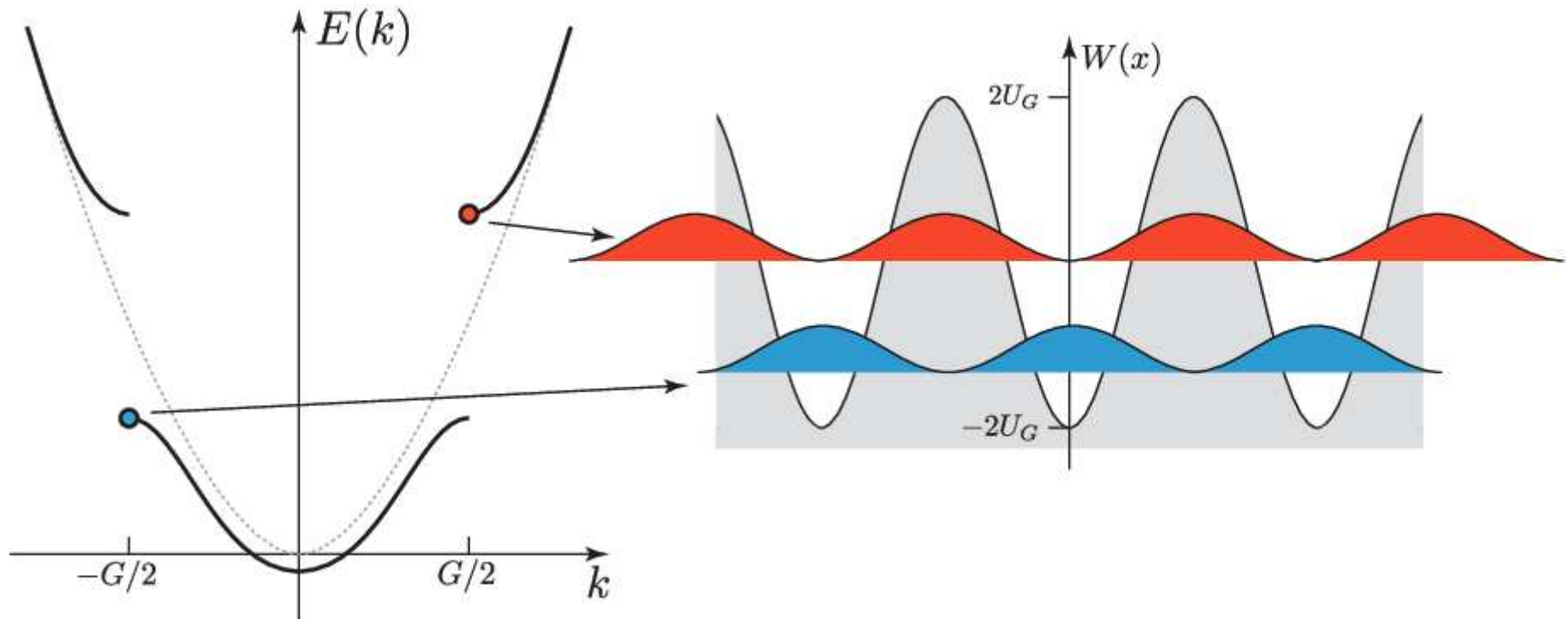


Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Co byste měli po dnešní přednášce umět:

- definovat a ve správných souvislostech použít termíny Blochův teorém a pásová struktura
- porovnat Drudeho a Sommerfeldův model volných elektronů
- vysvětlit elektronový příspěvek k měrnému teplu a porovnat jej z hlediska modelů volných a téměř volných elektronů
- pomocí Kronigova-Penneyova modelu objasnit vznik pásové struktury pevných látek
- na základě pásové teorie vysvětlit elektrické a optické vlastnosti kovů, polovodičů a izolantů



Atomová fyzika a elektronová struktura látek

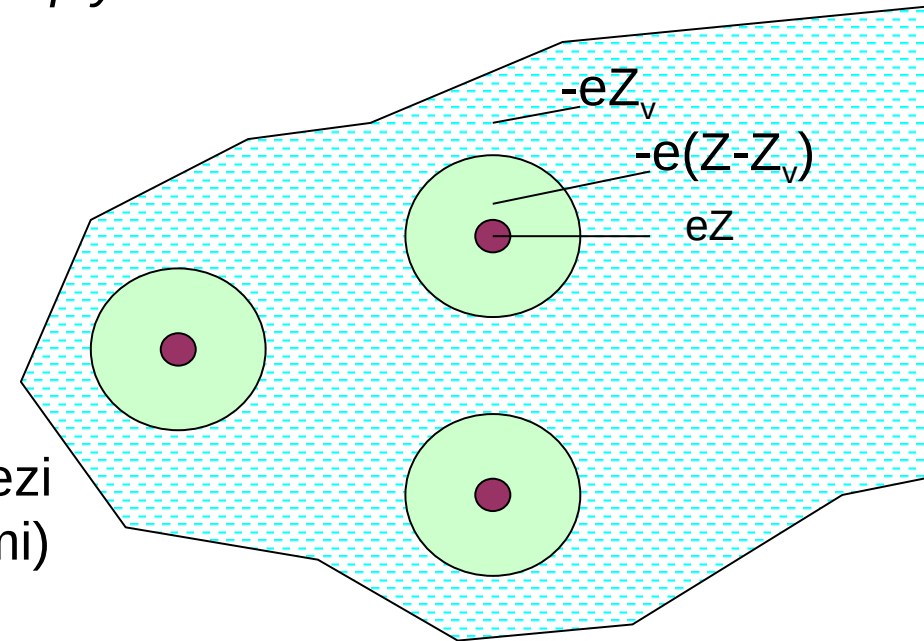
Elektronová struktura pevných látek – model volných elektronů

1897: J.J. Thomson - elektron jako částice

1900: **P. Drude**: kinetická teorie plynů - *kov jako plyn elektronů*

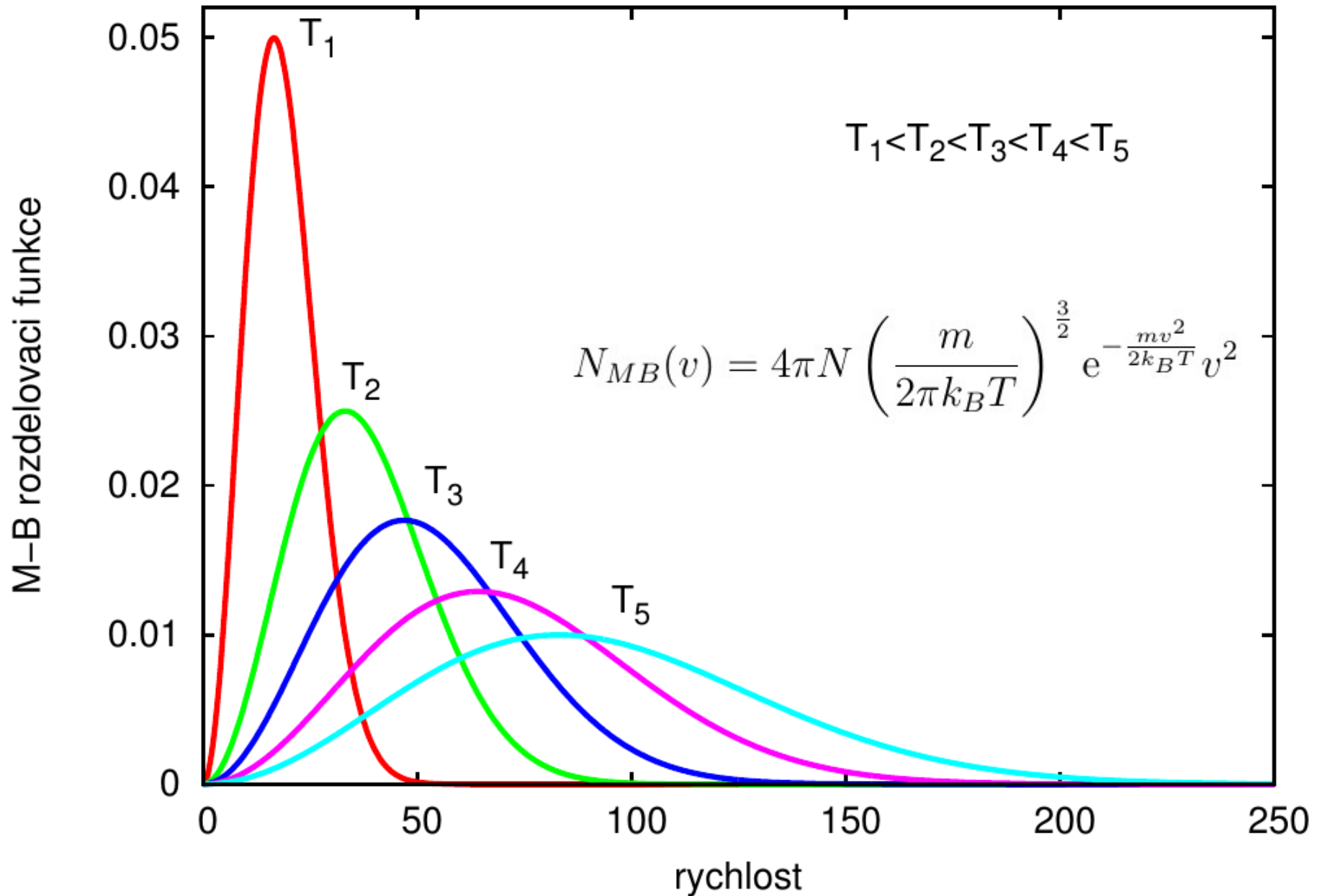
Drudeho model

- elektrony se mezi srážkami pohybují volně (není e-e interakce a interakce s kladným zbytkem)
- neustálé srážky (s jádry) - změny rychlosti elektronů
- pravděpodobnost srážky $\sim 1/\tau$ (τ = doba mezi srážkami)
- tepelná rovnováha díky srážkám (rychlost e^- daná teplotou v místě srážky)

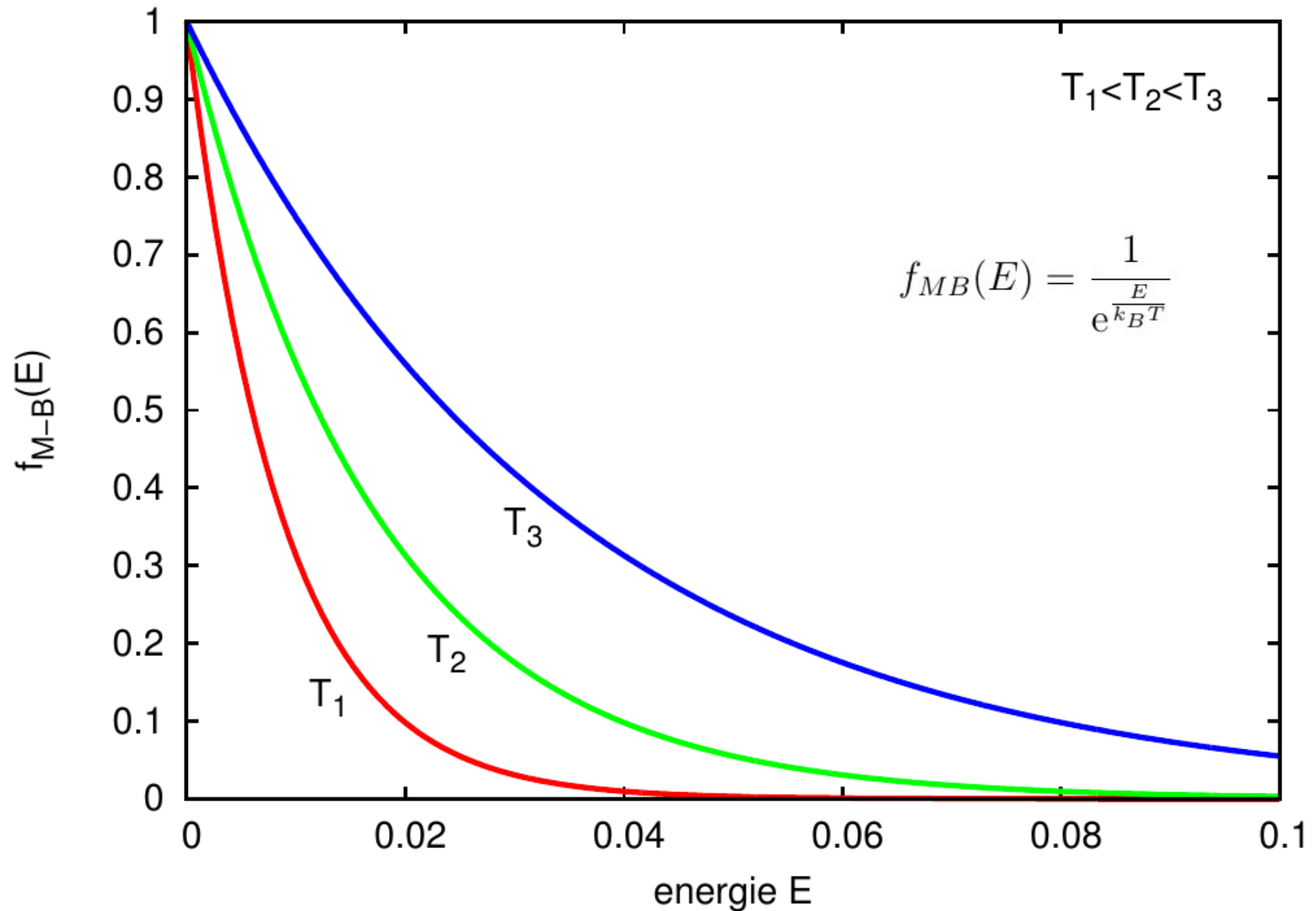


kov: valenční elektrony
→ vodivostní elektrony

Atomová fyzika a elektronová struktura látek



Atomová fyzika a elektronová struktura látek



Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Elektronová struktura pevných látek – model volných elektronů

1897: J.J. Thomson - elektron jako částice

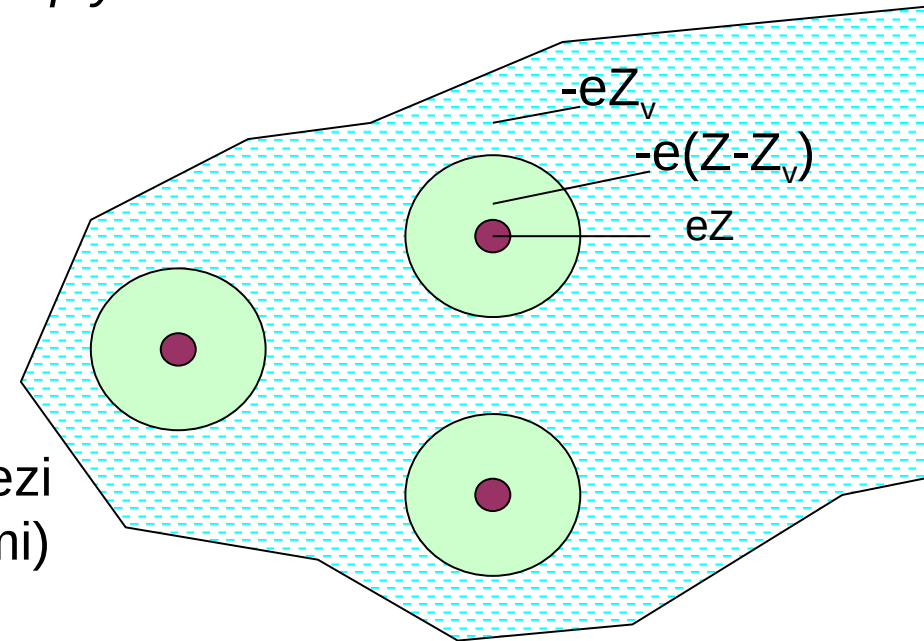
1900: **P. Drude**: kinetická teorie plynů - *kov jako plyn elektronů*

Drudeho model

- elektrony se mezi srážkami pohybují volně (není e-e interakce a interakce s kladným zbytkem)
- neustálé srážky (s jádry) - změny rychlosti elektronů
- pravděpodobnost srážky $\sim 1/\tau$ (τ = doba mezi srážkami)
- tepelná rovnováha díky srážkám (rychlost e^- daná teplotou v místě srážky)

+ el. vodivost, Ohmův zákon, Hallův jev
vztah el. a tepelné vodivosti (Wiedemann-Franz)

— měrné teplo $C \ll \frac{3}{2} Nk_B$



kov: valenční elektrony
→ vodivostní elektrony

$$\frac{\kappa}{\sigma} \approx C_V m v^2$$

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

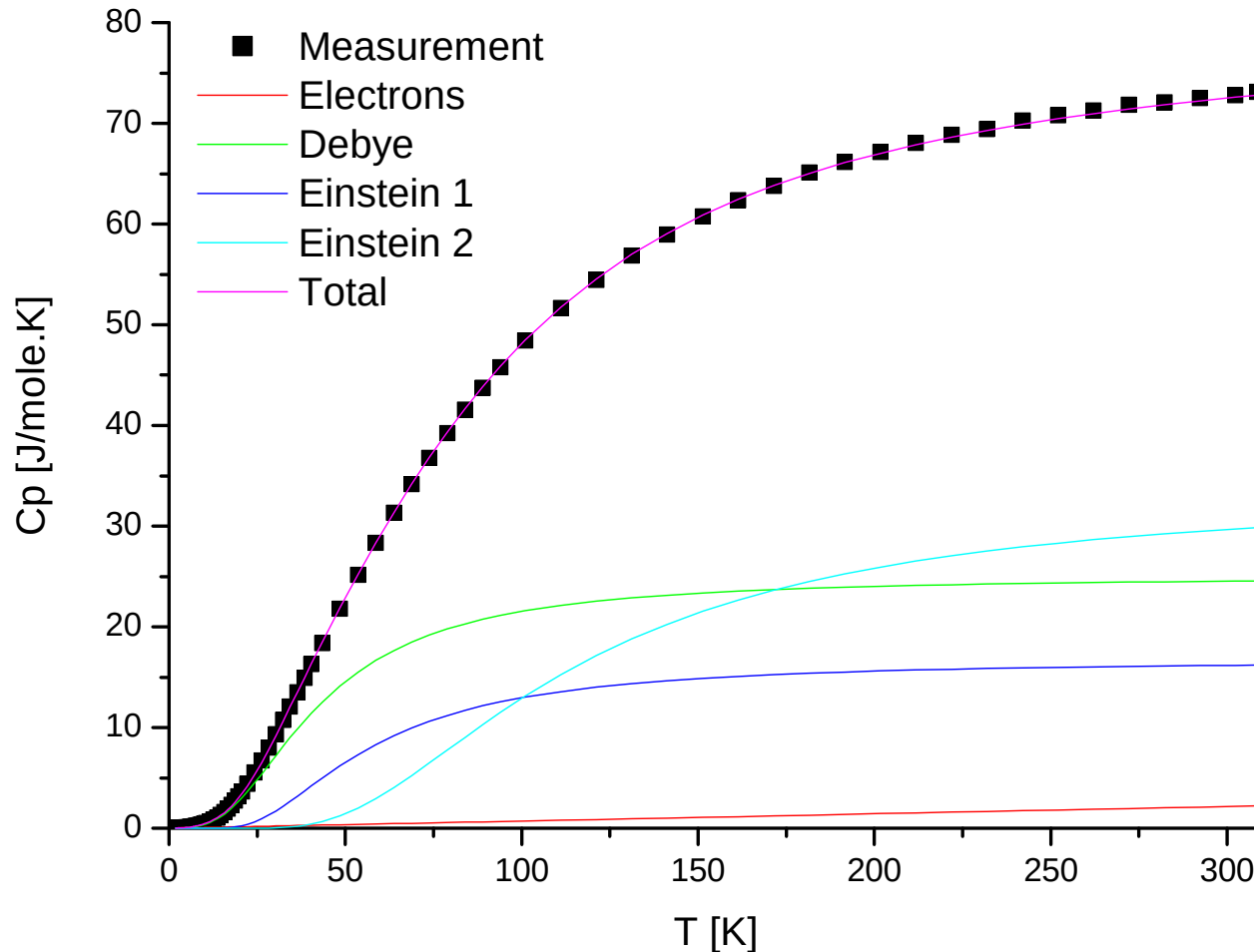
Vibrace jader atomů v krystalové mříži – fonony – měrné teplo

LuNiAl.... 3 atomy $\rightarrow n = 3$

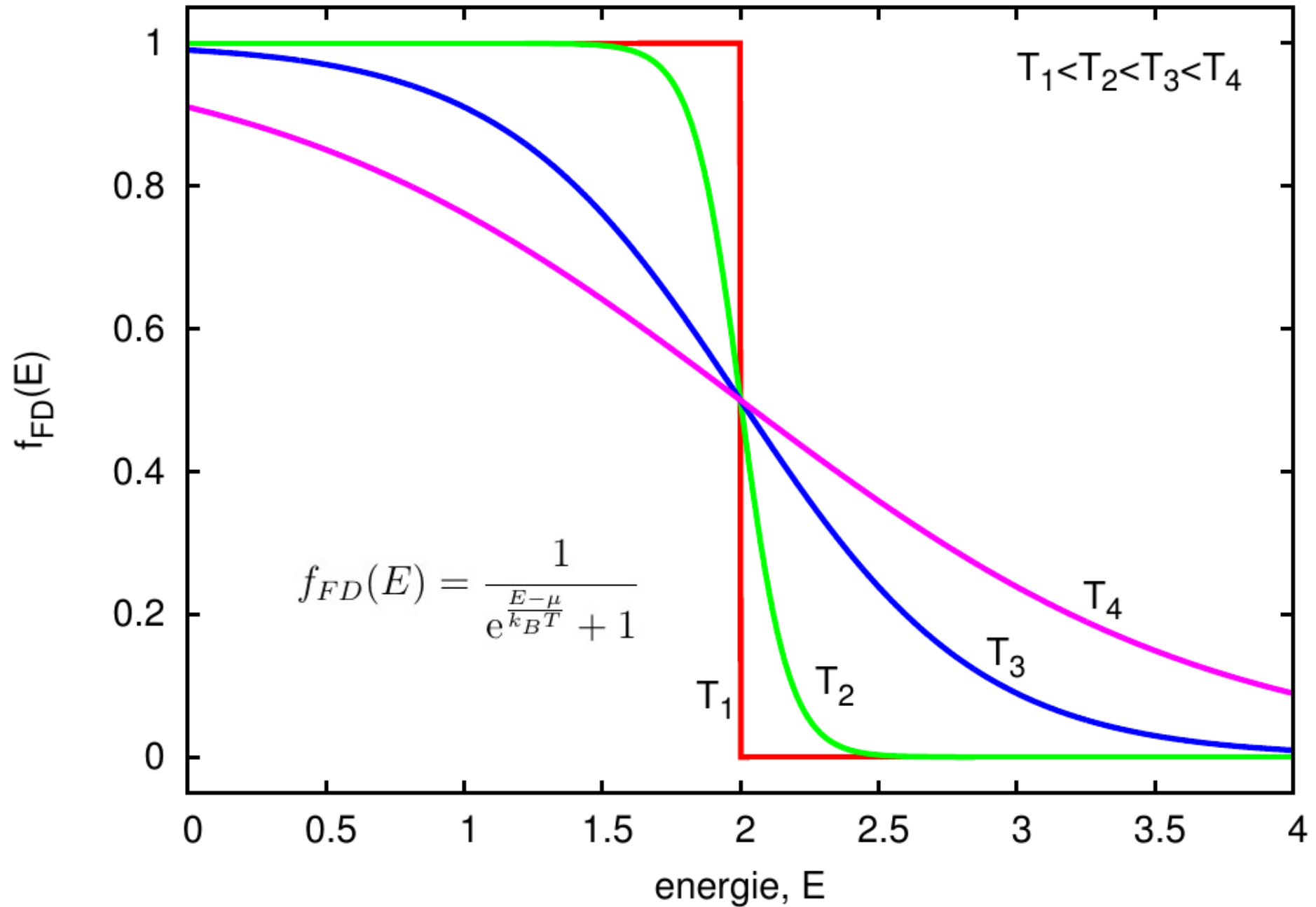
$3 \cdot n = 9$ fononových větví $\rightarrow$ 3 akustické a 6 optických

aproximace exp. dat pomocí 3 parametrů, každý popisuje 3 fononové větve

LuNiAl

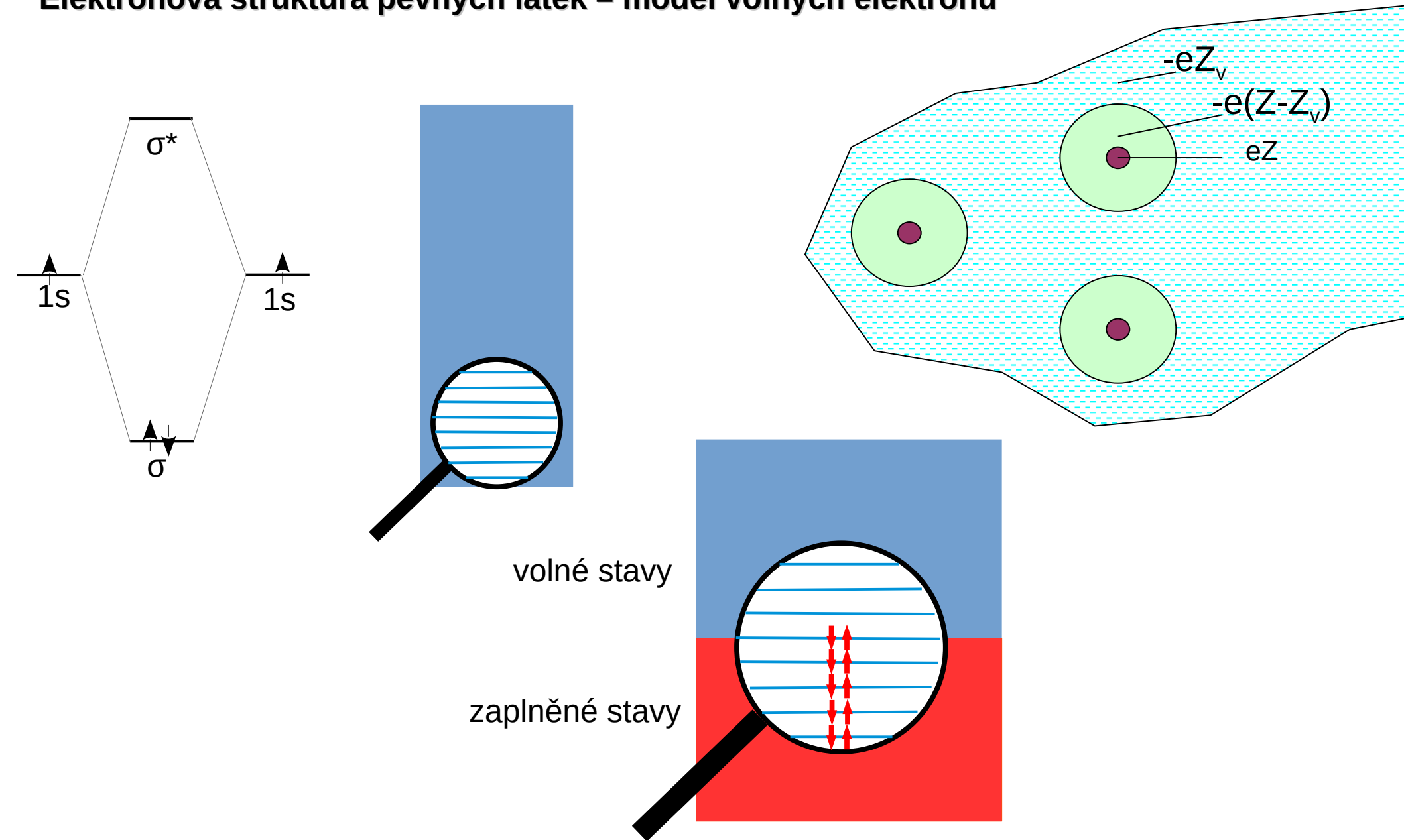


Atomová fyzika a elektronová struktura látek



Atomová fyzika a elektronová struktura látek

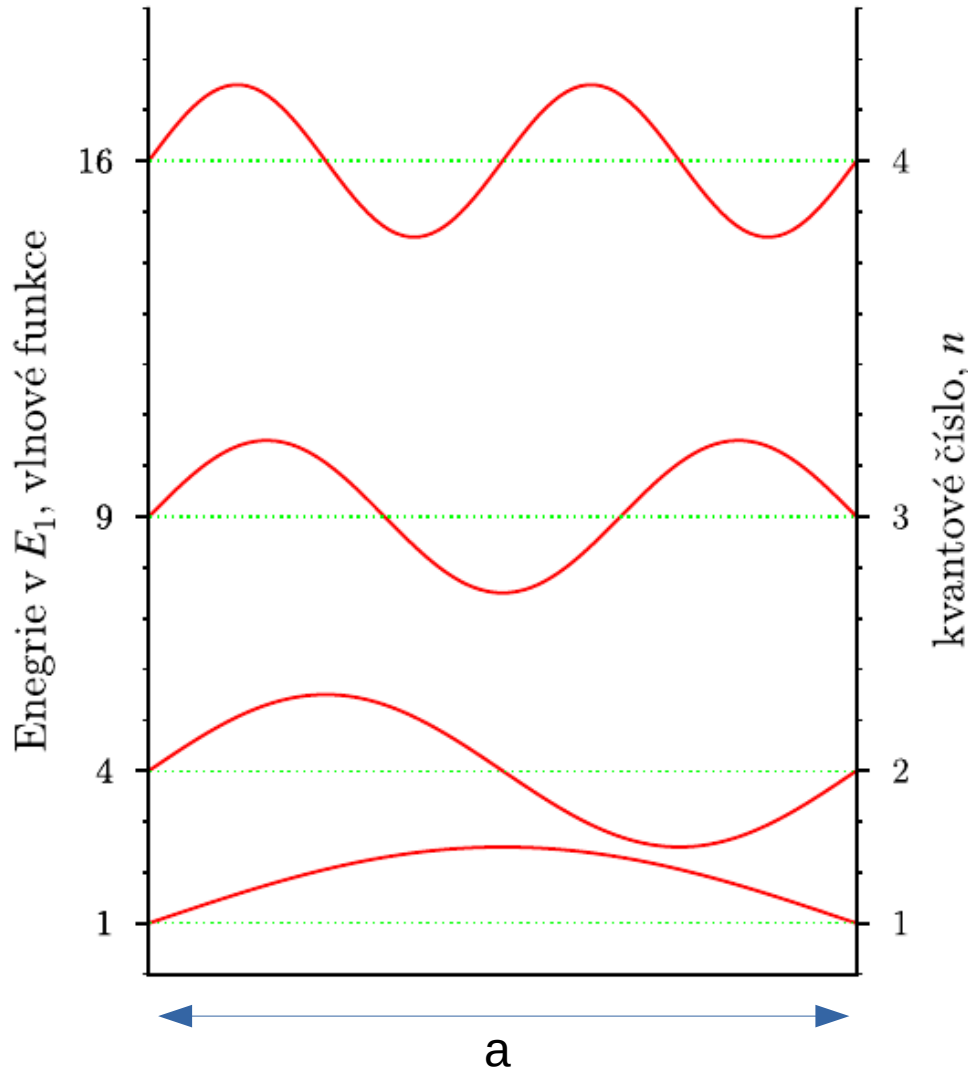
Elektronová struktura pevných látek – model volných elektronů



Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Elektronová struktura pevných látek – model volných elektronů

volné elektrony v nekonečné potenciálové jámě



$$H\psi_n = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2\psi_n}{dx^2} = E_n\psi_n$$

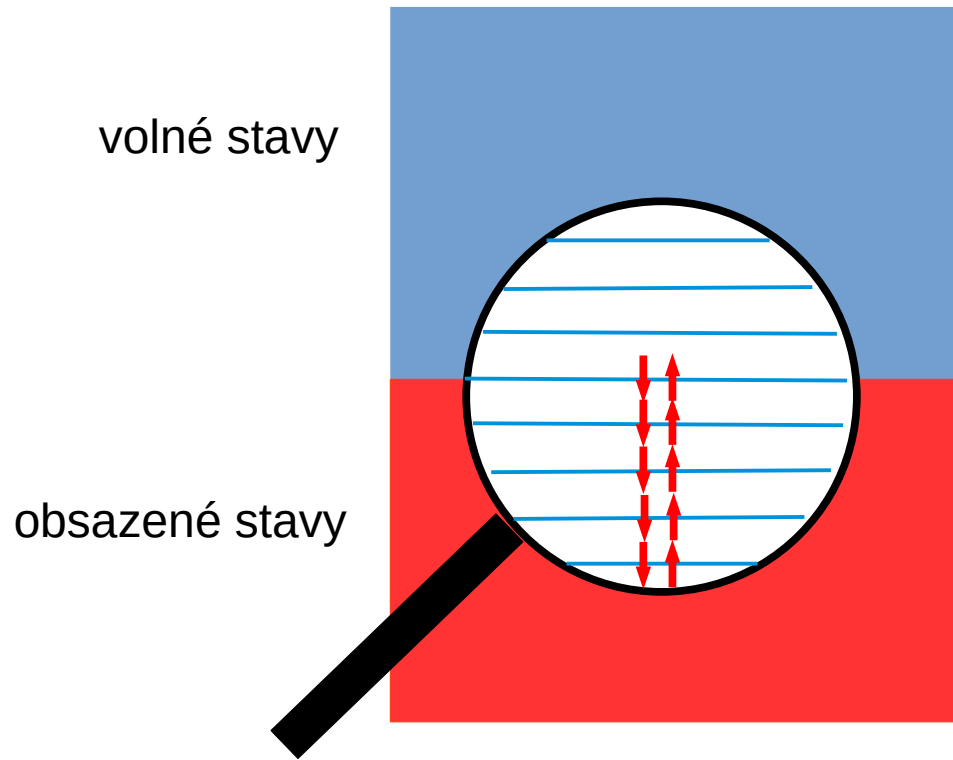


$$\psi_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a}, \quad n = 1, 2, \dots$$

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_e a^2} n^2, \quad n = 1, 2, \dots$$

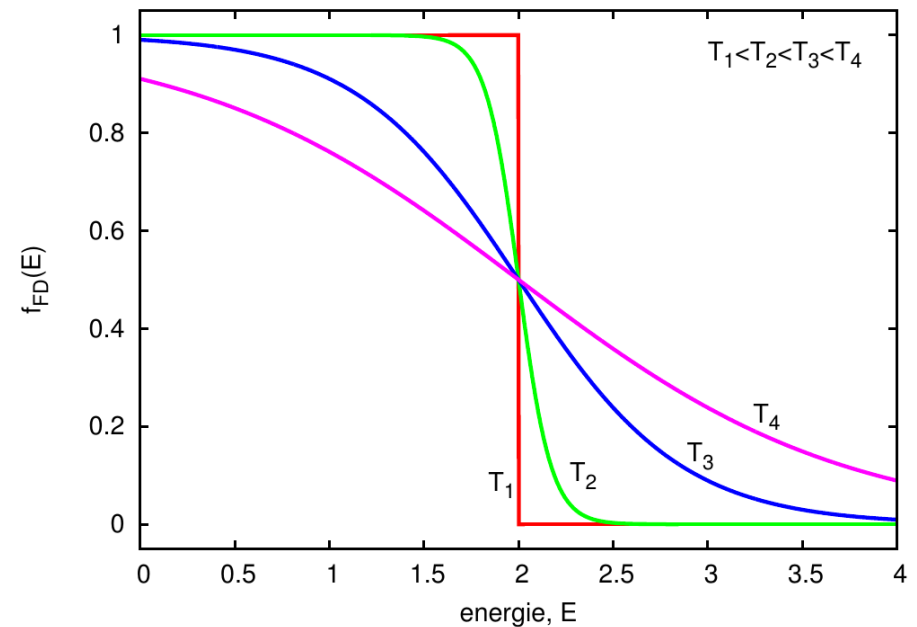
Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Cu 4s¹



$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_e a^2} n^2, \quad n = 1, 2, \dots$$

$$E_F = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_e a^2} \left(\frac{N}{2} \right)^2$$



Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Elektronová struktura pevných látek – model volných elektronů

Sommerfeldův model

kvantový popis elektronového plynu

klasický popis: Maxwell-Boltzmannovo rozdělení

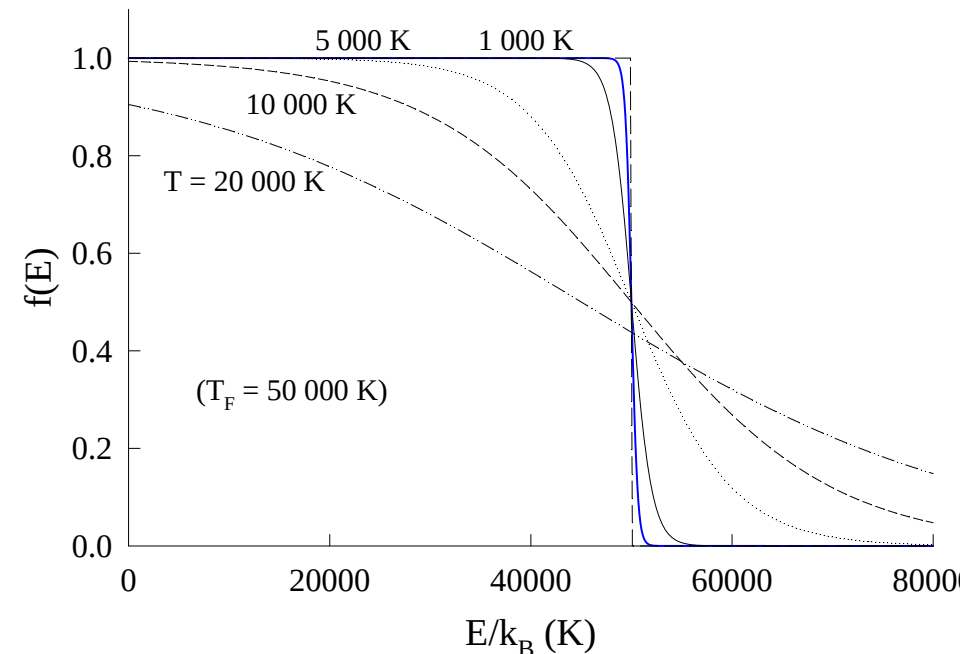
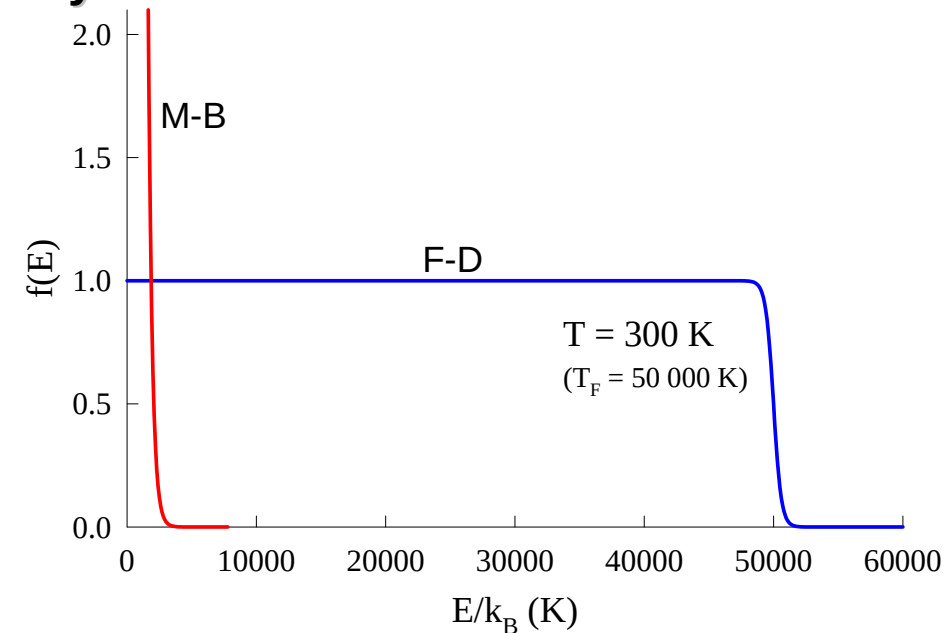
$$f(E) = \textit{konst} \times e^{-\frac{E}{k_B T}}$$

kvantový popis: Fermi-Diracovo rozdělení

$$f(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{k_B T}} + 1}$$

$T = 0 \text{ K} \rightarrow \mu = E_F$ (chemický potenciál)

aplikace na elektronový plyn



Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Elektronová struktura pevných látek – elektronový plyn

(bez e⁻-e⁻ interakce a interakce s ionty)

v krystalu N elektronů v objemu V (L³)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r})$$

$$\psi_k(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$$

$$E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

$$\vec{p} = \hbar \vec{k}$$

periodické okrajové podmínky (Born-Karman)

$$\psi(x + L, y, z) = \psi(x, y, z) \quad (\text{stejně pro } y \text{ a } z)$$

$$e^{ik_x L} = e^{ik_y L} = e^{ik_z L} = 1 \quad \longrightarrow \quad k_{x,y,z} = \frac{2\pi}{L} n_{x,y,z}$$

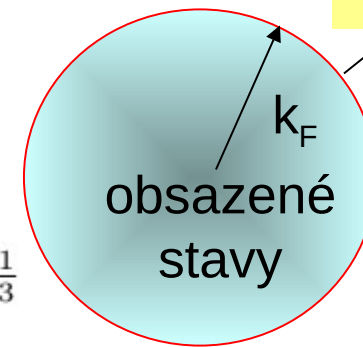
na jedno $\vec{k}$ připadá objem $\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3$

obsazené stavy: koule o poloměru k_F

$$N = \frac{4}{3} \pi k_F^3 \frac{V}{(2\pi)^3} 2 = \frac{V}{3\pi^2} k_F^3$$

spin

$$k_F = \left(3\pi^2 \frac{N}{V} \right)^{\frac{1}{3}}$$



Fermiho plocha

obsazené
stavy

neobsazené
stavy

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Elektronová struktura pevných látek – elektronový plyn

Fermiho energie: $E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} = \frac{e'^2}{2a_0} (a_0 k_F)^2 \quad v_F = \frac{\hbar}{m} k_F \quad T_F = \frac{E_F}{k_B}$

	$N/V(\text{cm}^{-3})$	$E_F(\text{eV})$	$T_F(\text{K})$	$v_F (\text{ms}^{-1})$
Li	4.7×10^{22}	4.72	54 800	1.29×10^6
Al	18.1×10^{22}	11.63	135 000	2.02×10^6

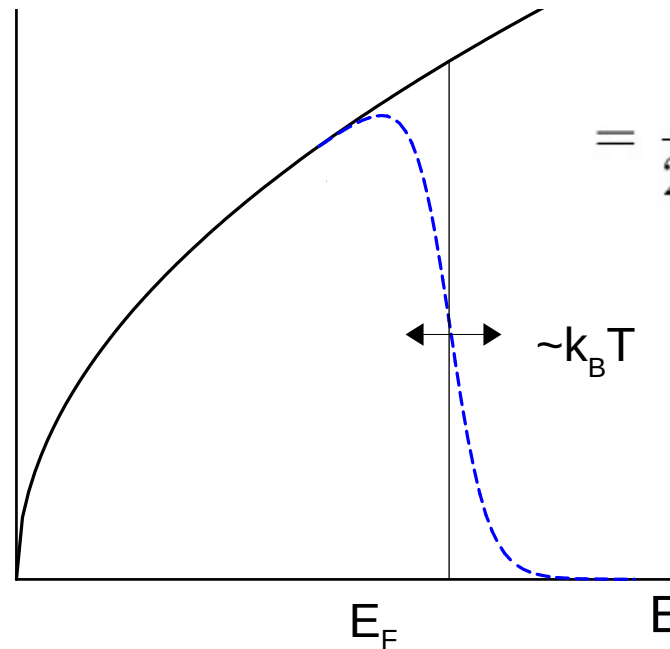
hustota stavů:

$$g(E) \equiv \frac{dN}{dE} = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} E^{\frac{1}{2}}$$

$$k, k + dk : \quad dN = 2 \times 4\pi k^2 dk \frac{V}{8\pi^3}$$

$$g(E_F) = \frac{3N}{2E_F}$$

$$= \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} E^{\frac{1}{2}} dE$$



Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Elektronová struktura pevných látek – tepelné vlastnosti elektronového plynu

stručně: $U \approx N \frac{T}{T_F} k_B T$ $C_{el} = \frac{\partial U}{\partial T} \approx N k_B \frac{T}{T_F} = N k_B^2 \frac{T}{E_F} \approx g(E_F) k_B^2 T$

$$U = \int_0^\infty E g(E) f(E) dE - \underbrace{\int_0^{E_F} E g(E) dE}_{\frac{3}{5} N E_F}$$

$$C_{el} = \frac{\partial U}{\partial T} = \int_0^\infty E g(E) \frac{\partial f}{\partial T} dE$$

$$\int_0^\infty g(E) f(E) dE = N$$

$$E_F \int_0^\infty g(E) f(E) dE = E_F N$$

$$0 = \frac{\partial N}{\partial T} E_F = \int_0^\infty E_F g(E) \frac{\partial f}{\partial T} dE$$

$$C_{el} = \frac{\partial U}{\partial T} = \int_0^\infty (E - E_F) g(E) \frac{\partial f}{\partial T} dE$$

$$\frac{k_B T}{E_F} < 0.01 \rightarrow \frac{\partial f}{\partial T} \gg 0 \quad \text{pro} \quad E \cong E_F$$

$$C_{el} = \frac{1}{3} \pi^2 g(E_F) k_B^2 T$$

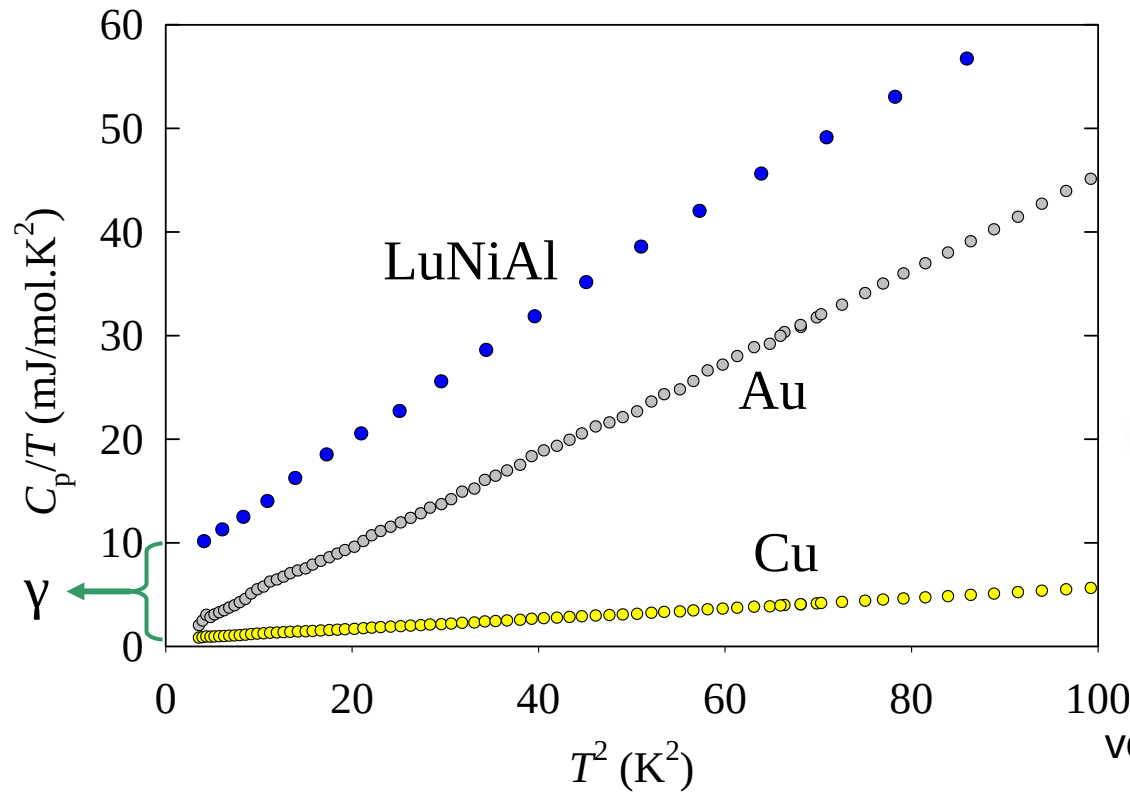
volné elektrony: $g(E_F) = \frac{3N}{2E_F}$

$$C_{el} = \frac{1}{2} \pi^2 N k_B \frac{k_B T}{E_F}$$

$$C_{el} = g(E_F) \int_0^\infty (E - E_F) \frac{\partial f}{\partial T} dE$$

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Elektronová struktura pevných látek – tepelné vlastnosti elektronového plynu



$$T \ll \theta_D \quad C_V = \gamma T + \beta T^3$$

$$\frac{C_V}{T} = \gamma + \beta T^2$$

$$E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m_e} \quad C_{el} = \frac{1}{2} \pi^2 N k_B \frac{k_B T}{E_F}$$

volné elektrony vs. reálné kovy

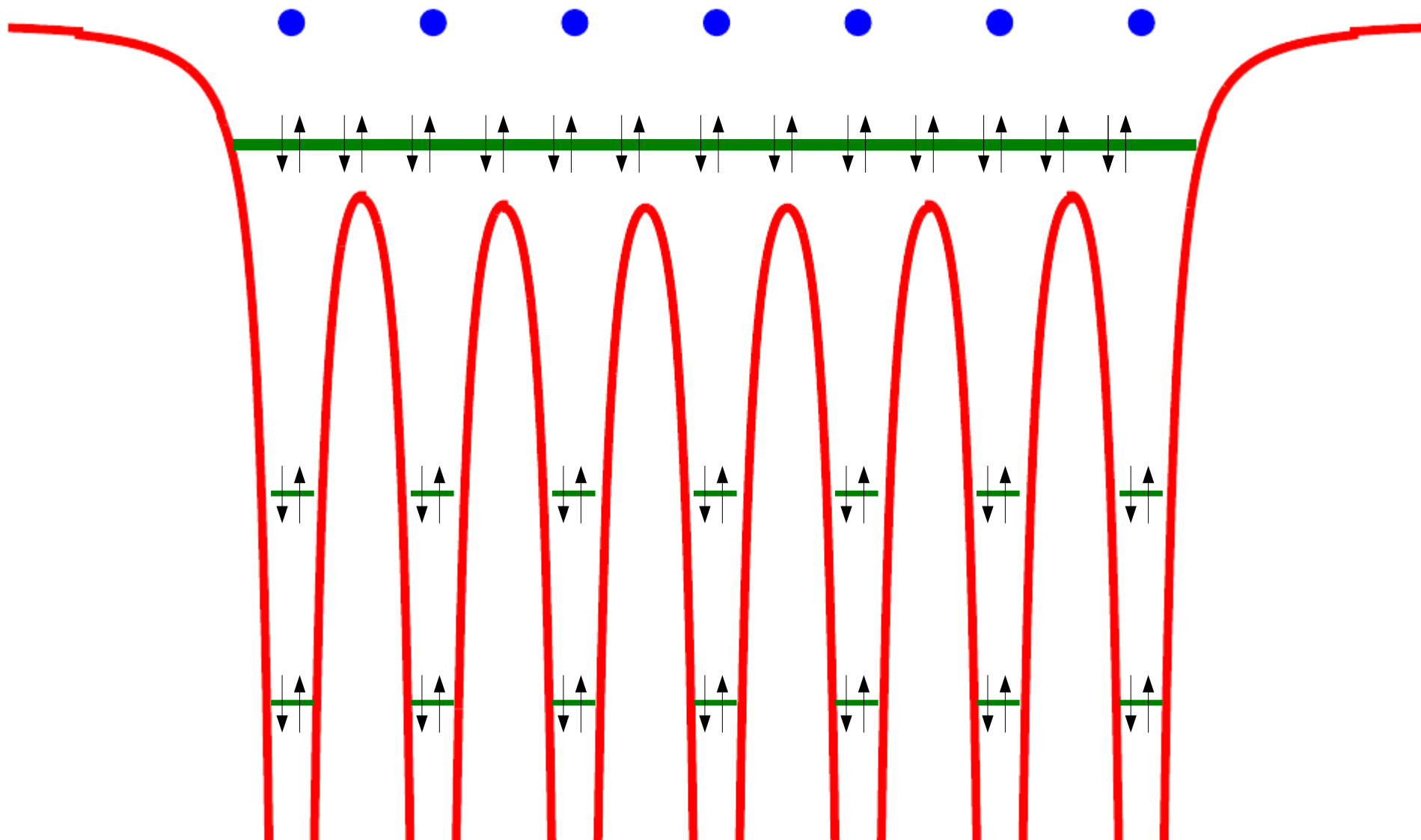
$\gamma (\text{mJ.mol}^{-1} \text{K}^{-2})$

efektivní hmotnost m^*

$$\frac{m^*}{m_e} = \frac{\gamma_{exp}}{\gamma_{volne}}$$

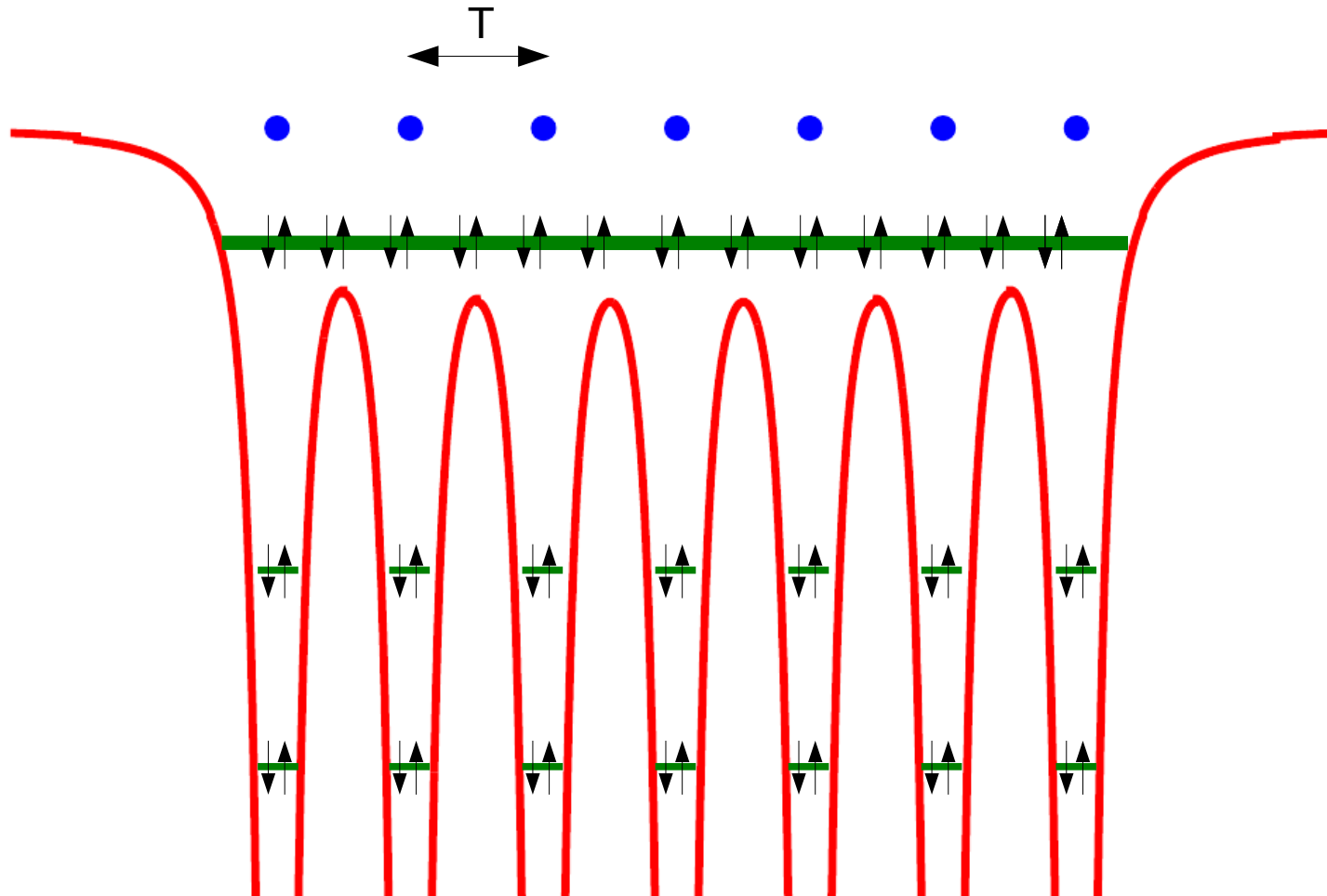
	Li	Na	K	Fe	Mn	Cu	Zn	Ag	Au	Al	Ga
volné el.	0.8	1.1	17	0.6	0.6	0.5	0.8	0.6	0.6	0.9	1.0
experiment	1.6	1.4	2.1	4.6	15.2	0.7	0.6	0.6	0.7	1.3	0.6

Atomová fyzika a elektronová struktura látek



Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Elektronová struktura pevných látek – model téměř volných elektronů



$$U(\vec{r}) = U(\vec{r} + \vec{T})$$

$$H\psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 + U(\vec{r}) \right) \psi = E\psi$$

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Elektronová struktura pevných látek – model téměř volných elektronů

Blochův teorém

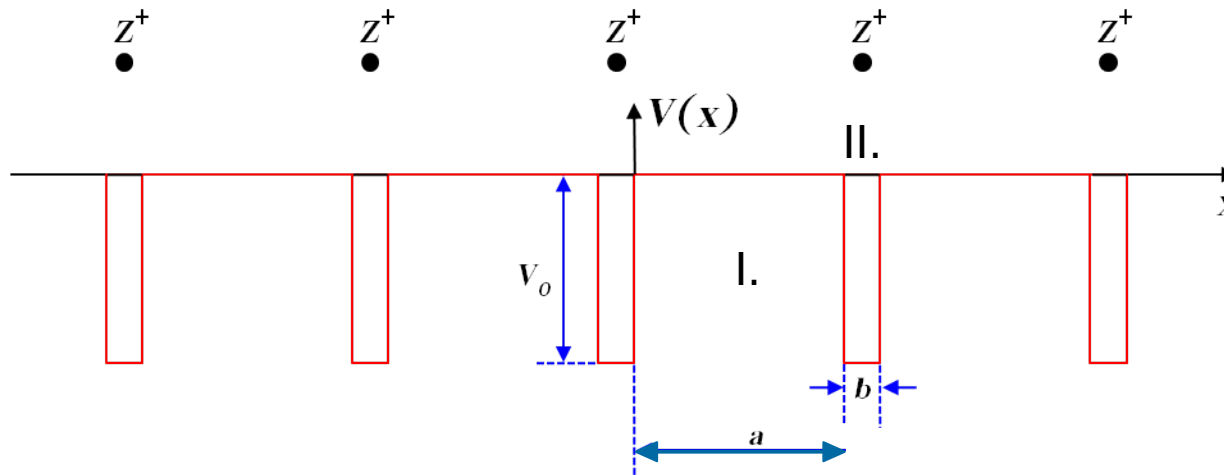
V dokonalém periodickém potenciálu krystalu lze napsat řešení Schrödingerovy rovnice ve tvaru rovinné vlny vynásobené periodickou funkcí, která má periodu shodnou s periodou krystalu.

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = u_{\vec{k}}(\vec{r})e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}, \quad u_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{T}) = u_{\vec{k}}(\vec{r})$$

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{T}) = \psi_{\vec{k}}(\vec{r})e^{i\vec{k}\cdot\vec{T}}$$

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Kronigův – Penneyův model



$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = u_{\vec{k}}(\vec{r})e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}, \quad u_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{T}) = u_{\vec{k}}(\vec{r})$$

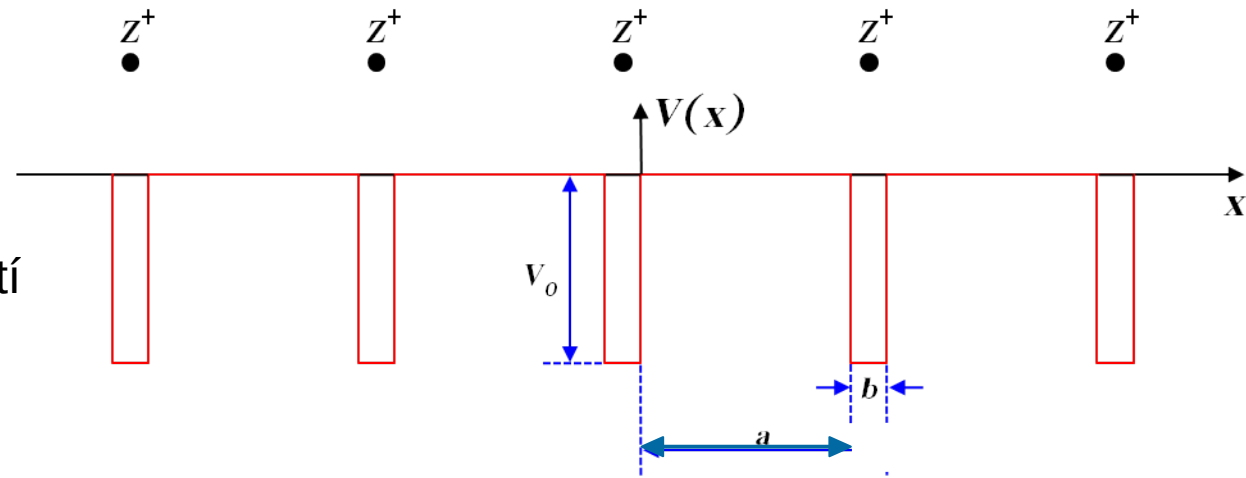
oblast I.: $-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi$ $\Psi_I(x) = Ae^{iKx} + Be^{-iKx}$

oblast II.: $-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V_0\psi = E\psi$ $\Psi_{II}(x) = Ce^{Qx} + De^{-Qx}$

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Kronigův – Penneyův model

spojitost ψ a $\frac{d\psi}{dx}$ na hranici oblastí



bod $x=0$

$$\begin{aligned}\psi_I(0) &= \psi_{II}(0) \\ \frac{d\psi_I}{dx} \Big|_{x=0} &= \frac{d\psi_{II}}{dx} \Big|_{x=0}\end{aligned}$$

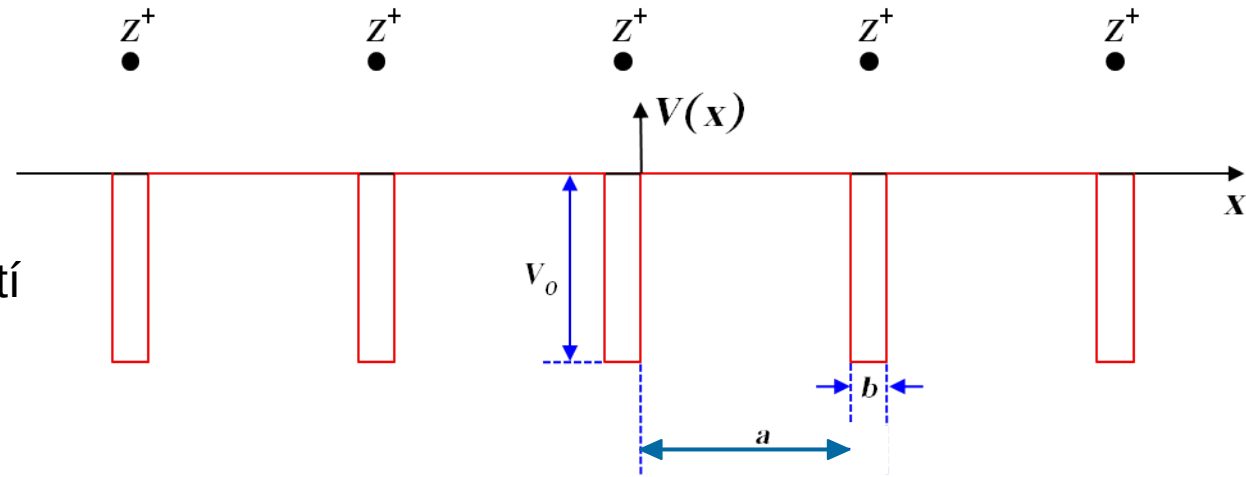
$$\begin{aligned}\Psi_I(x) &= Ae^{iKx} + Be^{-iKx} \\ \Psi_{II}(x) &= Ce^{Qx} + De^{-Qx}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}A + B &= C + D \\ iKA - iKB &= QC - QD\end{aligned}$$

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Kronigův – Penneyův model

spojitost ψ a $\frac{d\psi}{dx}$ na hranici oblastí



spojitost v $x=-b$ a $x=a$

$$\begin{aligned}\psi_I(-b) &= \psi_{II}(a) \\ \frac{d\psi_I}{dx} \Big|_{x=-b} &= \frac{d\psi_{II}}{dx} \Big|_{x=a}\end{aligned}$$

$$\Psi_I(x) = Ae^{iKx} + Be^{-iKx}$$

$$\Psi_{II}(x) = Ce^{Qx} + De^{-Qx}$$

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{T}) = \psi_{\vec{k}}(\vec{r})e^{i\vec{k} \cdot \vec{T}}$$

$$\begin{aligned}Ae^{iKa}e^{-ik(a+b)} + Be^{-iKa}e^{-ik(a+b)} &= Ce^{Qb} + De^{-Qb} \\ iKAe^{iKa}e^{-ik(a+b)} - iKBe^{-iKa}e^{-ik(a+b)} &= QCe^{Qb} - QDe^{-Qb}\end{aligned}$$

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Kronigův – Penneyův model

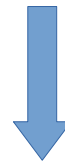
$$A + B - C - D = 0$$

$$iKA - iKB - QC + QD = 0$$

$$Ae^{iKa}e^{-ik(a+b)} + Be^{-iKa}e^{-ik(a+b)} - Ce^{Qb} - De^{-Qb} = 0$$

$$iKAe^{iKa}e^{-ik(a+b)} - iKBe^{-iKa}e^{-ik(a+b)} - QCe^{Qb} + QDe^{-Qb} = 0$$

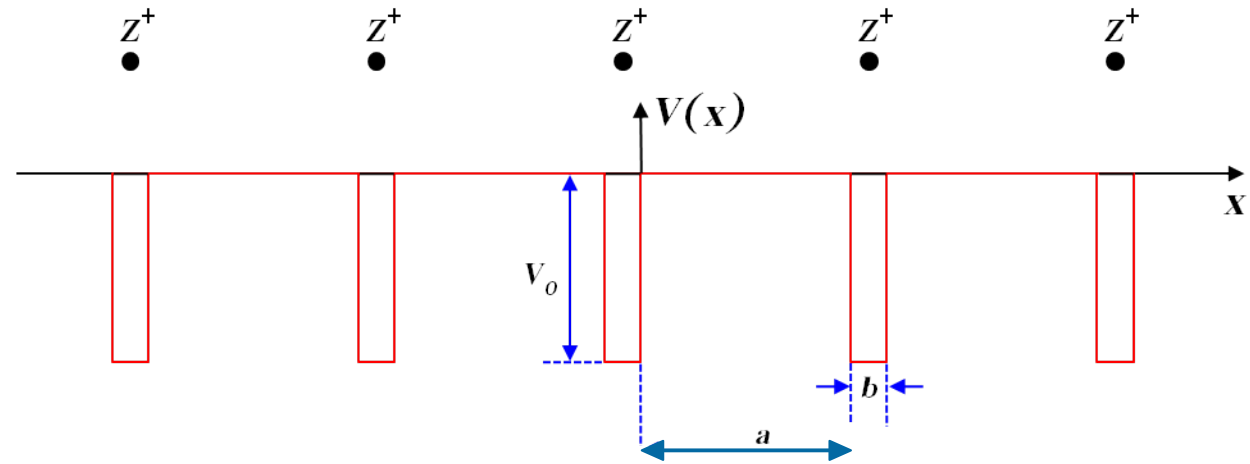
$$\det \begin{vmatrix} 1 & 1 & -1 & -1 \\ iK & -iK & -Q & Q \\ e^{iKa}e^{-ik(a+b)} & e^{-iKa}e^{-ik(a+b)} & -e^{Qb} & -De^{-Qb} \\ iKe^{iKa}e^{-ik(a+b)} & -iKe^{-iKa}e^{-ik(a+b)} & -Qe^{Qb} & Qe^{-Qb} \end{vmatrix} = 0$$



$$\frac{Q^2 - K^2}{2KQ} \sin(Ka) \sinh(Qb) + \cos(Ka) \cosh(Qb) = \cos(k(a+b))$$

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

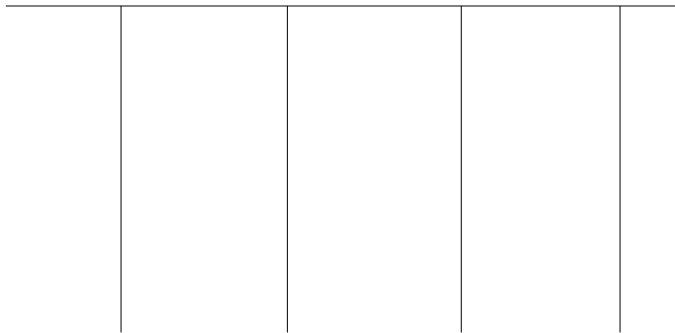
Kronigův – Penneyův model



$$\frac{Q^2 - K^2}{2KQ} \sin(Ka) \sinh(Qb) + \cos(Ka) \cosh(Qb) = \cos(k(a + b))$$

$$b \rightarrow 0 \quad V_0 \rightarrow \infty$$

$$P = \frac{Q^2 b a}{2} = \text{konst}$$

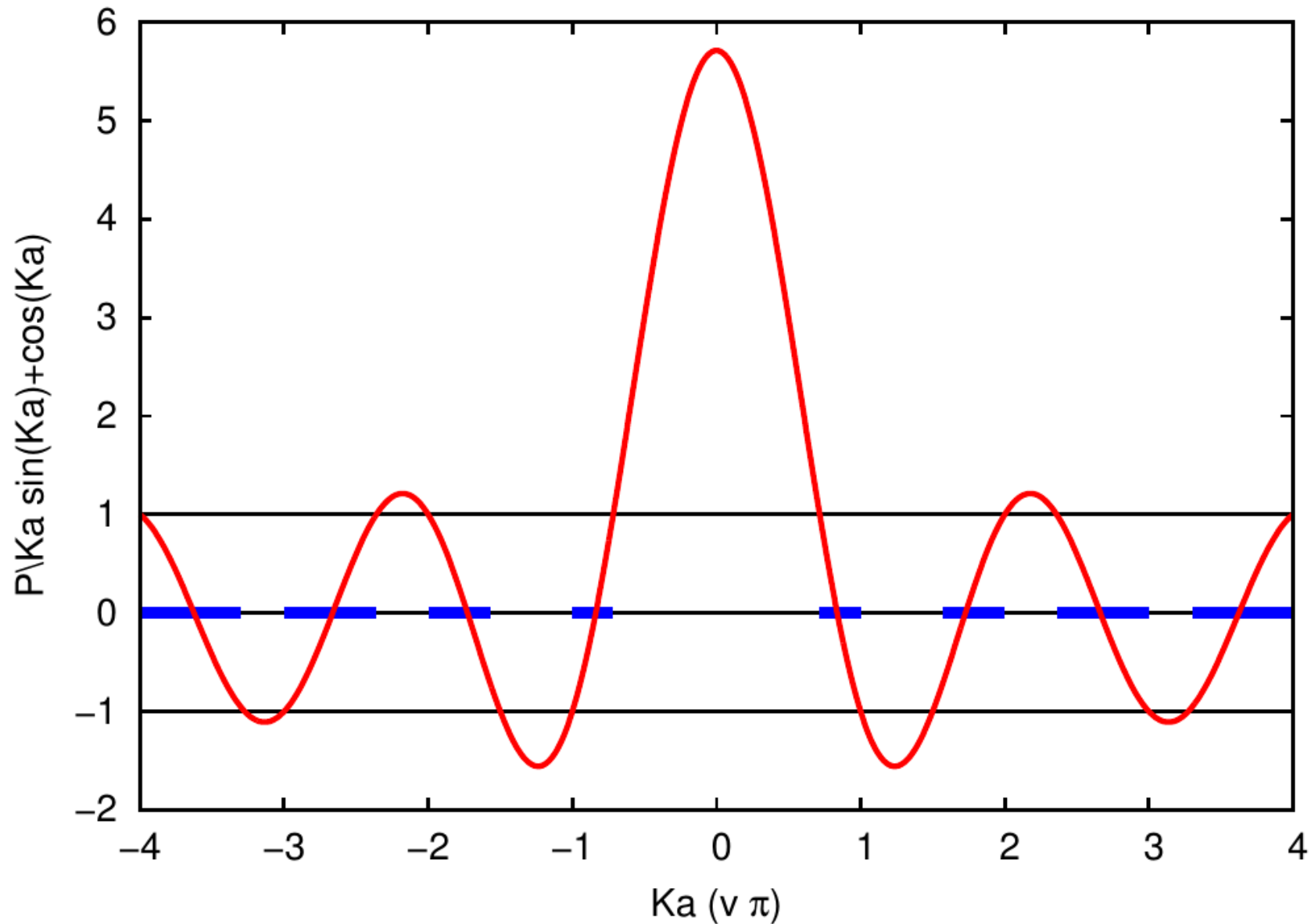


$$\frac{P}{Ka} \sin(Ka) + \cos(Ka) = \cos(ka)$$

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

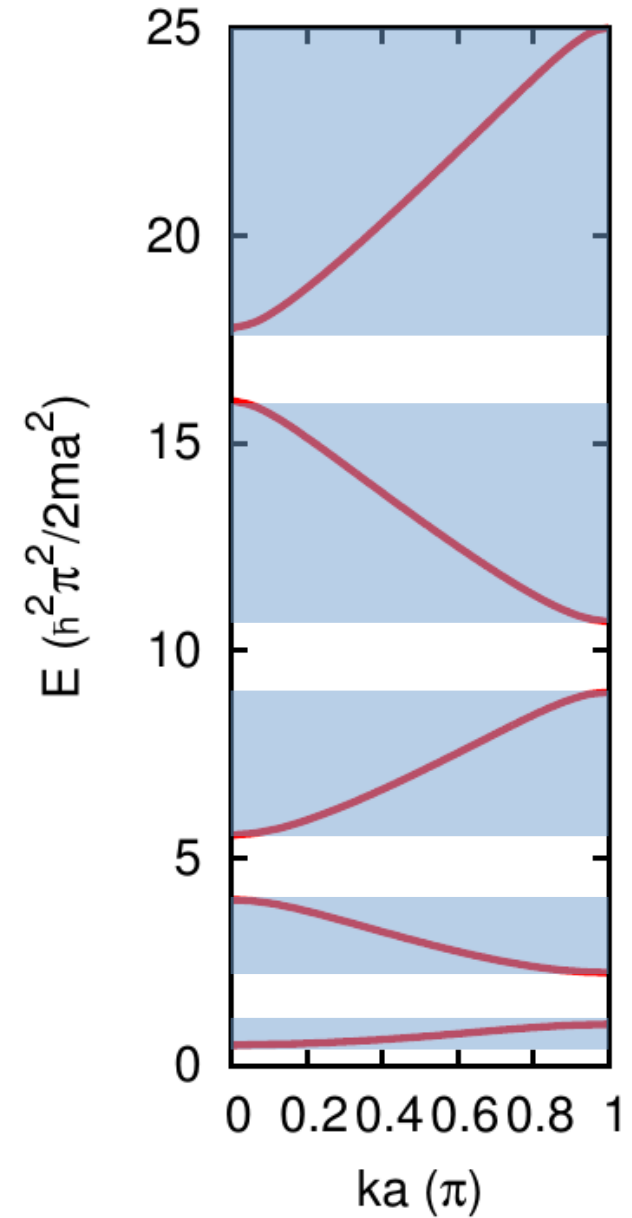
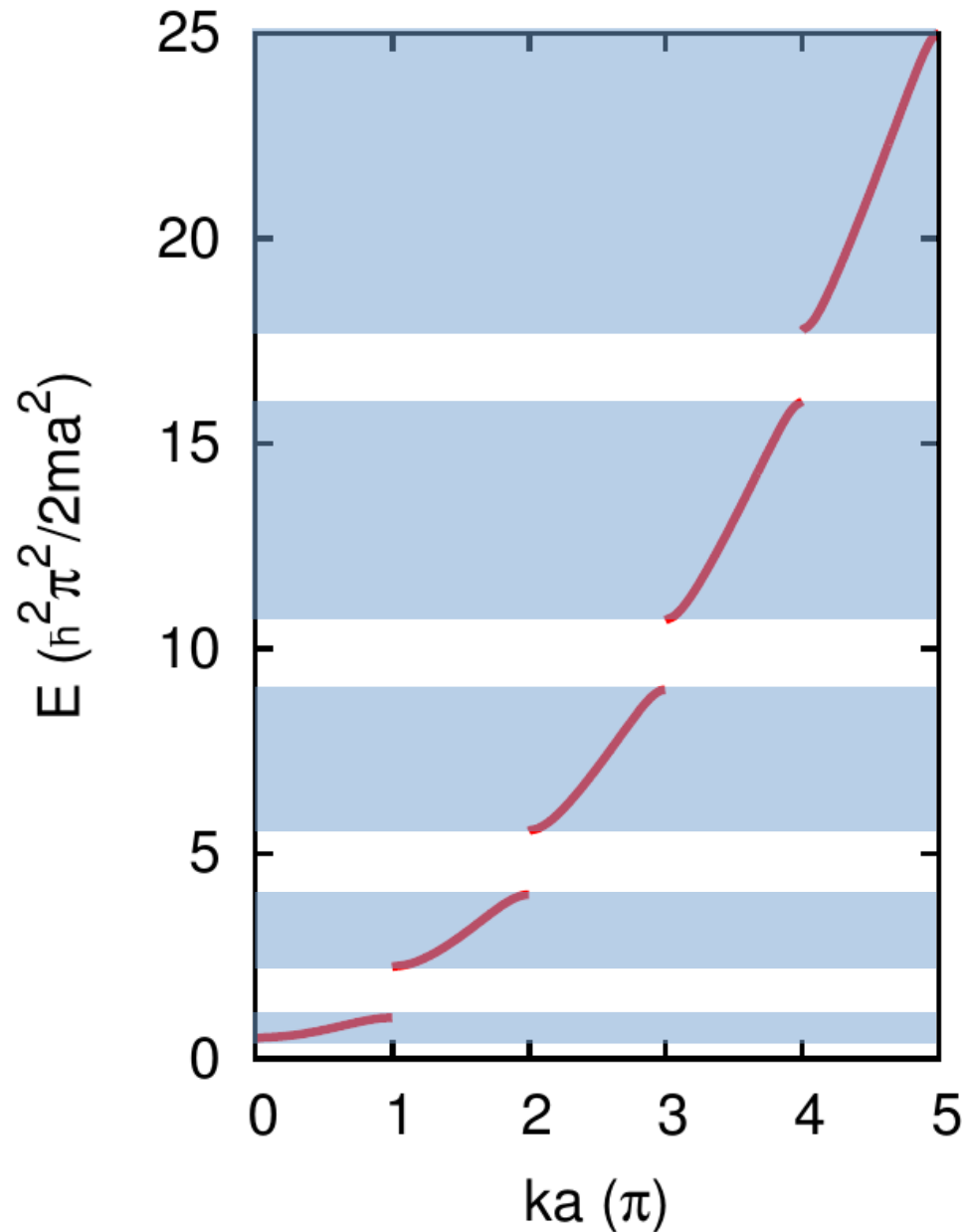
Kronigův – Penneyův model

$$\frac{P}{Ka} \sin(Ka) + \cos(Ka) = \cos(ka)$$



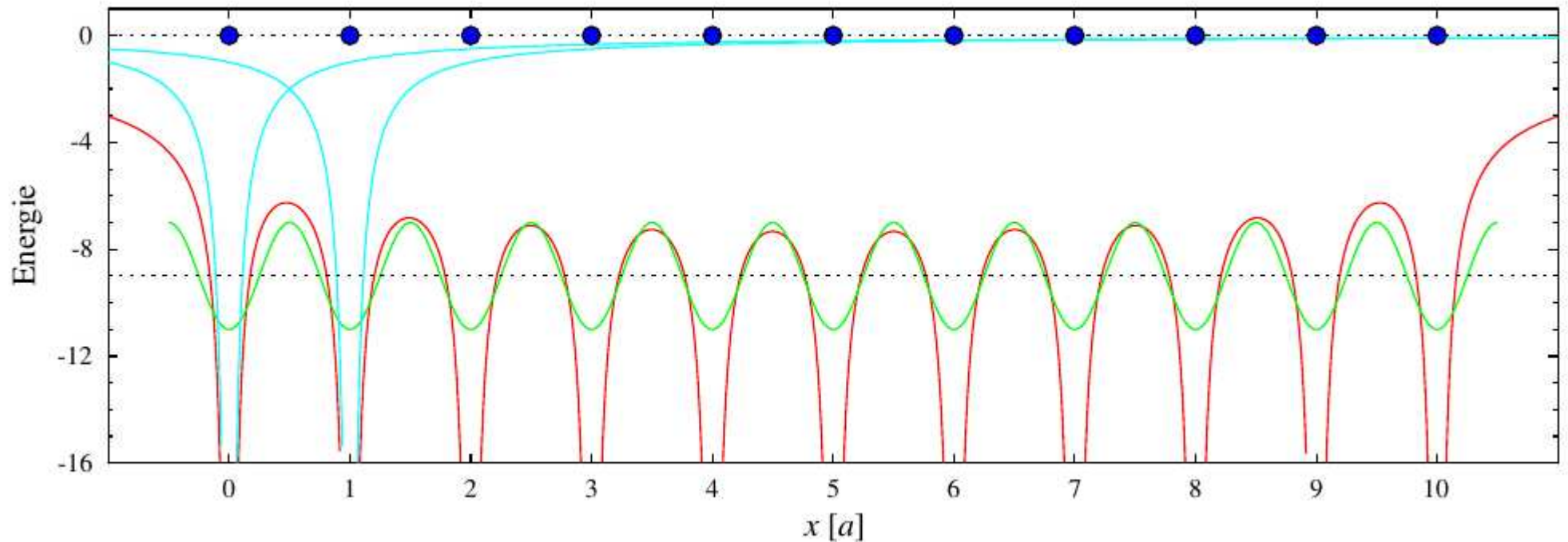
Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Kronigův – Penneyův model



Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Elektronová struktura pevných látek – model téměř volných elektronů



Blochův teorém

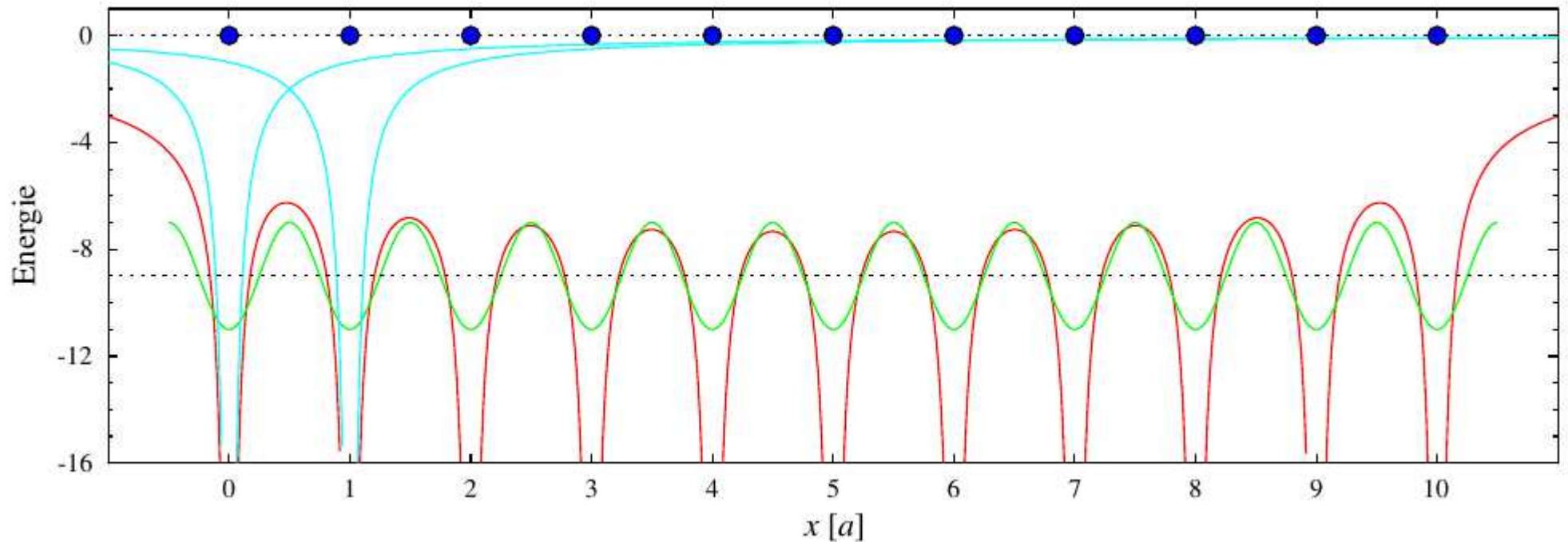
V dokonalém periodickém potenciálu krystalu lze napsat řešení Schrödingerovy rovnice ve tvaru rovinné vlny vynásobené periodickou funkcí, která má periodu shodnou s periodou krystalu.

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = u_{\vec{k}}(\vec{r})e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}, \quad u_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{T}) = u_{\vec{k}}(\vec{r})$$

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{T}) = \psi_{\vec{k}}(\vec{r})e^{i\vec{k}\cdot\vec{T}}$$

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Elektronová struktura pevných látek – model téměř volných elektronů



$$U(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} U_{\vec{G}} e^{i\vec{G} \cdot \vec{r}}$$

$$U_{\vec{G}} = \frac{1}{V_{eb}} \int_{el.b.} dV U(\vec{r}) e^{-i\vec{G} \cdot \vec{r}}$$

$$\psi(\vec{r}) = \sum_{\vec{K}} C(\vec{K}) e^{i\vec{K} \cdot \vec{r}}$$

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Elektronová struktura pevných látek – model téměř volných elektronů

$$H\psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 + U(\vec{r}) \right) \psi = E\psi$$

$$U(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} U_{\vec{G}} e^{i\vec{G} \cdot \vec{r}}$$

$$\psi(\vec{r}) = \sum_{\vec{K}} C(\vec{K}) e^{i\vec{K} \cdot \vec{r}}$$

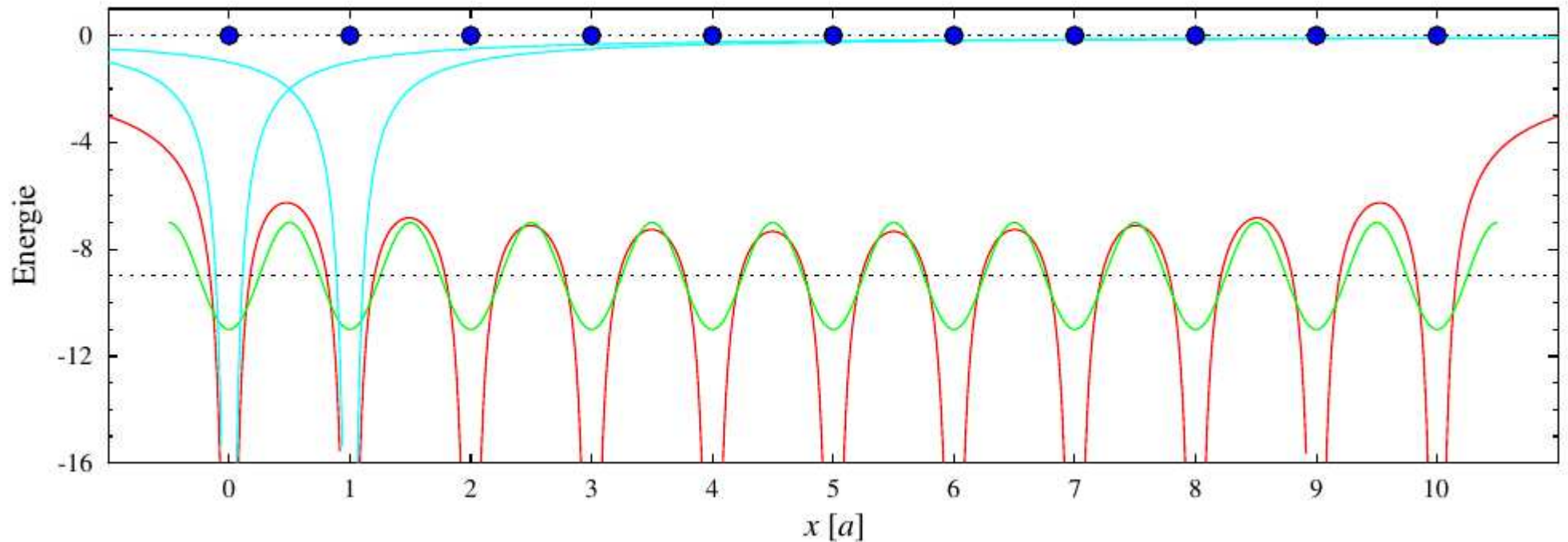

$$\frac{\hbar^2}{2m_e} \sum_{\vec{K}} K^2 C(\vec{K}) e^{i\vec{K} \cdot \vec{r}} + \sum_{\vec{G}} \sum_{\vec{K}} U_{\vec{G}} C(\vec{K}) e^{i(\vec{K} + \vec{G}) \cdot \vec{r}} = E \sum_{\vec{K}} C(\vec{K}) e^{i\vec{K} \cdot \vec{r}}$$

$$(\lambda_k - E) C(\vec{k}) + \sum_{\vec{G}} U_{\vec{G}} C(\vec{k} - \vec{G}) = 0, \quad \lambda_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e}$$

v 1.BZ

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Elektronová struktura pevných látek – model téměř volných elektronů



$$U(x) = U_g e^{igx} + U_g e^{-igx}, \quad g = \frac{2\pi}{a}$$

1D případ: $(\lambda_k - E) C(k) + \sum_G U_G C(k - G) = 0, \quad \lambda_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} \quad \text{v 1.BZ}$

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Elektronová struktura pevných látek – model téměř volných elektronů

$$(\lambda_k - E) C(k) + \sum_G U_G C(k - G) = 0, \quad \lambda_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} \quad \text{v 1.BZ}$$

g nechť je nejmenší vektor reciproké mřížky

$$U(x) = U_g e^{igx} + U_g e^{-igx}, \quad g = \frac{2\pi}{a}$$

$$(\lambda_k - E) C(k) + U_{-g} C(k + g) + U_g C(k - g) = 0, \quad U_{-g} = U_g$$

$$\begin{vmatrix} \dots & \lambda_{k-2g} - E & U_g & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \dots & U_g & \lambda_{k-g} - E & U_g & 0 & 0 & \dots \\ \dots & 0 & U_g & \lambda_k - E & U_g & 0 & \dots \\ \dots & 0 & 0 & U_g & \lambda_{k+g} - E & U_g & \dots \end{vmatrix} = 0$$

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Elektronová struktura pevných látek – model téměř volných elektronů

$$(\lambda_k - E) C(k) + \sum_G U_G C(k - G) = 0, \quad \lambda_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} \quad \text{v 1.BZ}$$

g nechť je nejmenší vektor reciproké mřížky

$$U(x) = U_g e^{igx} + U_g e^{-igx}, \quad g = \frac{2\pi}{a}$$

$$(\lambda_k - E) C(k) + U_{-g} C(k + g) + U_g C(k - g) = 0, \quad U_{-g} = U_g$$

řešení na hranici 1.BZ: $k = \pm \frac{\pi}{a}$

$$\begin{aligned} \left(\lambda_{\frac{\pi}{a}} - E\right) C\left(-\frac{\pi}{a}\right) + U_g C\left(\frac{\pi}{a}\right) &= 0 \\ U_g C\left(-\frac{\pi}{a}\right) + \left(\lambda_{\frac{\pi}{a}} - E\right) C\left(\frac{\pi}{a}\right) &= 0 \end{aligned}$$



$$E_{\pm} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_e a^2} \pm U_g$$

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Elektronová struktura pevných látek – pásová struktura

v 1D postupná vlna: e^{ikx} , e^{-ikx} $\longrightarrow$ stojatá vlna $\psi^\pm = \text{konst.} \left(e^{ikx} \pm e^{-ikx} \right)$
 $= \text{konst.} \left(e^{i\frac{\pi x}{a}} \pm e^{-i\frac{\pi x}{a}} \right)$

$\rho = \text{konst.}$

snížení potenciální energie

zvýšení potenciální energie



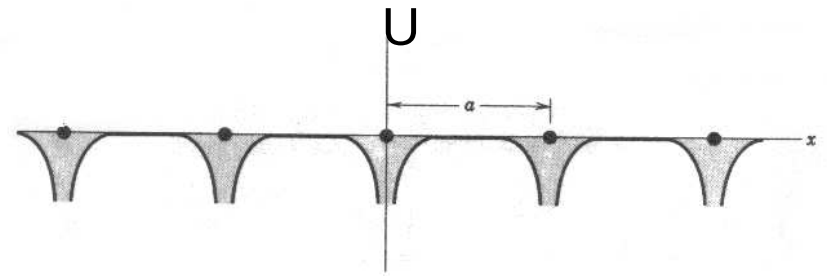
zakázaný pás

3D:

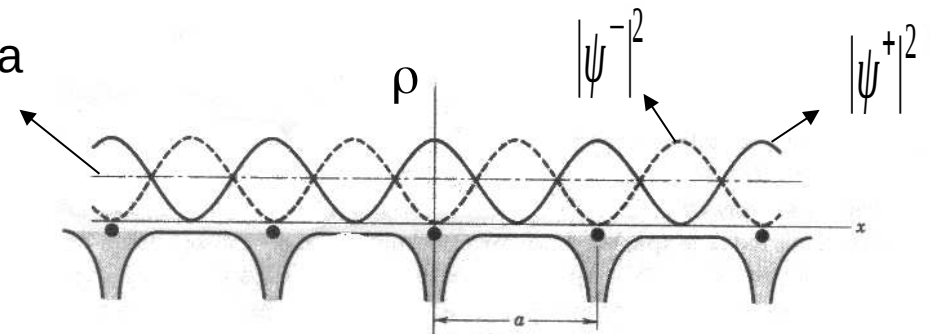
$$E_{k(BZ)} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \pm U_B$$

$$\rho^+ = |\psi^+|^2 \approx \cos^2 \left(\frac{\pi x}{a} \right)$$

$$\rho^- = |\psi^-|^2 \approx \sin^2 \left(\frac{\pi x}{a} \right)$$



postupná vlna

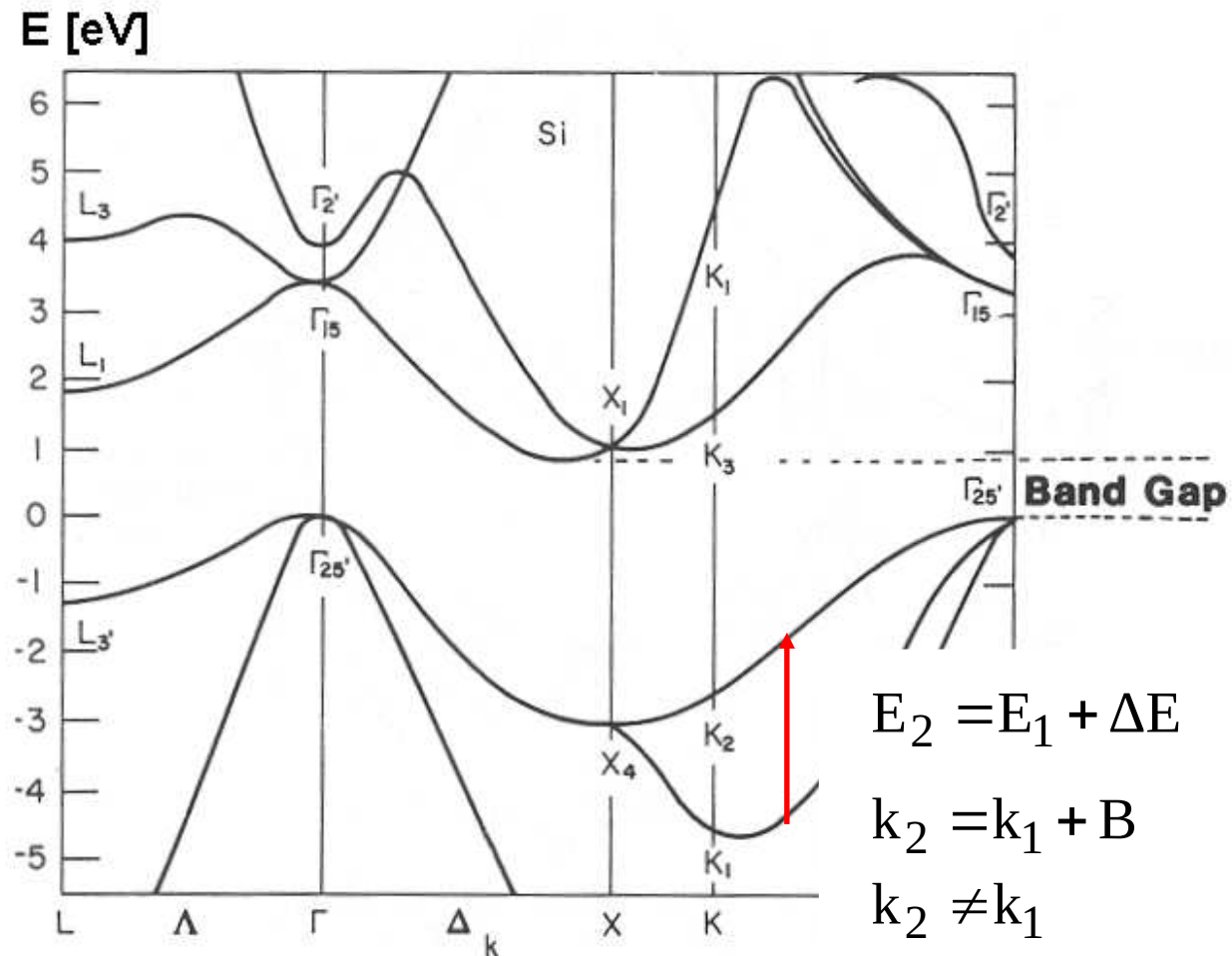
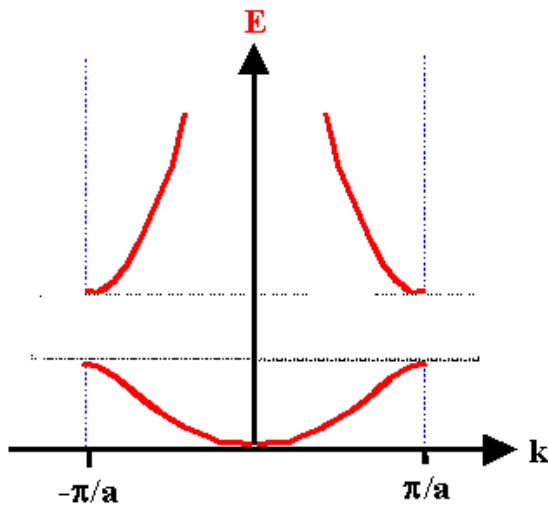
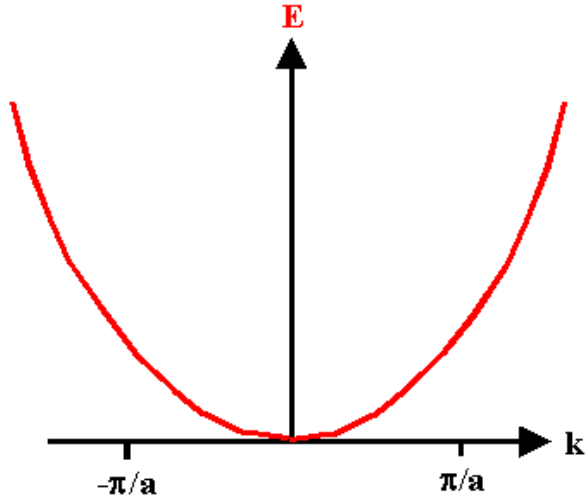


Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Elektronová struktura pevných látek – pásová struktura

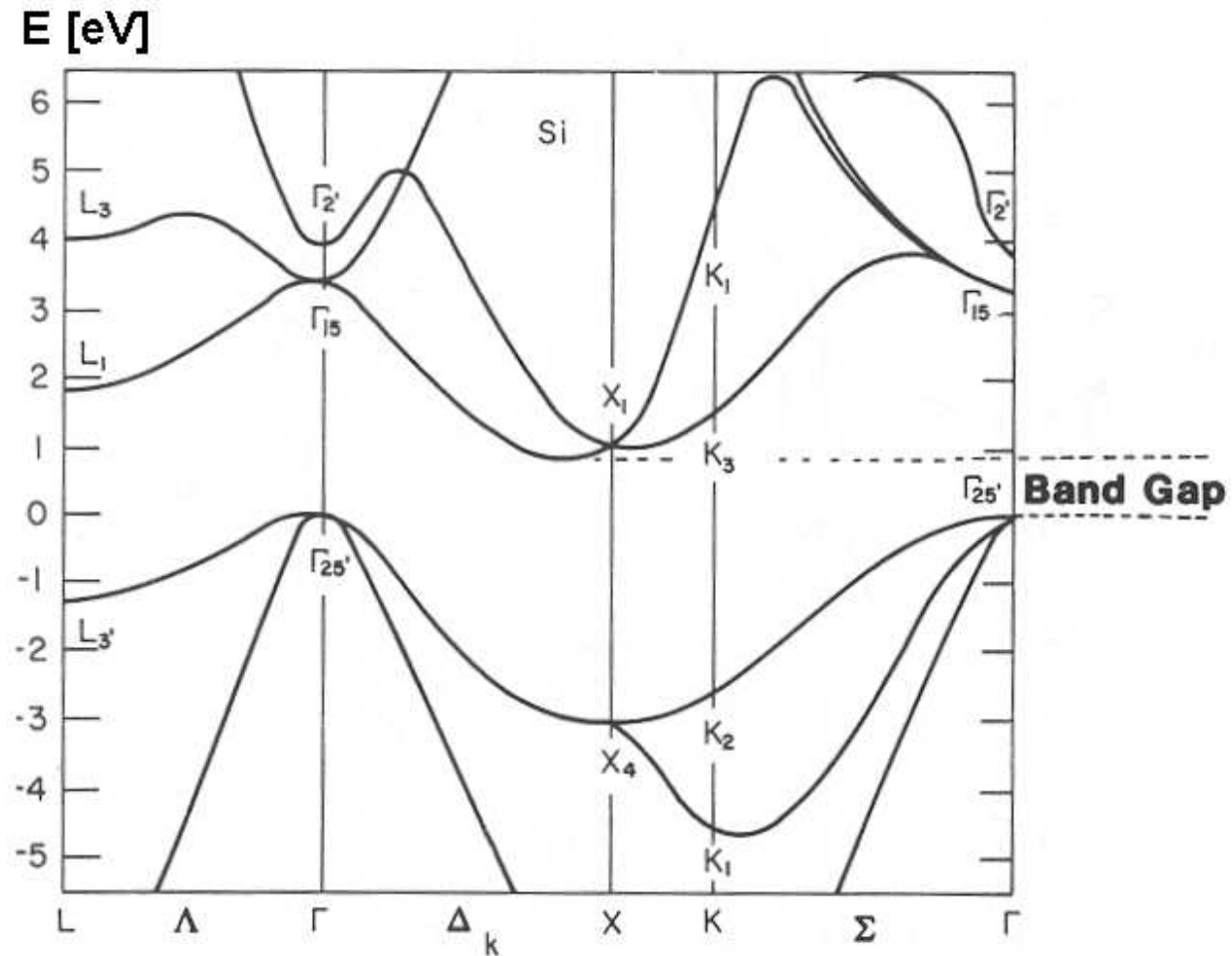
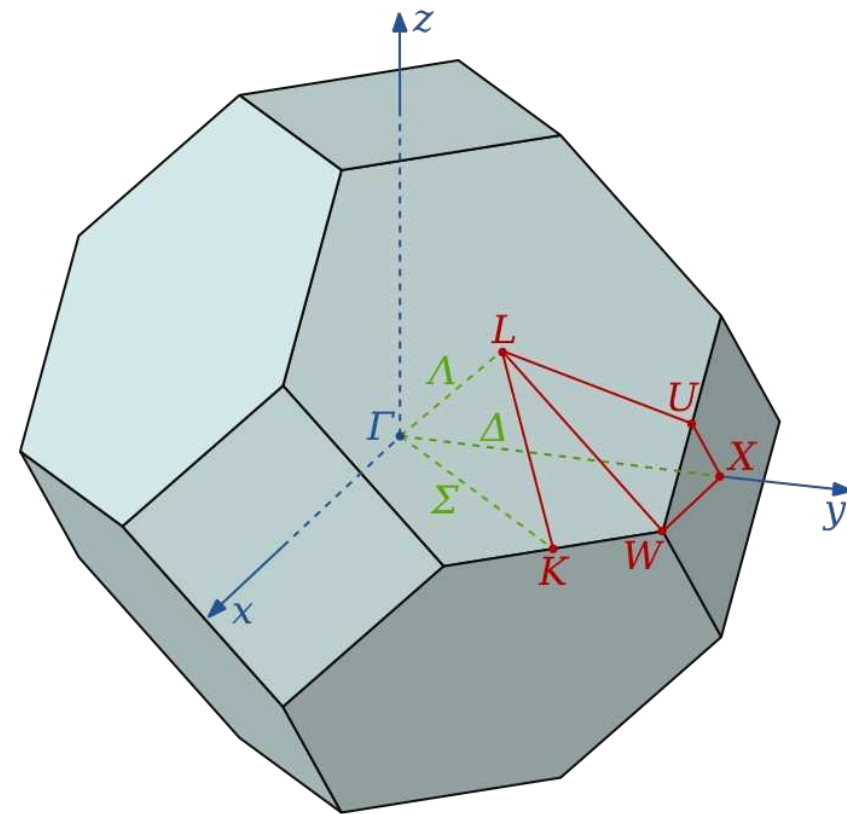
1 pás $\leftrightarrow$ N hodnot k , $2N$ stavů (N primitivních buněk)

Si: (Ne)3s²3p² $\rightarrow$ 8 valenčních e⁻, struktura diamantu



Atomová fyzika a elektronová struktura látek

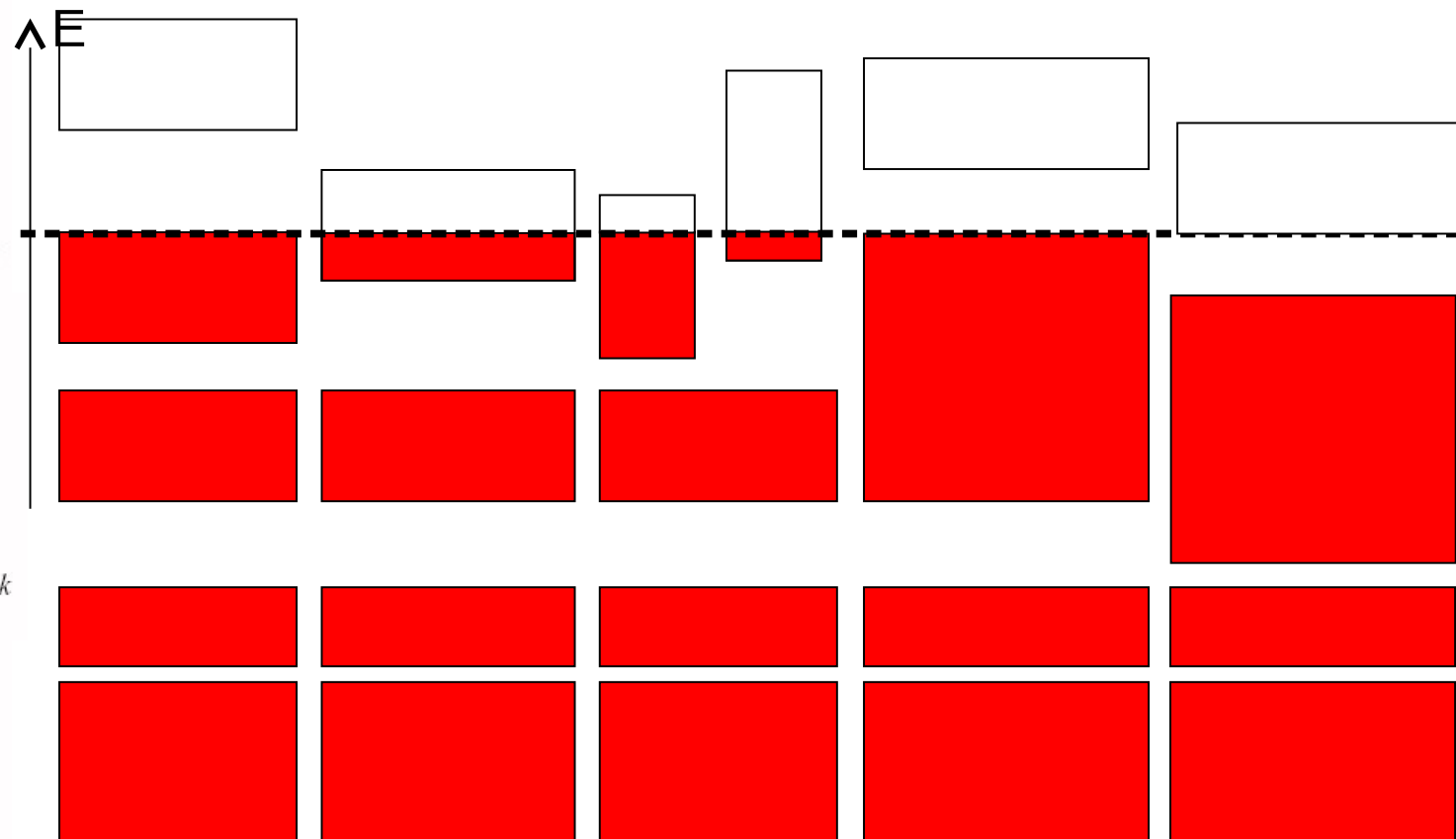
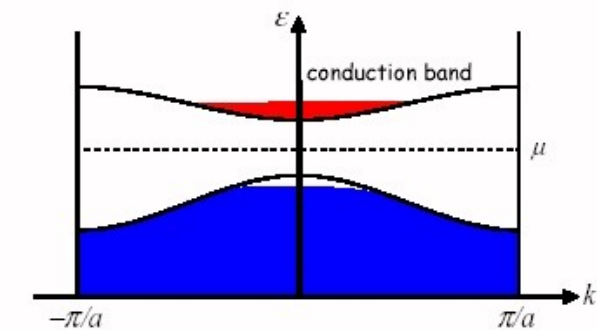
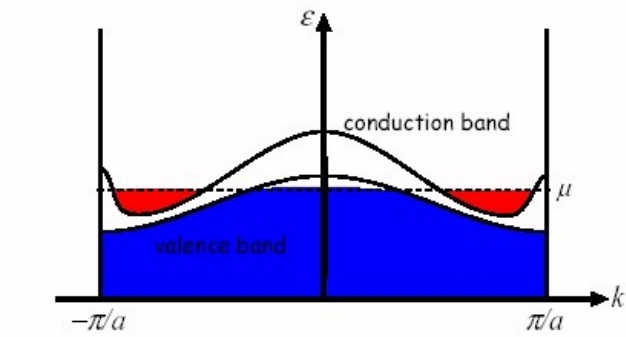
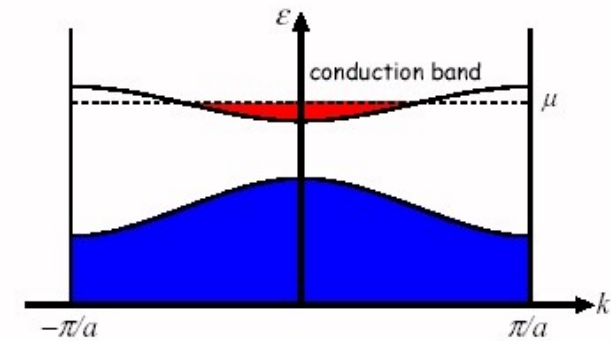
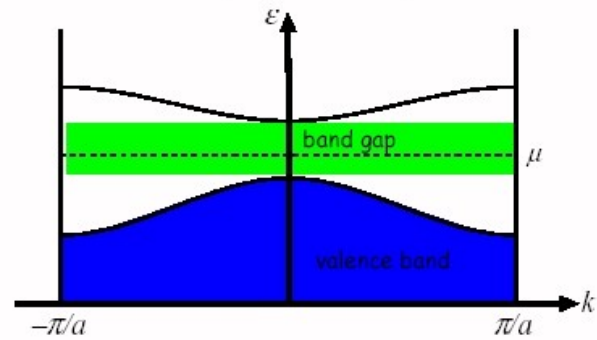
Elektronová struktura pevných látek – pásová struktura



Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Elektronová struktura pevných látek – pásová struktura

rozdělení pevných látek podle zaplnění pásů



izolátor

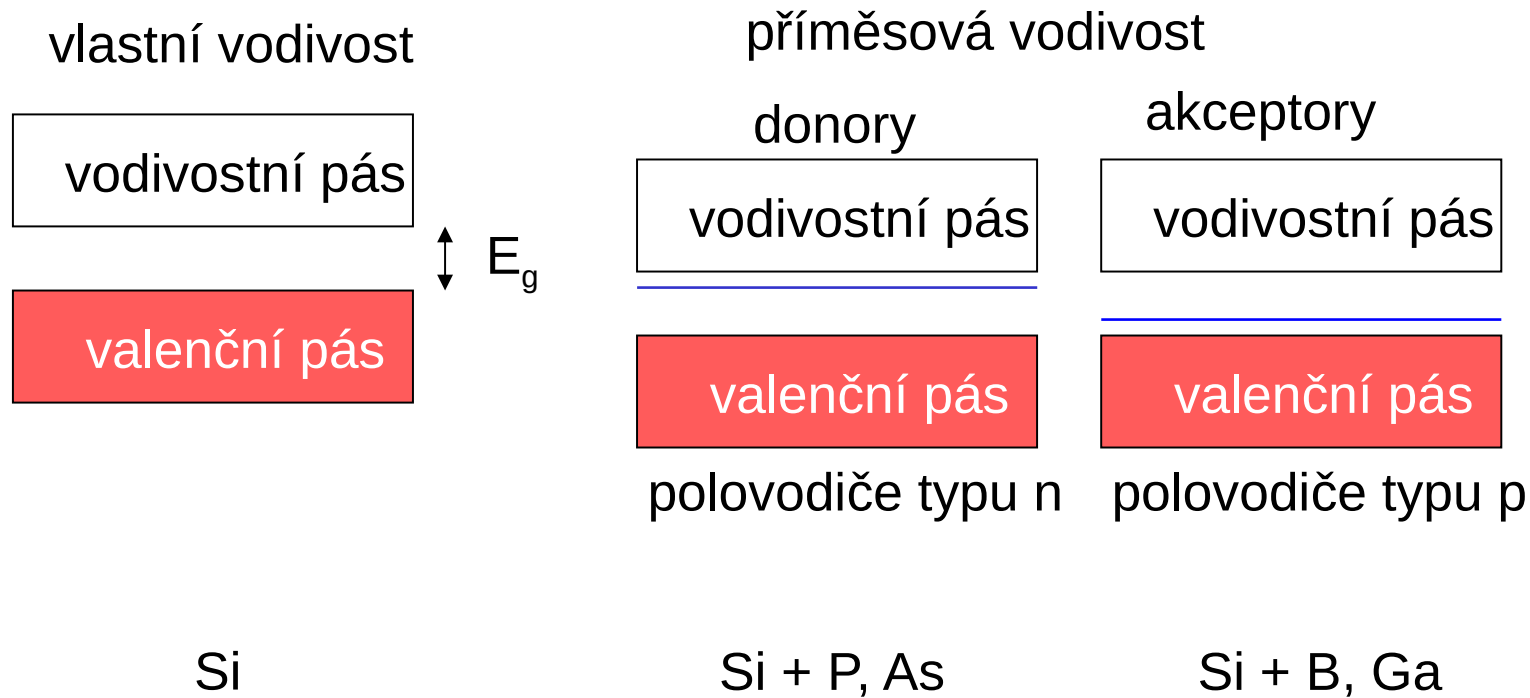
kov

polokov

polovodič

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Elektronová struktura pevných látek – pásová struktura polovodičů



$$E_{d,a} = \frac{e'^4 m^*}{2\hbar^2 \varepsilon}$$

vlastní vodivost

vodivostní pás

$$E_g = 1,14 \text{ eV}$$

$\updownarrow E_g$

valenční pás



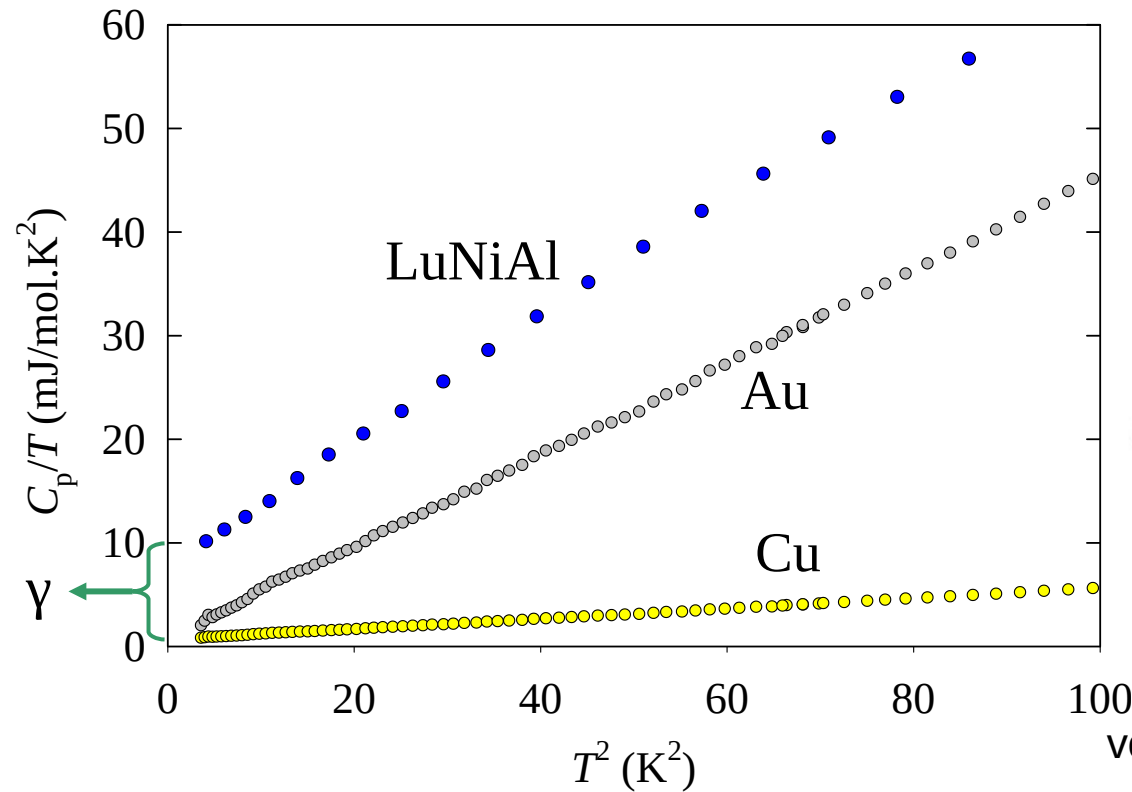
$\lambda > 1.09 \mu\text{m}$



$\lambda < 1.09 \mu\text{m}$

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Elektronová struktura pevných látek – tepelné vlastnosti elektronového plynu



$$T \ll \theta_D \quad C_V = \gamma T + \beta T^3$$

$$\frac{C_V}{T} = \gamma + \beta T^2$$

$$E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m_e}$$

$$C_{el} = \frac{1}{2} \pi^2 N k_B \frac{k_B T}{E_F}$$

volné elektrony vs. reálné kovy

γ (mJ.mol⁻¹K⁻²)

↓
efektivní hmotnost m^* $\frac{m^*}{m_e} = \frac{\gamma_{exp}}{\gamma_{volne}}$

	Li	Na	K	Fe	Mn	Cu	Zn	Ag	Au	Al	Ga
volné el.	0.8	1.1	17	0.6	0.6	0.5	0.8	0.6	0.6	0.9	1.0
experiment	1.6	1.4	2.1	4.6	15.2	0.7	0.6	0.6	0.7	1.3	0.6

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Elektronová struktura pevných látek – pásová struktura polovodičů, efektivní hmotnost

efektivní hmotnost = reakce na vnější pole pro elektron v krystalu

$$v_n(\vec{k}) = \frac{d\omega}{dk} = \frac{1}{\hbar} \nabla_k E_n(\vec{k})$$
$$\frac{\partial v}{\partial t} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial^2 E}{\partial k^2} \frac{\partial k}{\partial t}$$
$$F = \hbar \frac{\partial k}{\partial t}$$
$$\frac{\partial v}{\partial t} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial k^2} F$$

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial k^2}$$

anizotropie

$$\left(\frac{1}{m^*} \right)_{xy} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial k_x \partial k_y}$$

$$\frac{\partial v_x}{\partial t} = \left(\frac{1}{m^*} \right)_{xy} F_y$$

... souvisí se zakřivením pásu $E(k)$

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

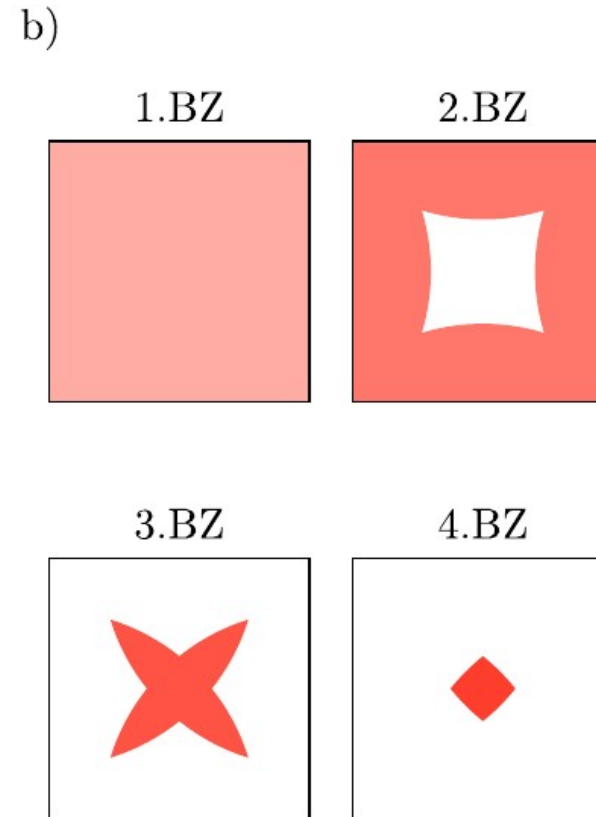
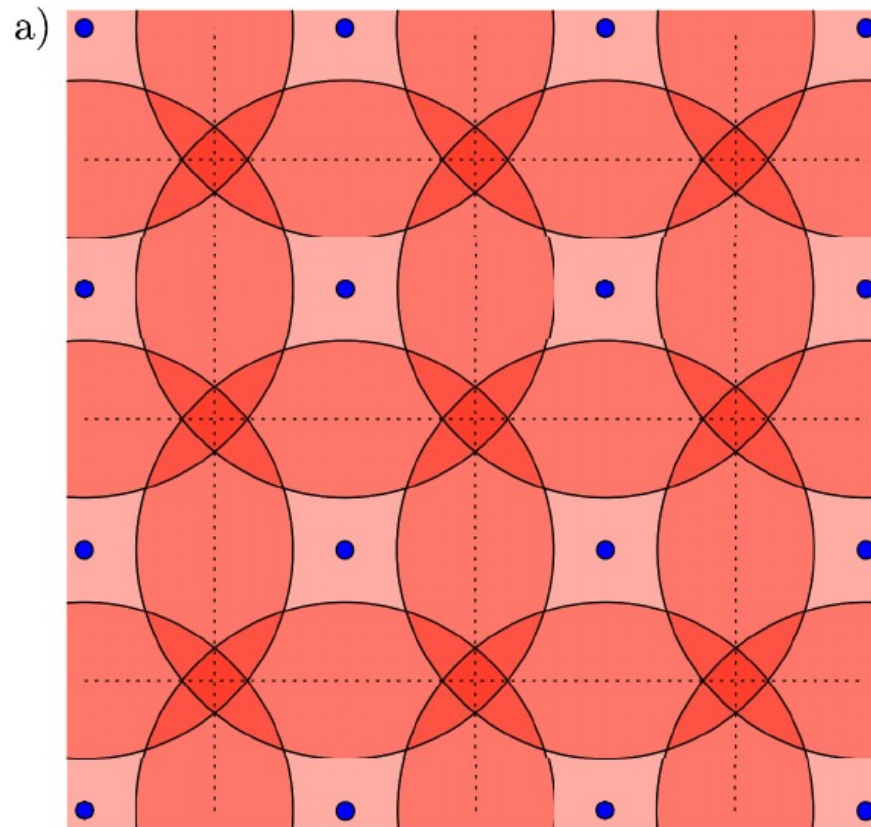
Elektronová struktura pevných látek – Fermiho plocha

neobsazené stavy

obsazené stavy

plocha konstantní energie E_F v k-prostoru

tvár Fermiho plochy → elektrické vlastnosti kovů



Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Elektronová struktura pevných látek – Fermiho plocha

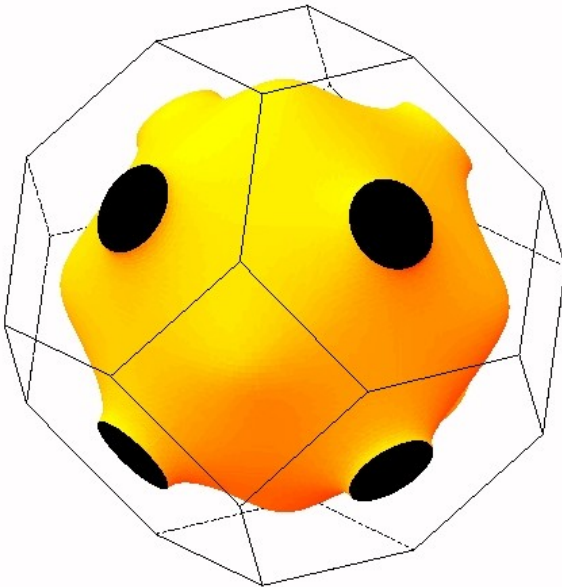
neobsazené stavy

obsazené stavy

plocha konstantní energie E_F v k-prostoru

tvár Fermiho plochy $\longrightarrow$ elektrické vlastnosti kovů

Cu (fcc)



Al (fcc)



Sc (hcp)

