i.

e-mail: simunek@fzu.cz, tel:+420 233 343 730

Kontakt

Jiří Kocourek - specialista mediální komunikace

Odbor mediální komunikace Akademie věd ČR, Národní 3, 110 00 Praha 1

Telefon: +420 221 403 354; mobil: +420 733 785 077

E-mail: kocourek@ssc.cas.cz; www.press.avcr.cz