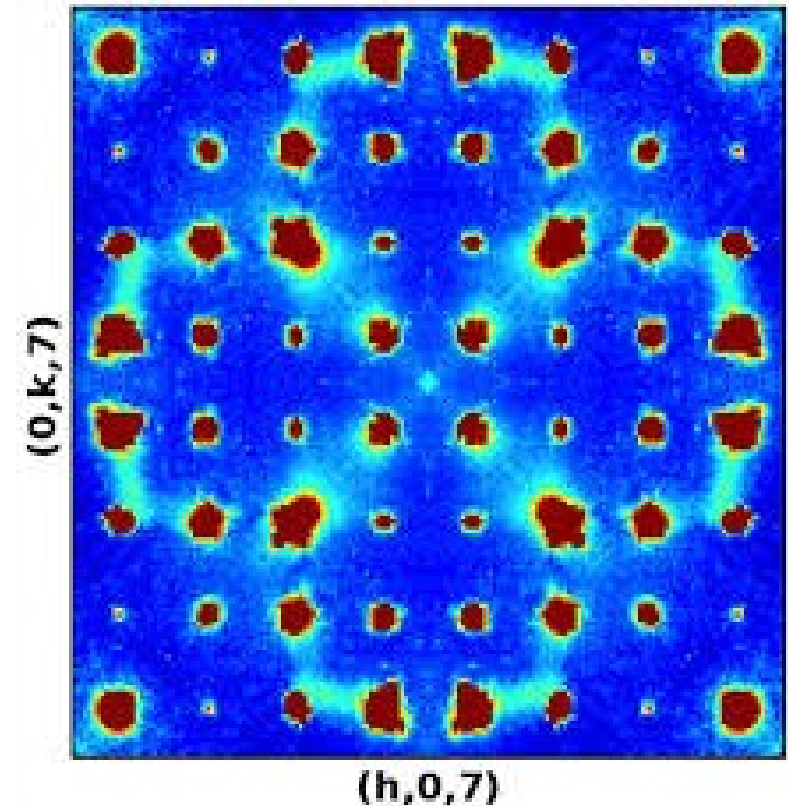
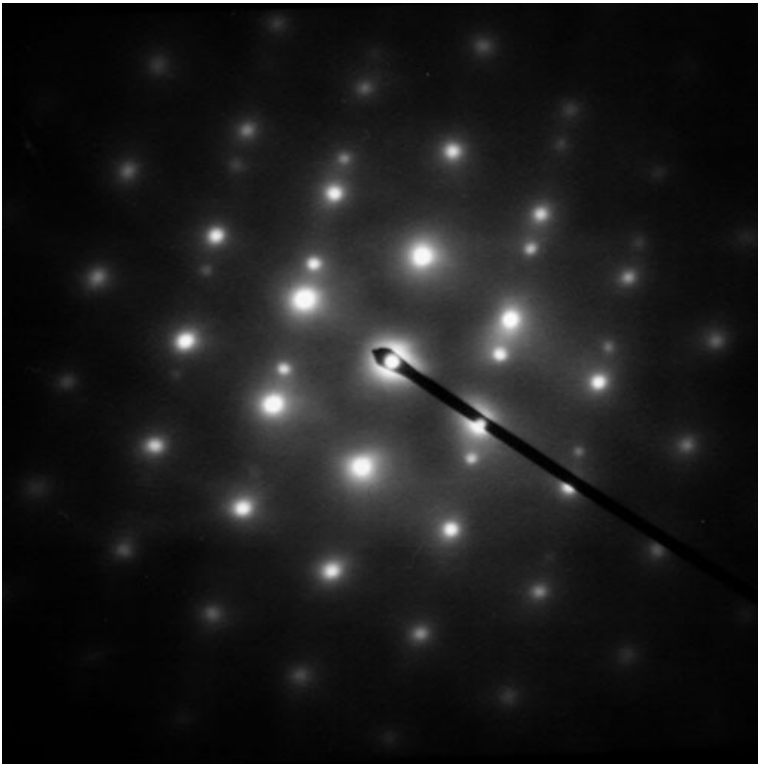


Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Co byste měli po dnešní přednášce umět:

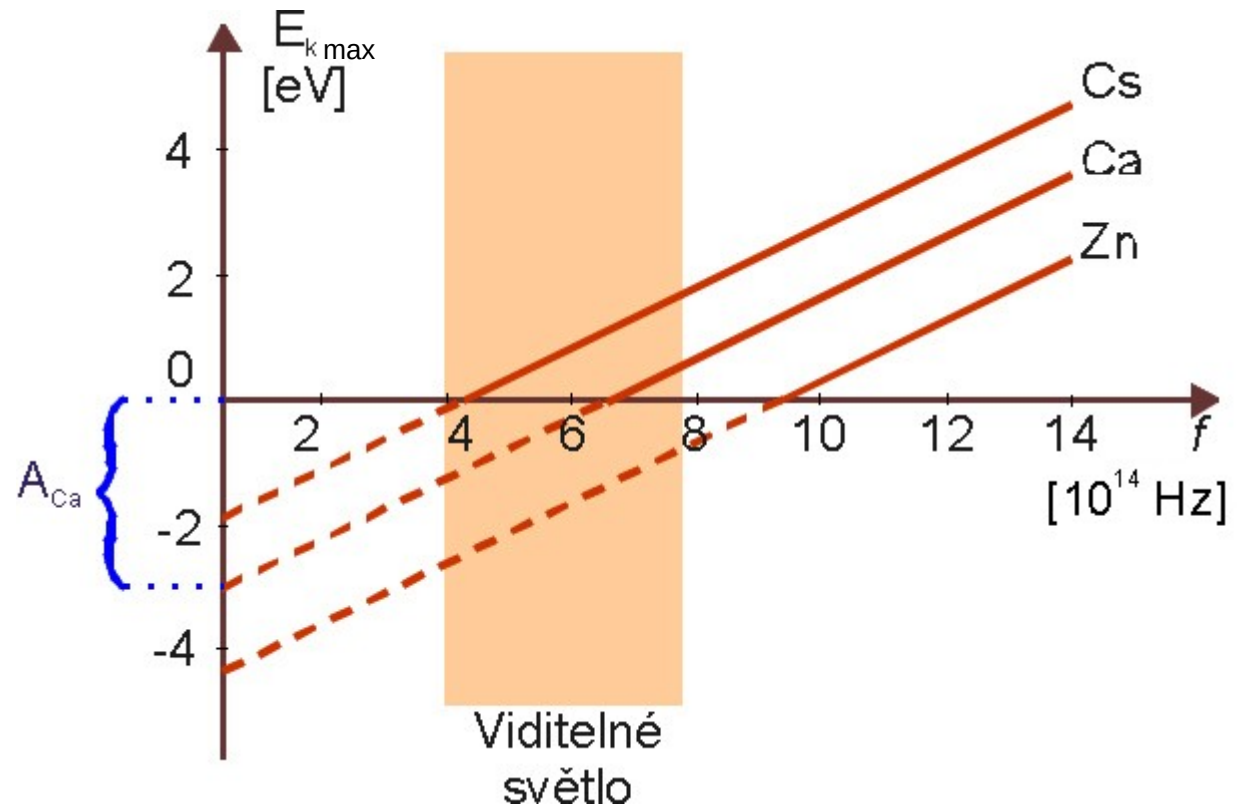
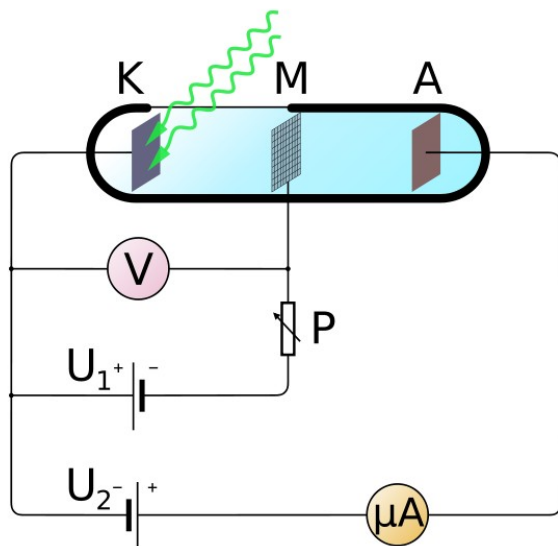
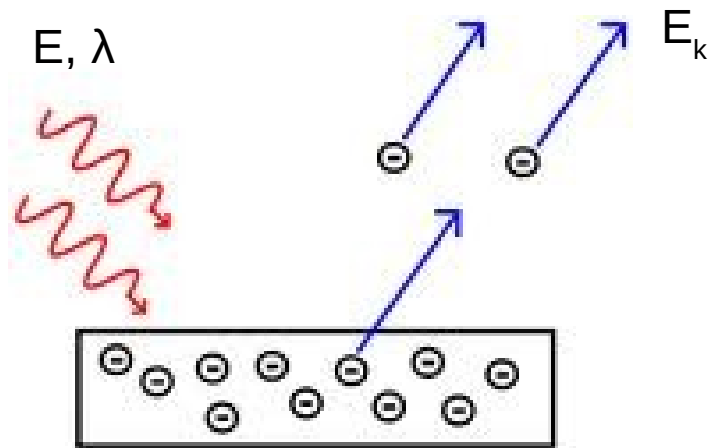
- definovat a ve správných souvislostech použít termíny: dualita vlna-částice, fotoefekt
- porovnat metody rozptylu fotonů/elektronů/neutronů
- prokázat na vhodném experimentu duální vlastnosti (vlna/částice) fotonů
- prokázat na vhodném experimentu duální vlastnosti (vlna/částice) elektronů
- vysvětlit princip Thomsonova experimentu objevu elektronu včetně historických souvislostí a jeho důsledky pro poznání struktury atomů
- porovnat a vysvětlit fyzikální principy a použití metod - HEED, RHEED, LEED



Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Dualita částice -vlna

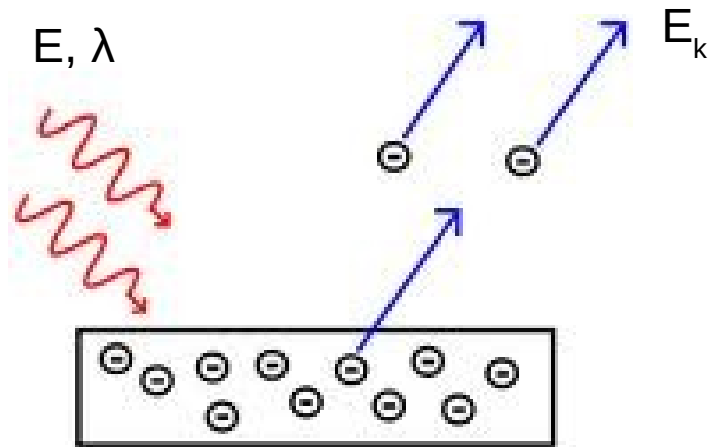
Fotoelektrický jev



Atomová fyzika a elektronová struktura látek

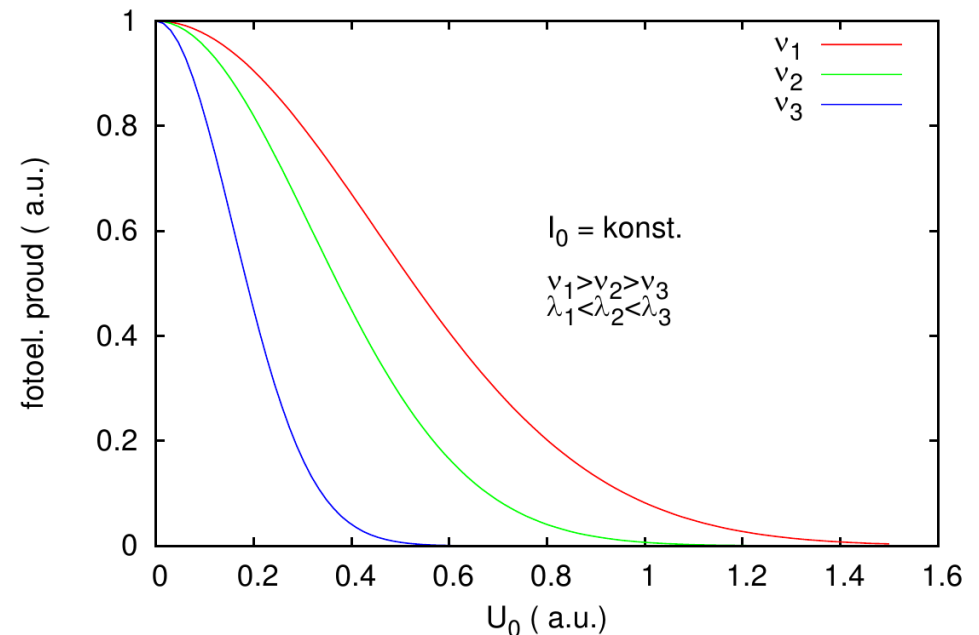
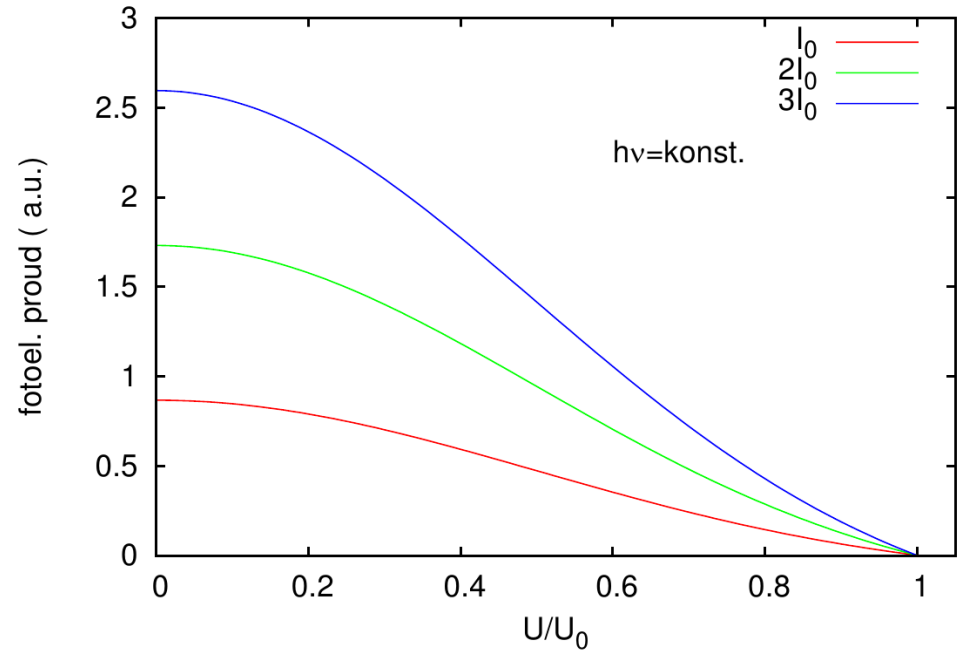
Dualita částice -vlna

Fotoelektrický jev



vlnová teorie nevyhovuje:

1. energetické spektrum emitovaných e⁻ **nezávisí** na intenzitě dopadajícího světla
2. energie fotoelektronů **závisí** na vlnové délce dopadajícího záření
3. časové rozmezí mezi dopadem fotonu a emisí fotoelektronu je velmi malé (<3 ns)

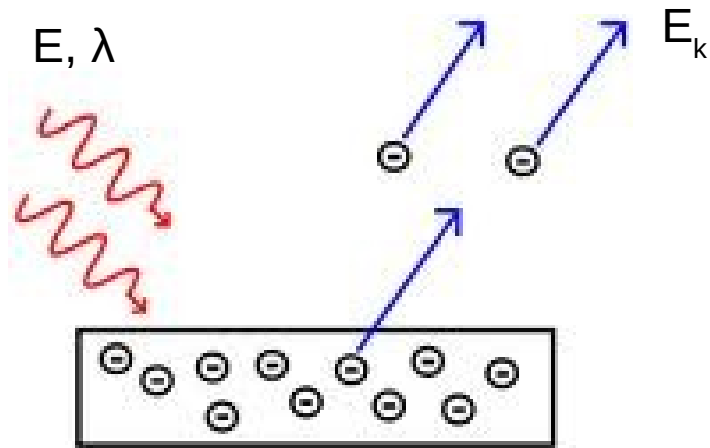


foton se chová jako částice, nikoliv jako elmag.vlna !!

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Dualita částice -vlna

Fotoelektrický jev



$$E = h\nu = W + E_k$$

Planckova kvantová hypotéza

dopadající foton

výstupní práce

maximální E_k fotoelektronu

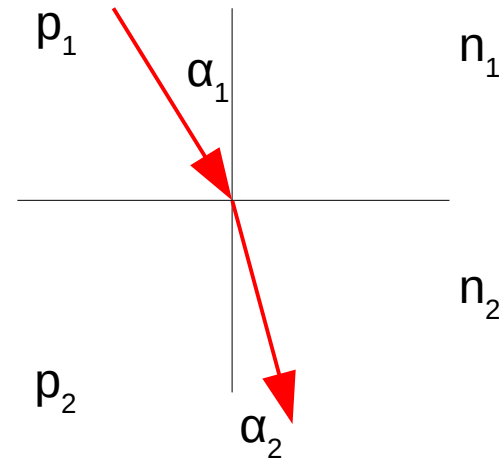
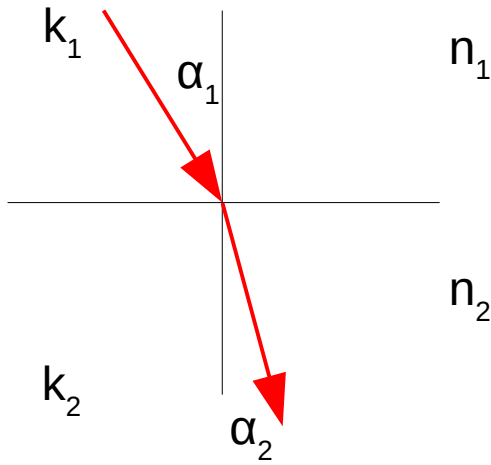
Příklad: Jaká je maximální kinetická energie fotoelektronů pro draslík ($W=2\text{eV}$) při dopadu UV záření $\lambda=3500 \text{ \AA}$?

Řešení:

$$h\nu = \frac{hc}{\lambda} = 5.7 \times 10^{-19} \text{ J} = 3.6 \text{ eV} \quad E_k = h\nu - W = 1.6 \text{ eV}$$

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

zákon lomu



$$n_1 \sin \alpha_1 = n_2 \sin \alpha_2$$

$$k_{1,2} = n_{1,2}K = n_{1,2} \frac{2\pi}{\lambda}$$

$$k_1 \sin \alpha_1 = k_2 \sin \alpha_2$$

$$k_1^{\parallel} = k_2^{\parallel}$$

$$p_1^{\parallel} = p_2^{\parallel}$$

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

$$p = \sqrt{2mE}$$

$$p_1 = \sqrt{2m(E - U_1)}$$

$$p_2 = \sqrt{2m(E - U_2)}$$

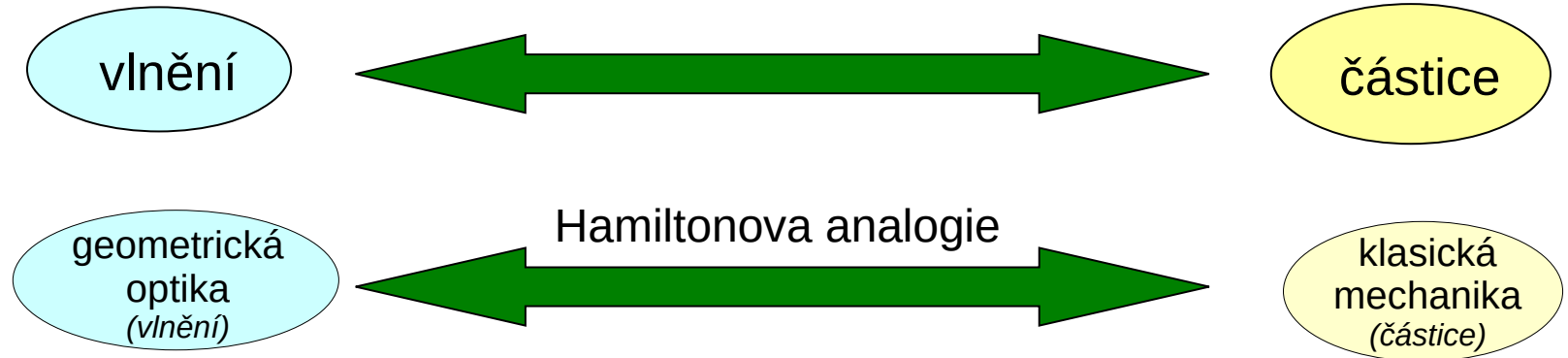
$$n_{1,2} = \frac{\sqrt{2m(E - U_{1,2})}}{\sqrt{2mE}}$$

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Dualita částice -vlna



Prince Louis-Victor
Pierre Raymond
de Broglie
(1892-1987)



světlo - vlnové vlastnosti (ohyb, interference), Huyghensův princip
- částicové vlastnosti (fotoefekt, Comptonův rozptyl)

$$E = h\nu = \hbar\omega$$

$$h \cong 6.62 \times 10^{-34} \text{ Js}$$

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



$$\lambda = \frac{h}{p}$$

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Dualita částice -vlna

volná částice

	jako vlna			jako částice		
vlna	ω	\vec{k}	$\omega(\vec{k})$	$u_f = \frac{\omega}{k}$	$u_g = \frac{d\omega}{dk}$	$v = \frac{c^2}{u_f}$
částice	E	\vec{p}	$E(\vec{p})$	$u_f = \frac{E}{p}$	$u_g = \frac{dE}{dp}$	$v = \frac{p}{m}$

$$E = h\nu = \hbar\omega$$

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

$$u_f = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar\omega}{\hbar k} = \frac{E}{p}$$

pro fotony

vlnění → částice

$$\omega = ck$$

$$u_f = \frac{\omega}{k} = c$$

$$u_g = \frac{d\omega}{dk} = c$$

$$v = \frac{p}{m}$$

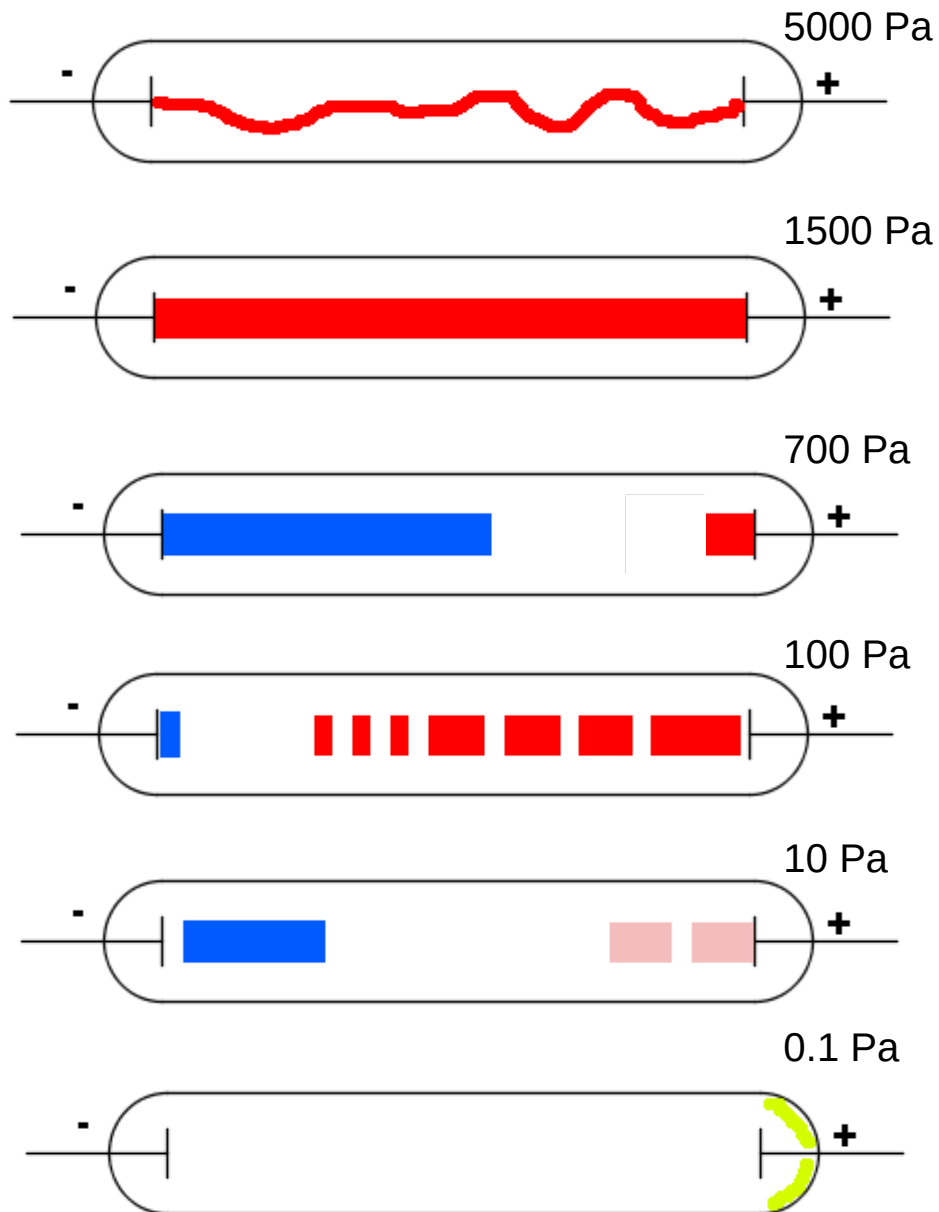
$$E = mc^2$$

$$v = \frac{p}{m} = \frac{c^2}{u_f}$$

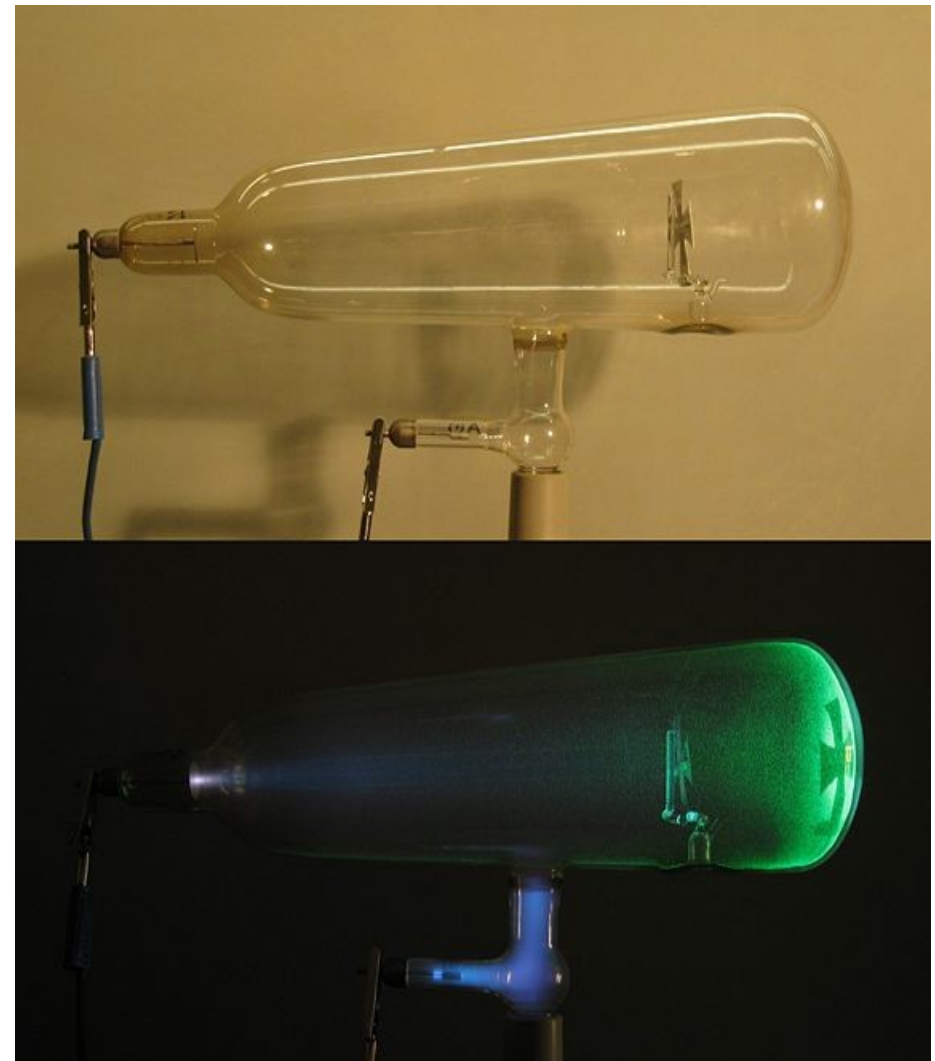
hmotné částice: $E, p, v \longrightarrow \omega, k, u_f, u_g$ $\omega(\vec{k})$

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Výboje v plynech



William Crooks – studium katodového záření



Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Elektron jako částice

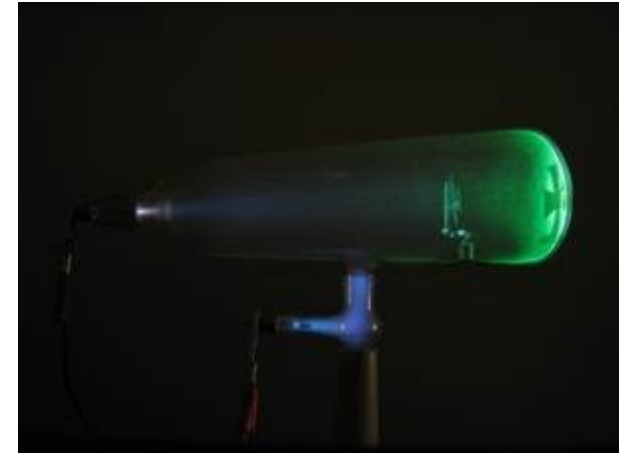
~1838 Faraday aj. ... výboje v plynech

1855: Geissler - účinnější čerpání

trubici důkladně odčerpali

zmizelo světélkování, ale na druhé straně trubice záblesky

→ katoda emituje nějaké paprsky - katodové paprsky



- nějaké hmotné částice?
(Crookes, J.J. Thomson, ...)

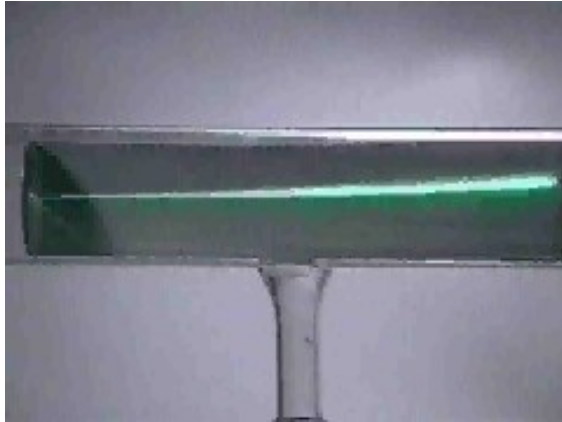
- vlny v neviditelné hmotě, tzv. éteru,
něco jako světlo? (Goldstein, Hertz, and Lenard)



Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Elektron jako částice

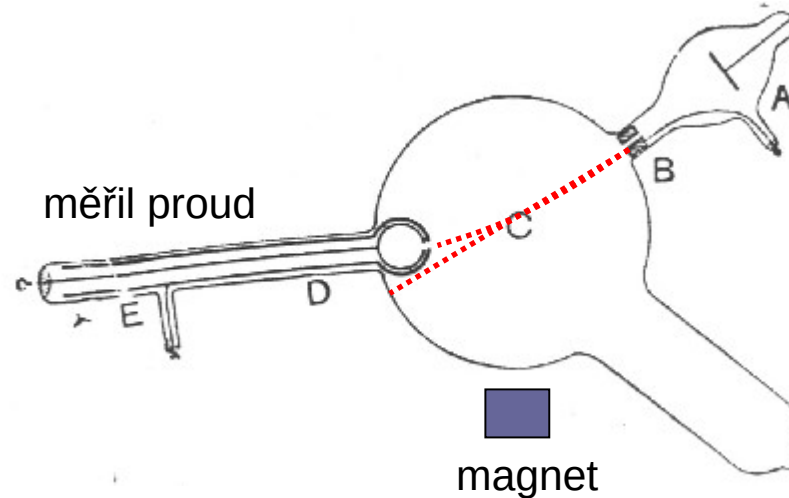
... mnohé experimenty



... další experimenty

→ pokud to jsou částice, jsou velmi malé (Lenard, Wiechert)

Perrin - katodové paprsky nabité - záporný náboj



- katodové paprsky:**
- šíří se přímo
 - přenášejí záporný náboj
 - přenášejí energii (trubice se zahřívá)
 - šíří se vakuem, čím vyšší, tím lepší
 - jsou ovlivněny elektromagnetickým polem
 - přenos hmoty malinký - malé částice?



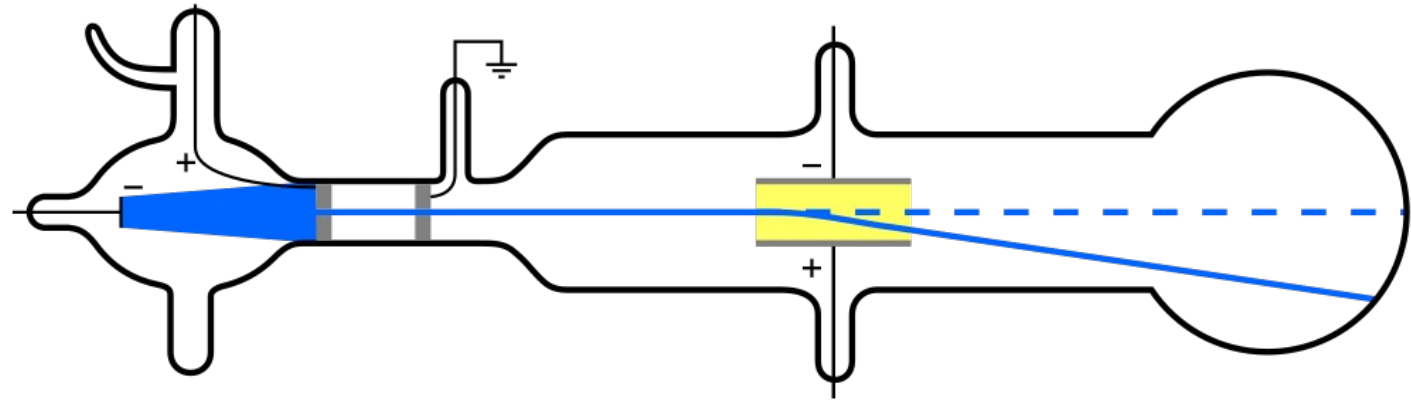
Philipp Eduard Anton
von Lenard
(1862-1947)
(N.c. 1905)

Atomová fyzika a elektronová struktura látek



Joseph John Thomson
(1856-1940)

~ 1897 el. pole



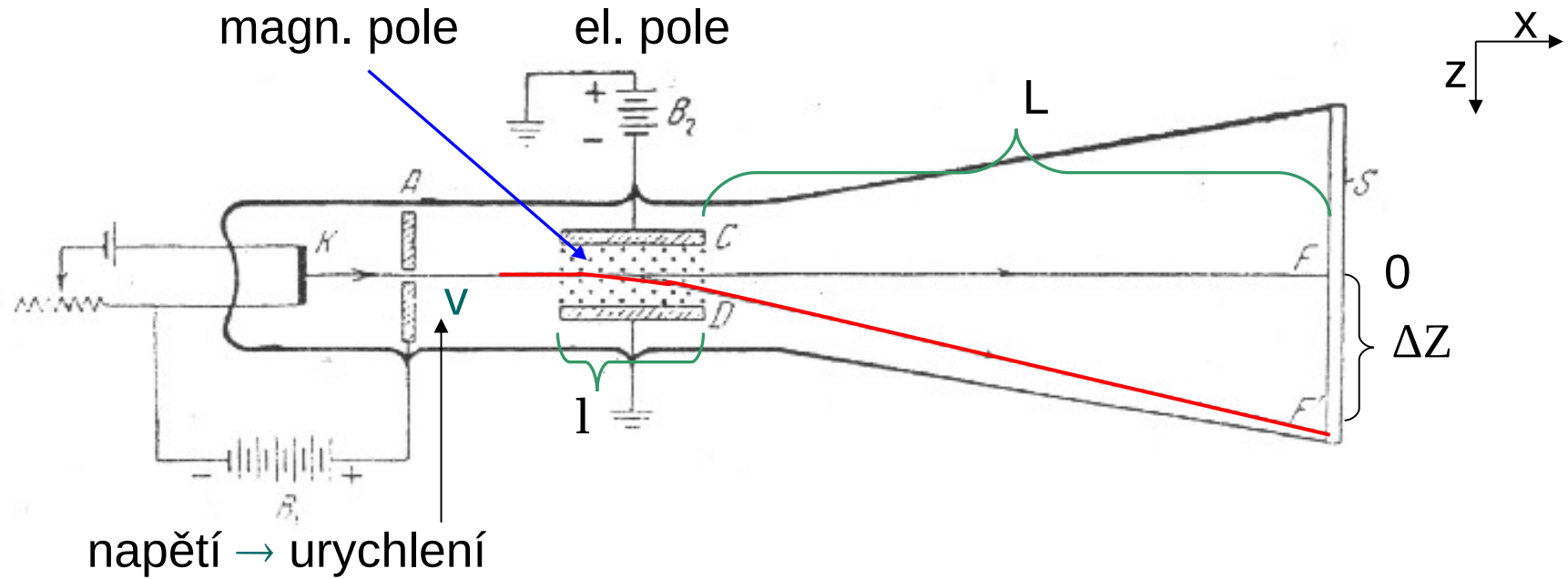
vliv elektromagnetického pole: $\vec{F} = q (\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B})$

$$\vec{a} = \frac{q}{m} (\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B})$$

z trajektorie pohybu určím $\frac{q}{m}$ ne samotný náboj

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Elektron jako částice - Thomsonův pokus



$$\begin{aligned} \text{na } l: \Delta Z_1 &= \frac{1}{2} a t^2 = \frac{1}{2} \frac{q}{m} E \left\{ \frac{l}{v} \right\}^2 \\ \text{na } L: \Delta Z_2 &= v_z t = \frac{q}{m} E \frac{l}{v} \frac{L}{v} \end{aligned} \quad \left. \vphantom{\begin{aligned} \text{na } l: \Delta Z_1 \\ \text{na } L: \Delta Z_2 \end{aligned}} \right\} \Delta Z = \frac{q}{m} E \left\{ \frac{1}{2} \left\{ \frac{l}{v} \right\}^2 + \frac{l}{v} \frac{L}{v} \right\}$$

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Elektron jako částice - Thomsonův pokus



- 1) jediná hodnota $\frac{q}{m}$ ve všech pokusech

$$\frac{q}{m} = -1.76 \cdot 10^{11} \text{ Ckg}^{-1} \dots \text{téměř jako dnes } (-1.758 \cdot 10^{11} \text{ Ckg}^{-1})$$

- 2) hypotéza: je to jediná částice, má náboj $q = q_0 = e$ (z elektrolýzy)

$$m_e = \frac{e}{e/m} = 9.1 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$$

objevena první elementární částice, později nazvaná **elektron**

1906: Nobelova cena pro J.J. Thomsona



J.J. Thomson in Cavendish, Cambridge University 13

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Dualita částice -vlna

volná částice

				jako vlna		jako částice
vlna	ω	\vec{k}	$\omega(\vec{k})$	$u_f = \frac{\omega}{k}$	$u_g = \frac{d\omega}{dk}$	$v = \frac{c^2}{u_f}$
částice	E	\vec{p}	$E(\vec{p})$	$u_f = \frac{E}{p}$	$u_g = \frac{dE}{dp}$	$v = \frac{p}{m}$

$$E = h\nu = \hbar\omega$$

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

$$u_f = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar\omega}{\hbar k} = \frac{E}{p}$$

pro fotony

vlnění částice

$$\omega = ck$$

$$u_f = \frac{\omega}{k} = c$$

$$u_g = \frac{d\omega}{dk} = c$$

$$v = \frac{p}{m}$$

$$E = mc^2$$

$$v = \frac{p}{m} = \frac{c^2}{u_f}$$

hmotné částice: $E, p, v \longrightarrow \omega, k, u_f, u_g$ $\omega(\vec{k})$

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Dualita částice -vlna

volná částice

grupová rychlost u_g

hmotné částice: $E, p, v \longrightarrow \omega, k, u_f, u_g$

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}$$

(dosadím $p=mv$ a upravím)

$$E = c^2 \sqrt{m_0^2 + \frac{p^2}{c^2}}$$

$$u_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{dE}{dp}$$

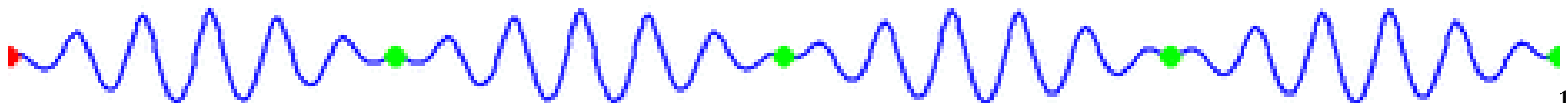
$$u_g = \frac{p}{\sqrt{m_0^2 + \frac{p^2}{c^2}}} = \frac{p}{m} = v$$

fázová rychlost u_f

$$u_f = \frac{E}{p}$$

$$u_f = \frac{mc^2}{mv} = \frac{c^2}{v}$$

$$v < c \Rightarrow u_f > c$$



Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Dualita částice -vlna

volná částice

disperzní relace $\omega(\vec{k})$

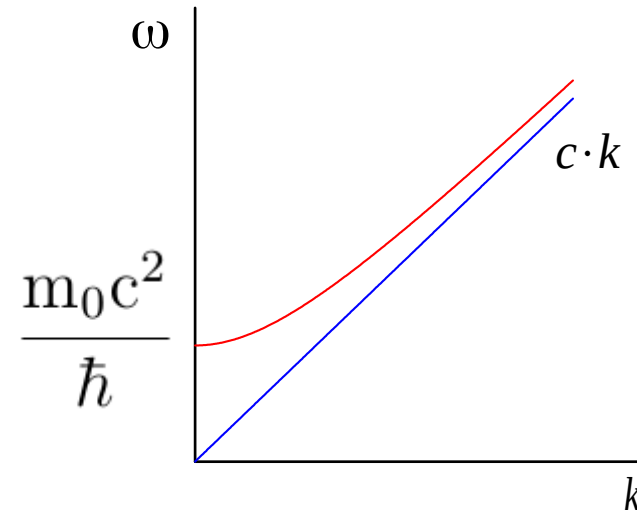
$$E = c^2 \sqrt{m_0^2 + \frac{p^2}{c^2}} \quad E = \hbar\omega$$
$$\vec{p} = \hbar\vec{k}$$

$$\omega(\vec{k}) = \frac{E(\vec{p})}{\hbar} = c \sqrt{\left(\frac{m_0 c}{\hbar}\right)^2 + k^2}$$

$$E = m_0 c^2 + E_k$$

celková \swarrow \downarrow \swarrow kinetická

klidová



(E_k je rozdíl celkové a klidové energie)

$$p = \sqrt{\frac{E_k^2}{c^2} + 2m_0 E_k}$$

$$v = c \sqrt{\frac{E_k (E_k + 2m_0 c^2)}{(E_k + m_0 c^2)^2}}$$

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

limitní případy

$$p = \sqrt{\frac{E_k^2}{c^2} + 2m_0E_k}$$

$$E_k \gg m_0c^2$$

$$p = \frac{E_k}{c}$$

$$E_k \ll m_0c^2$$

$$p = \sqrt{2m_0E_k}$$

$$v = c \sqrt{\frac{E_k(E_k + 2m_0c^2)}{(E_k + m_0c^2)^2}}$$

$$v \approx c$$

$$v = \sqrt{\frac{2E_k}{m_0}}$$

$$\lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{2\pi\hbar}{\hbar k} = \frac{h}{p}$$

$$\lambda = \frac{hc}{E_k}$$

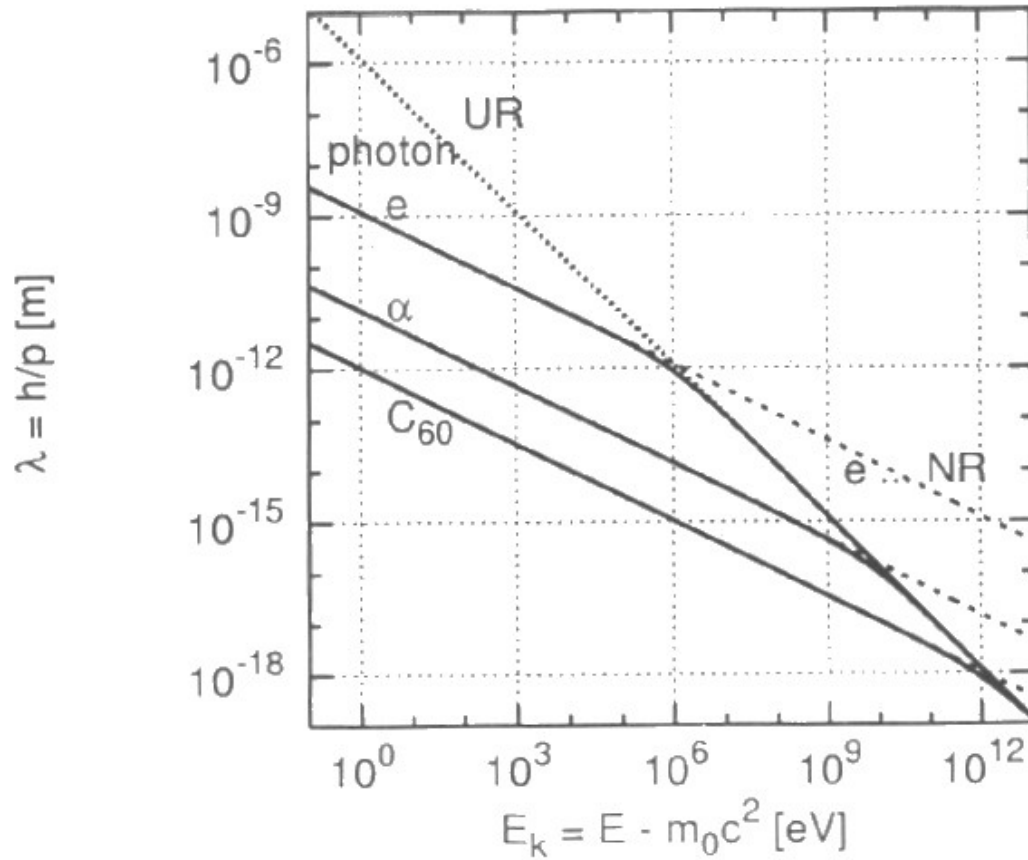
$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m_0E_k}}$$

$$\lambda = \frac{hc}{E_k \text{ (eV)} |e|}$$

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m_0|e|E_k \text{ (eV)}}}$$

$$E_{k,zlom} = c^2 \frac{2m_0}{|e|}$$

Atomová fyzika a elektronová struktura látek



$$E_{k,zlom} = c^2 \frac{2m_0}{|e|}$$

e $E_{k,zlom} \approx 1 \cdot 10^6$ eV

$\alpha = He^{++}$ $E_{k,zlom} \approx 4 \cdot 10^9$ eV

C_{60} $E_{k,zlom} \approx 7 \cdot 10^{11}$ eV

částice	m_0	$\frac{h}{\sqrt{2m_0 e }}$
e	m_e	$1.22 \cdot 10^{-9}$
$\alpha = He^{++}$	$\sim 4u$	$\lambda(\text{nm}) = \sqrt{\frac{1.5}{E_k(\text{eV})}}$ $2.9 \cdot 10^{-11} \frac{1}{\sqrt{A}}$
C_{60}	$\sim 720u$	

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Elektron jako vlna

nerelativisticky ($E_k \ll m_0 c^2$)

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m_0 |e| E_k \text{ (eV)}}}$$

$$\lambda(\text{nm}) = \sqrt{\frac{1.5042}{E_k \text{ (eV)}}}$$

E(ev)	$\lambda(\text{nm})$	difrakční režim
1.5	1.0	-
150	0.1	LEED
15000	0.01	HEED



George Paget Thomson
(1892-1975)



Clinton Joseph Davisson
(1881-1958)

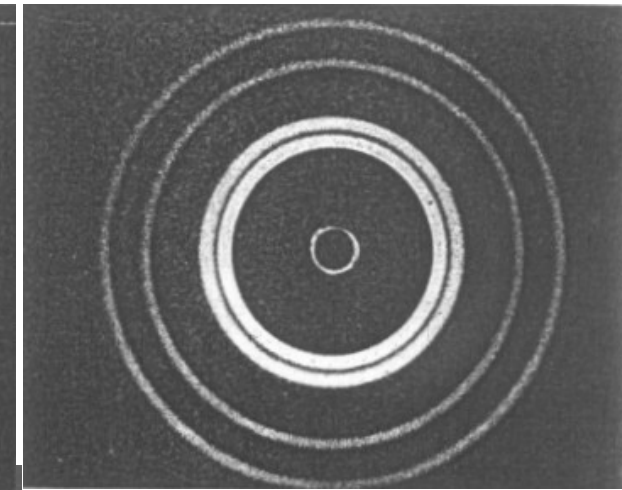
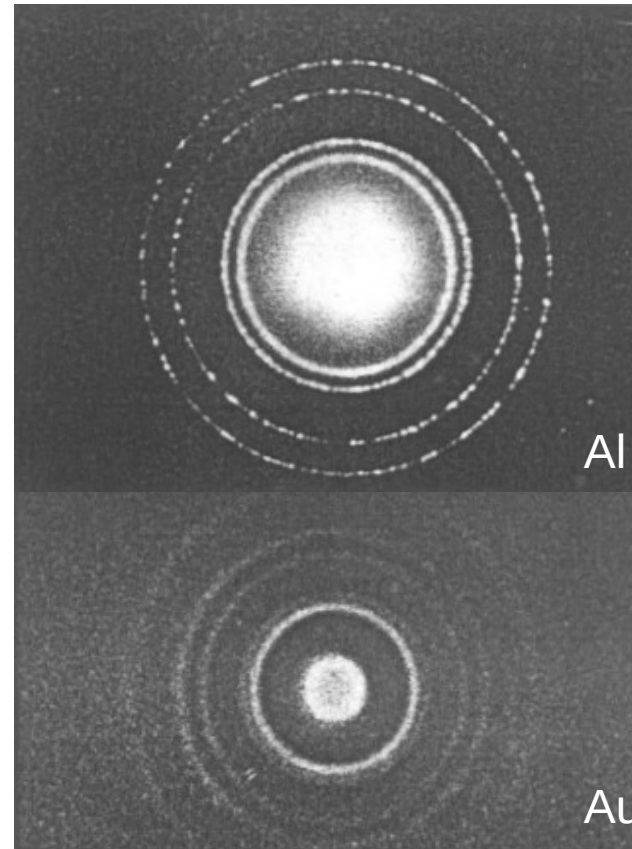
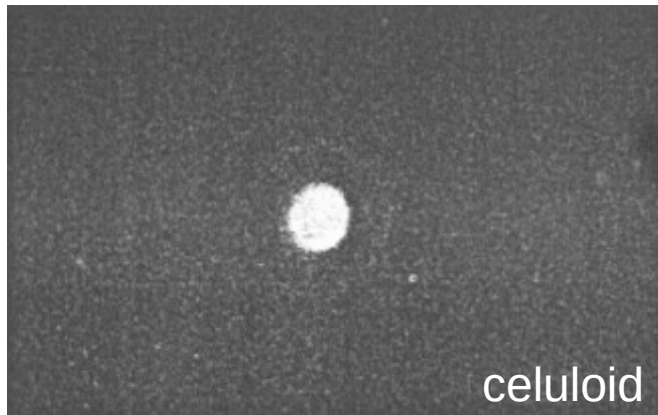
(~1925: HEED na průchod)

$E \sim 40 \text{ keV} \rightarrow \lambda \ll d \rightarrow \theta \text{ malé}$

Nobelova cena 1937

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Elektron jako vlna



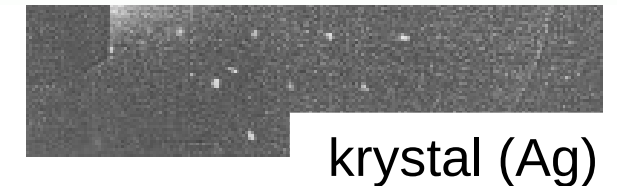
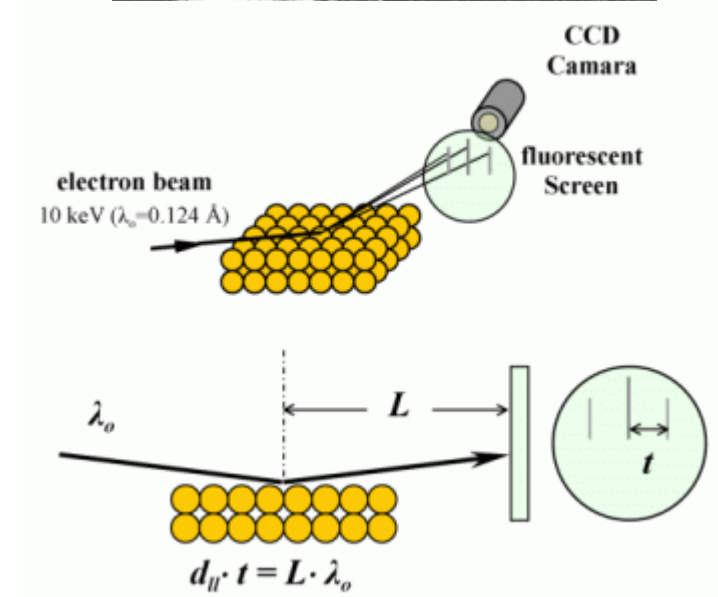
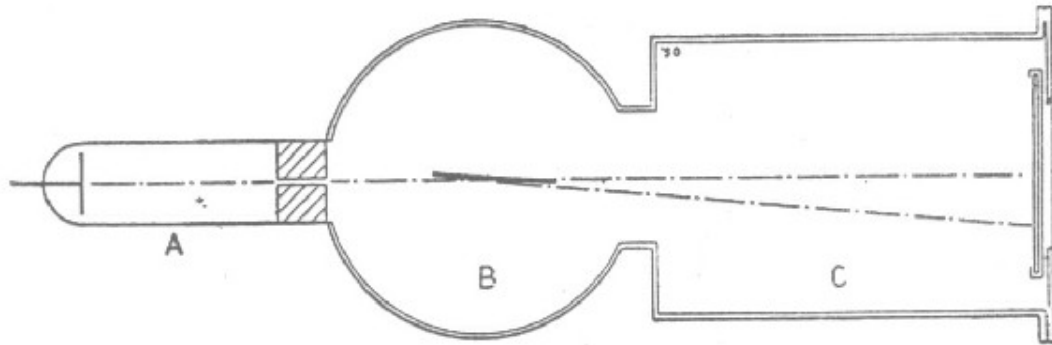
Al rtg

Kov	Mřížková konstanta [Å]	
	z interference elektronů	z interference roentgenových paprsků
Al	4,035	4,063
Au	3,99 až 4,20	4,06
Pt	3,89	3,91
Pb	4,99	4,92
Fe	2,85	2,86

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Elektron jako vlna

RHEED – Reflected HEED

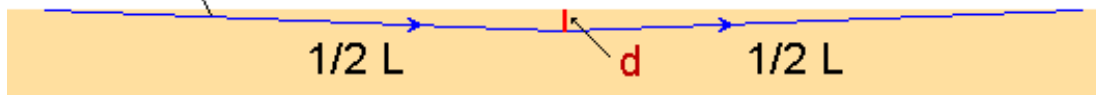


$$\theta \sim 1^\circ \rightarrow d/L \sim 0.017$$

$$L = 10 \text{ nm} \dots d < 0.2 \text{ nm}$$

vakuum

elektron



možno sledovat rŭst struktur vrstvu po vrstvě!



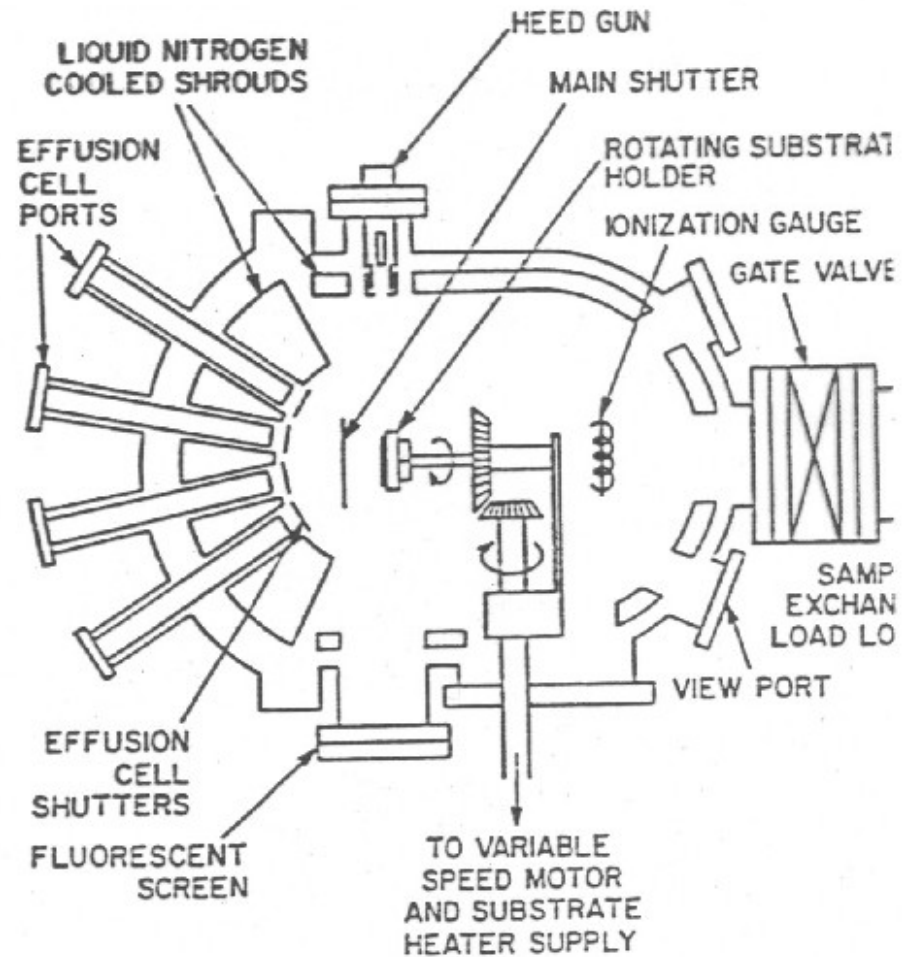
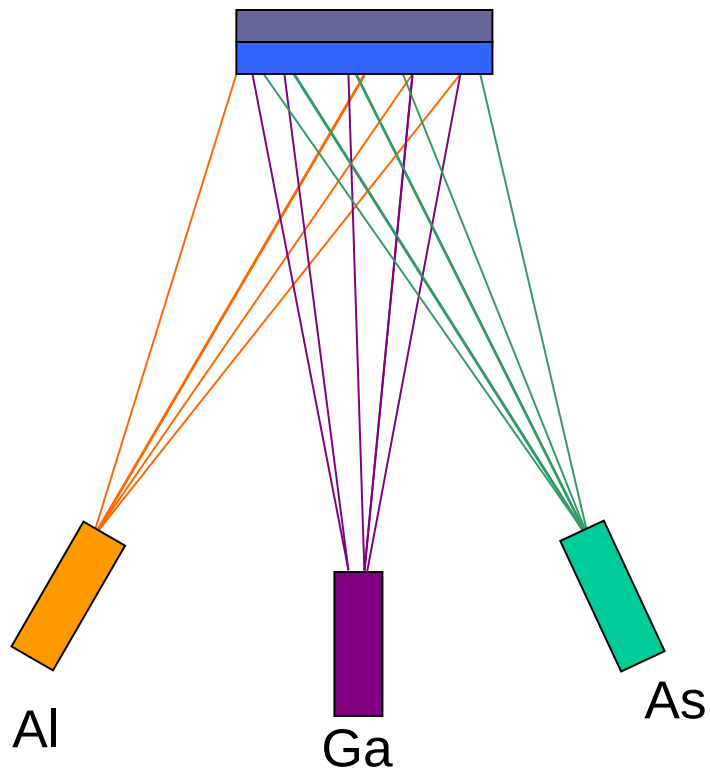
MBE

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Elektron jako vlna

RHEED – Reflected HEED

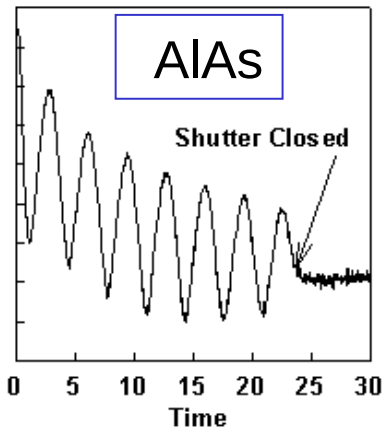
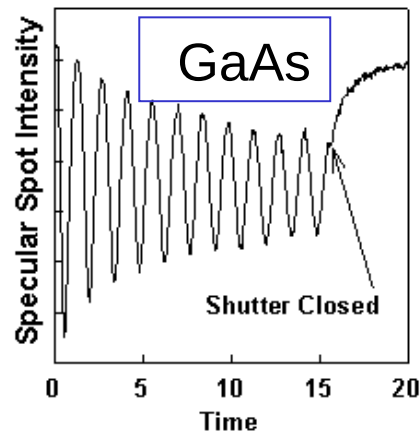
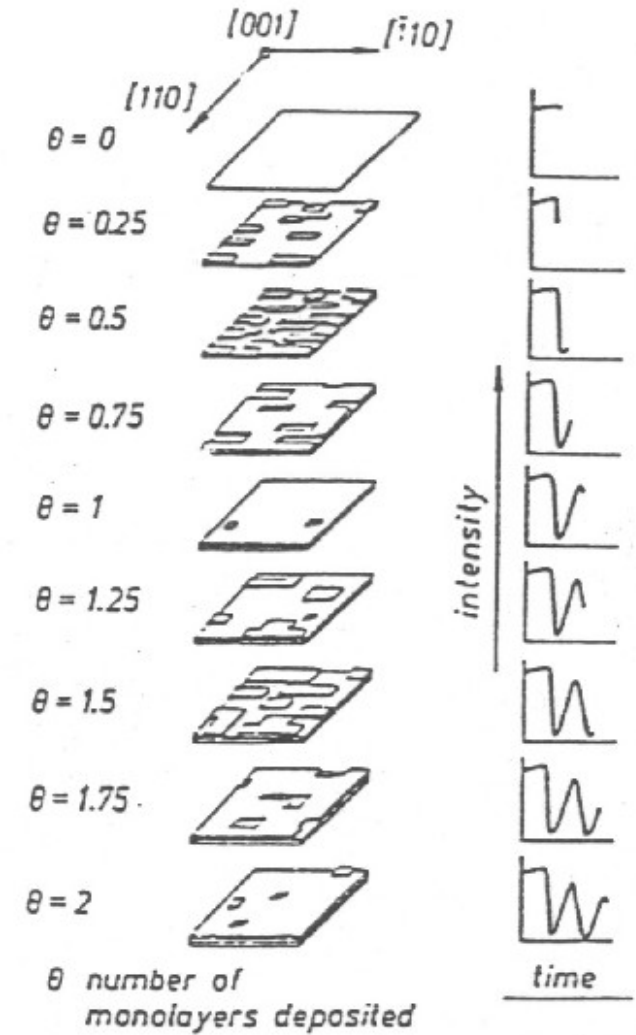
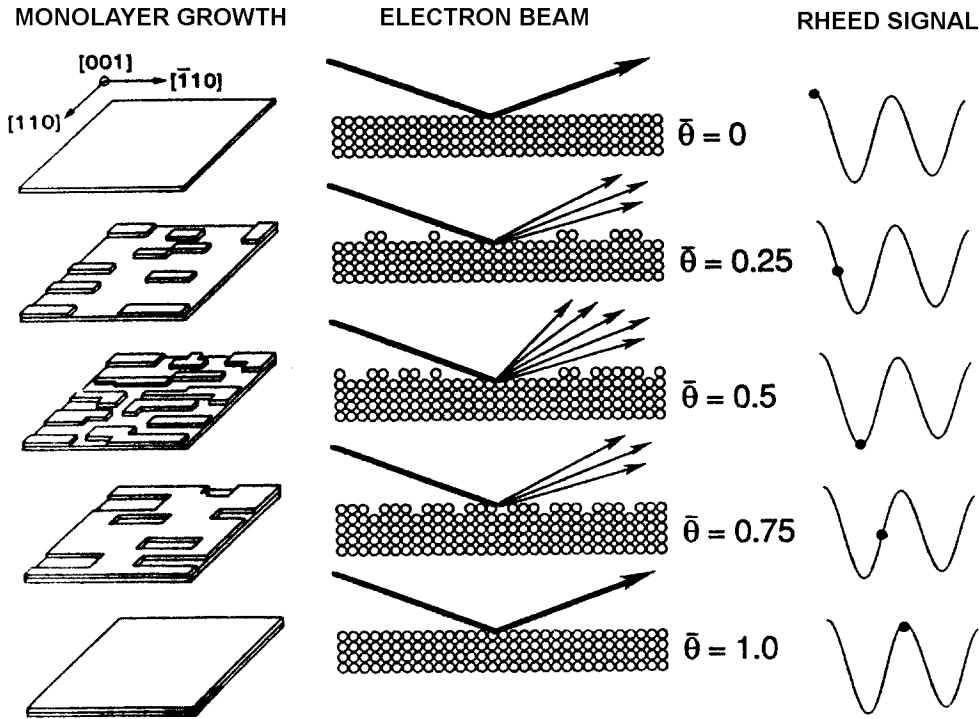
MBE Molecular Beam Epitaxy



Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Elektron jako vlna

RHEED – Reflected HEED



Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Elektron jako vlna

LEED – Low Energy Electron Diffraction

1927 ... Davisson, Germer (Bell lab.)



Journal of The Franklin Institute Devoted to Science and the Mechanic Arts

Vol. 206

MAY, 1928

No. 5

ARE ELECTRONS WAVES? *

BY

C. J. DAVISSON, Ph.D.

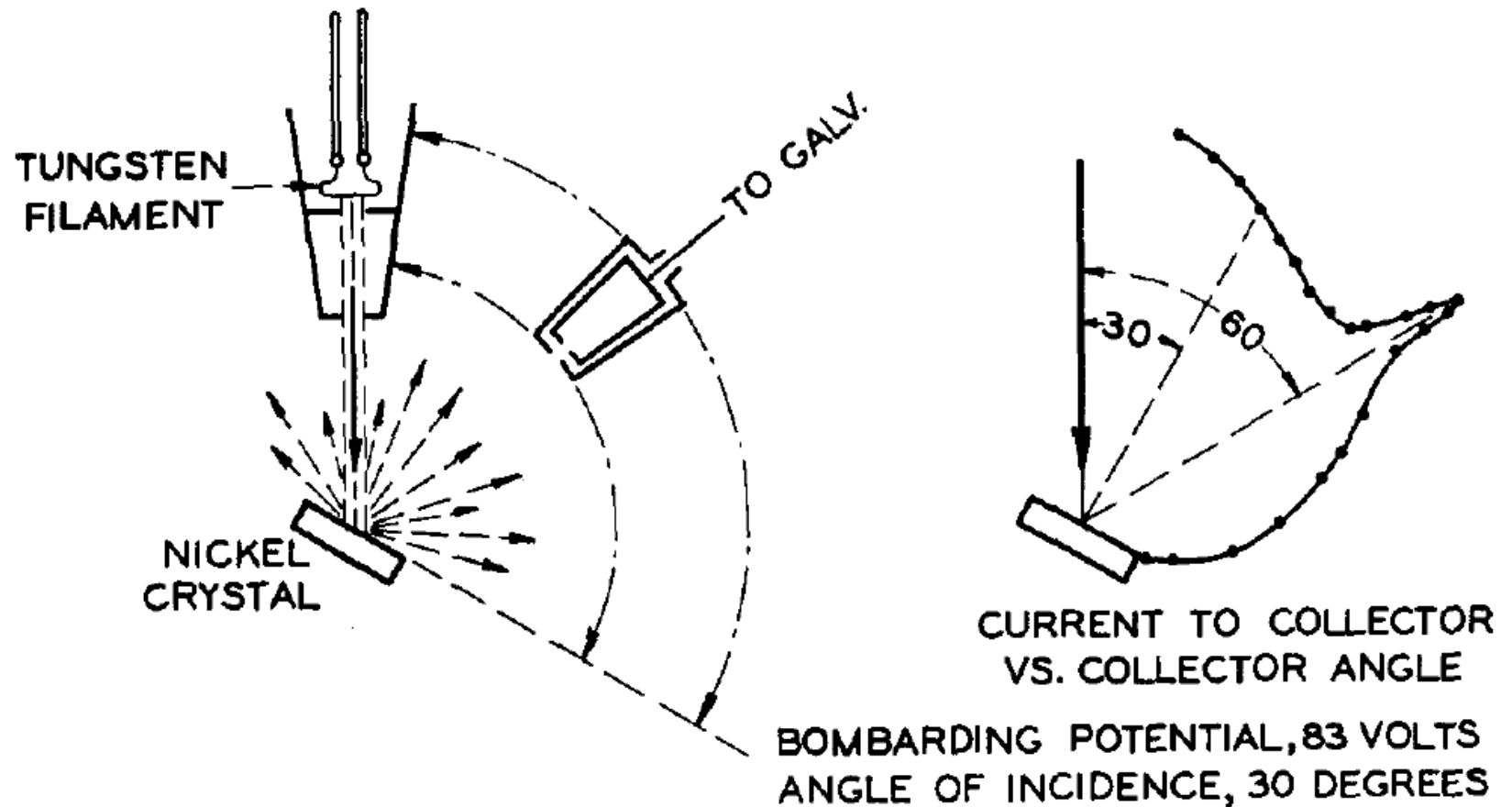
Bell Telephone Laboratories, Inc.

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Elektron jako vlna

LEED – Low Energy Electron Diffraction

1927 ... Davisson, Germer (Bell lab.)



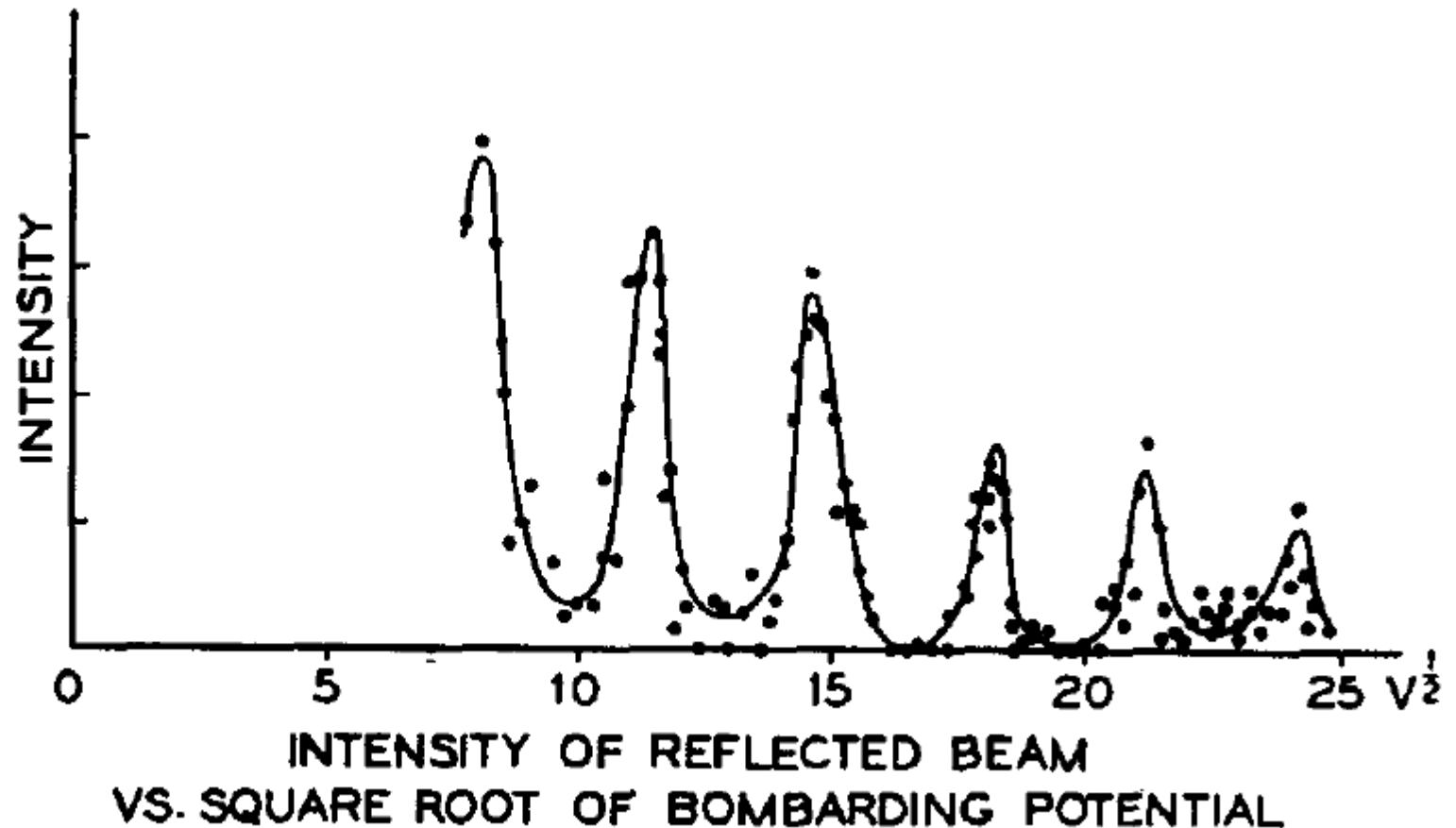
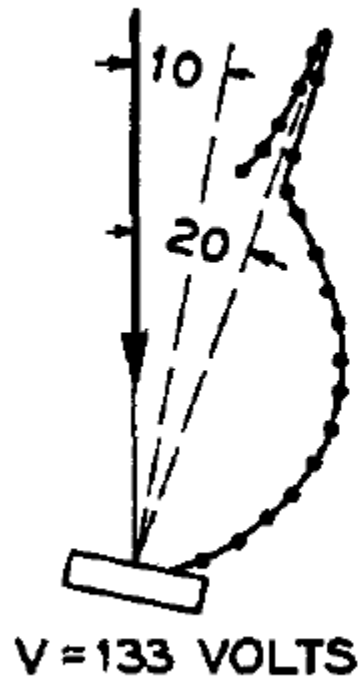
$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2m_e|e|U}} = \frac{1.2264}{\sqrt{U}} \text{ nm}$$

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Elektron jako vlna

LEED – Low Energy Electron Diffraction

1927 ... Davisson, Germer (Bell lab.)



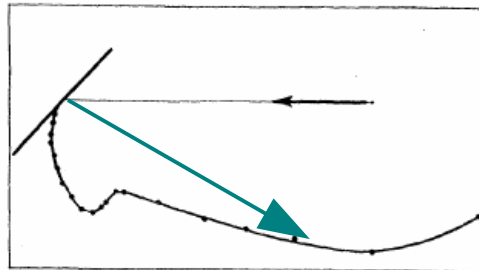
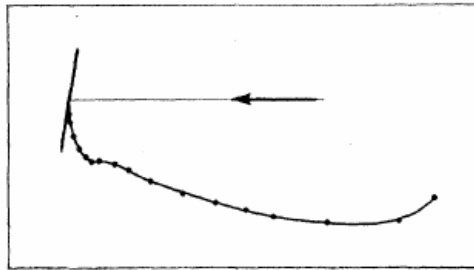
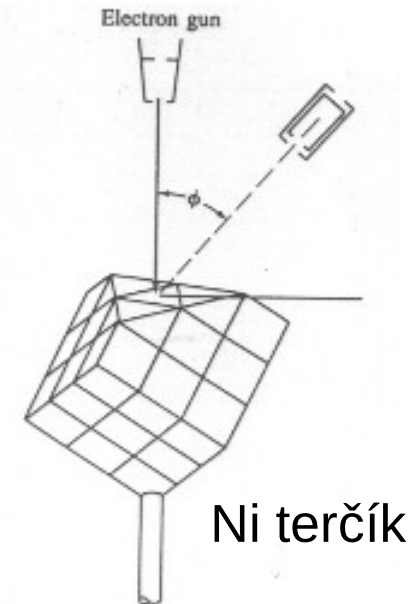
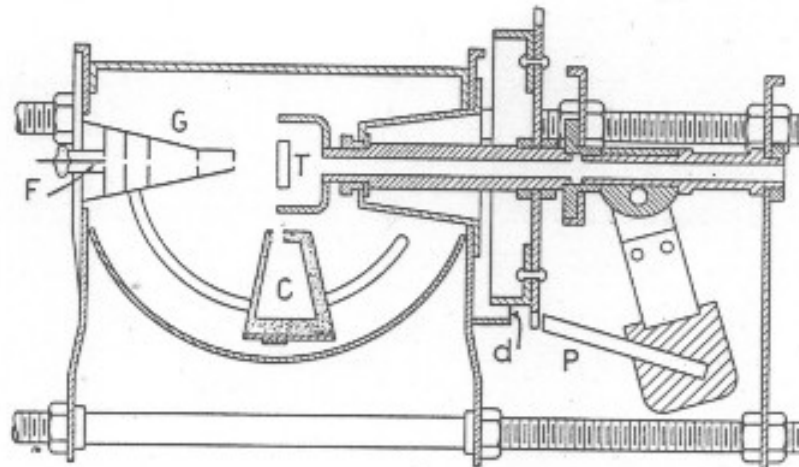
$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2m_e|e|U}} = \frac{1.2264}{\sqrt{U}} \text{ nm}$$

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

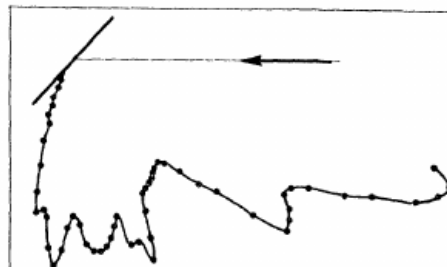
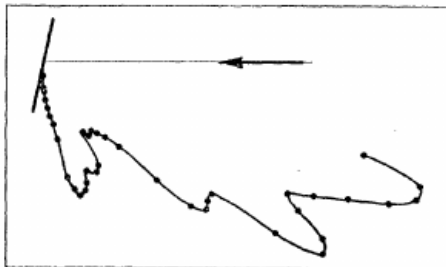
Elektron jako vlna

LEED – Low Energy Electron Diffraction

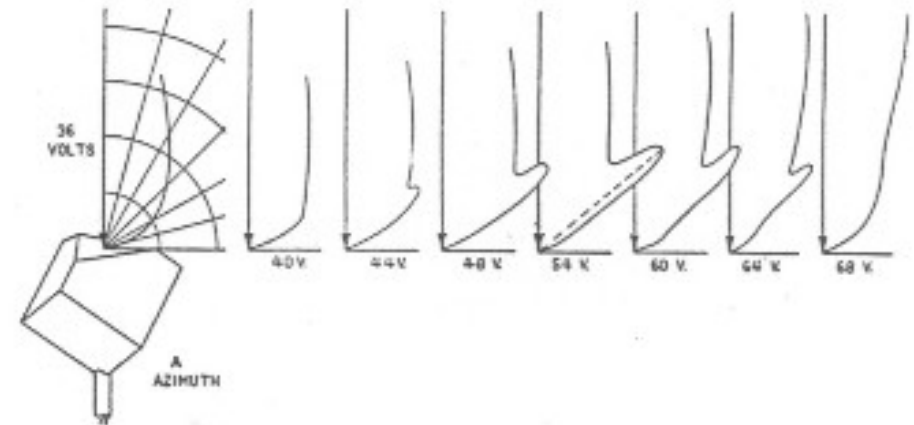
1927 ... Davisson, Germer (Bell lab.)



SCATTERING OF 75 VOLT ELECTRONS FROM A BLOCK OF NICKEL (MANY SMALL CRYSTALS)



SCATTERING OF 75 VOLT ELECTRONS FROM SEVERAL LARGE NICKEL CRYSTALS



As you see, it is really all very simple.

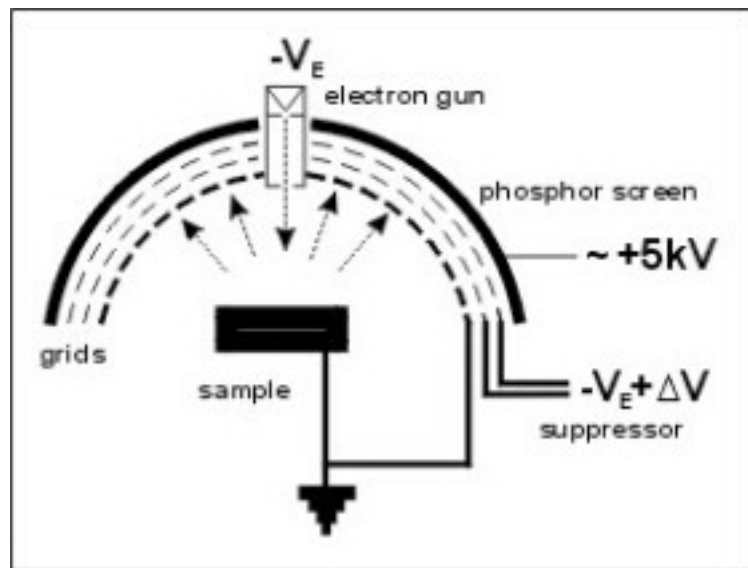
Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Elektron jako vlna

LEED – Low Energy Electron Diffraction

... ~ 20 - 500 eV

~ 1960 ... technologie UHV (ultra high vacuum) → velký rozvoj LEED
poměrně jednoduché, velká přesnost určení polohy atomů na povrchu

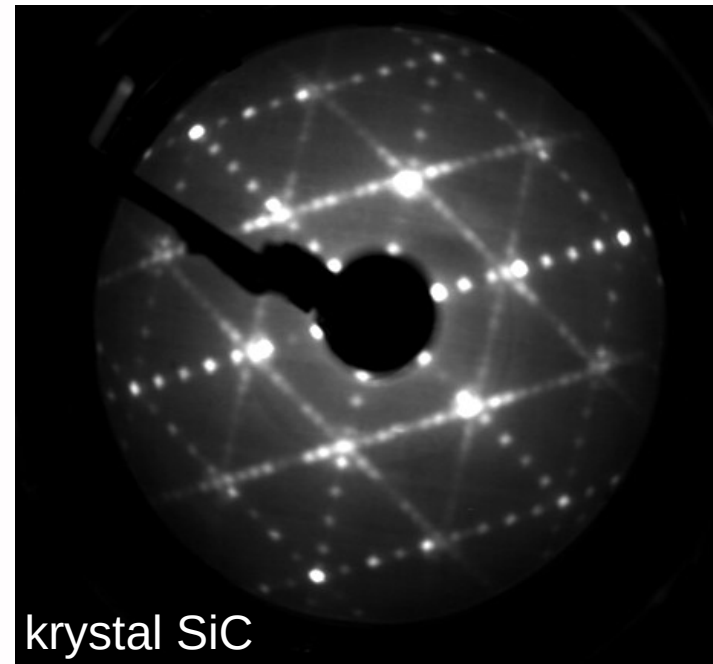


Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Elektron jako vlna

LEED – Low Energy Electron Diffraction

LEED – povrch – 2D difrakční podmínky



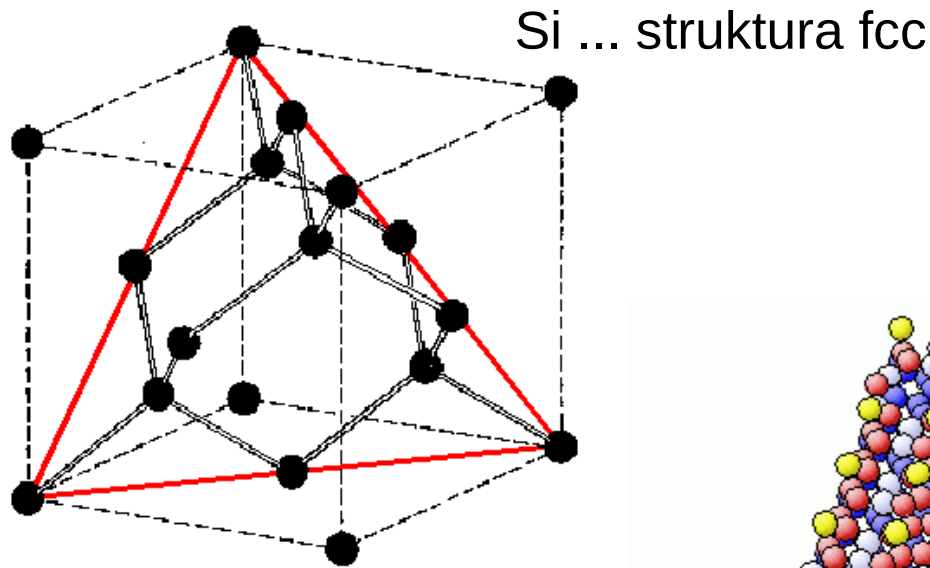
Direct lattice

Reciprocal lattice

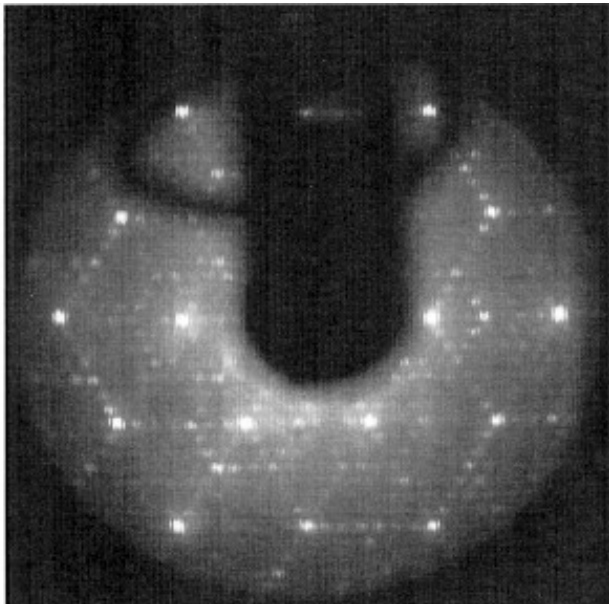
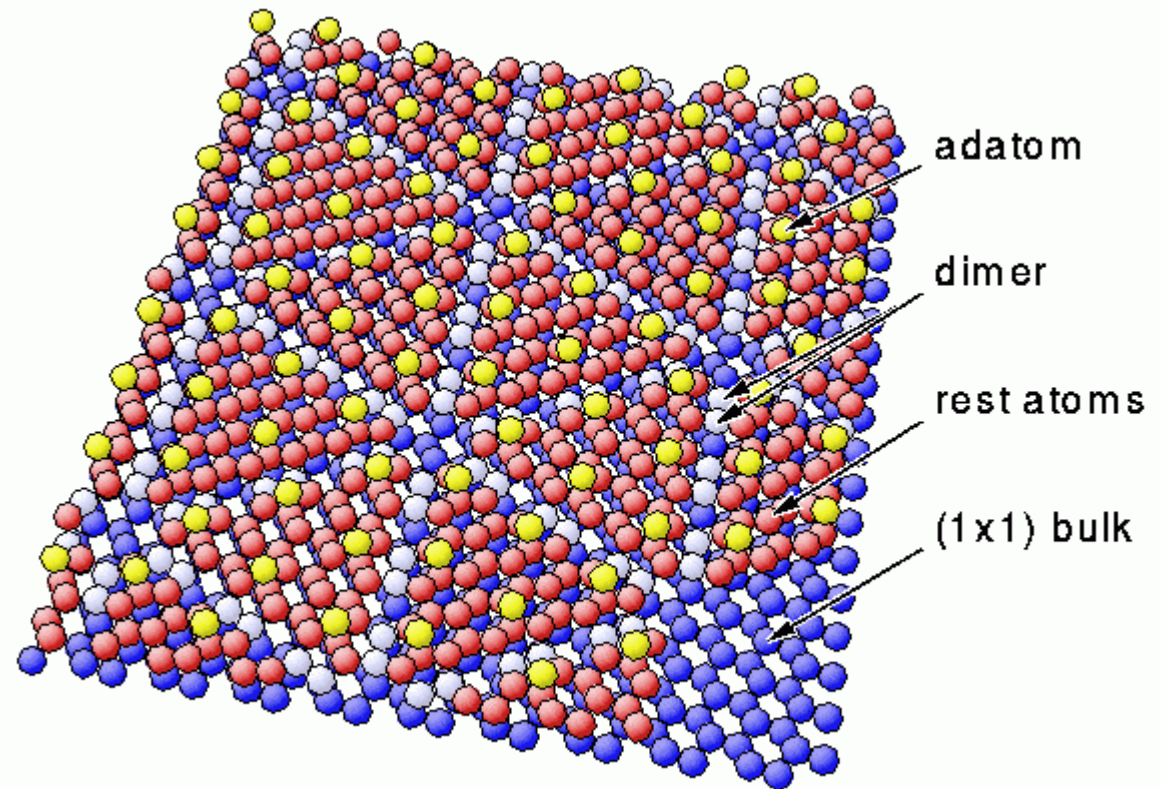
Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Elektron jako vlna

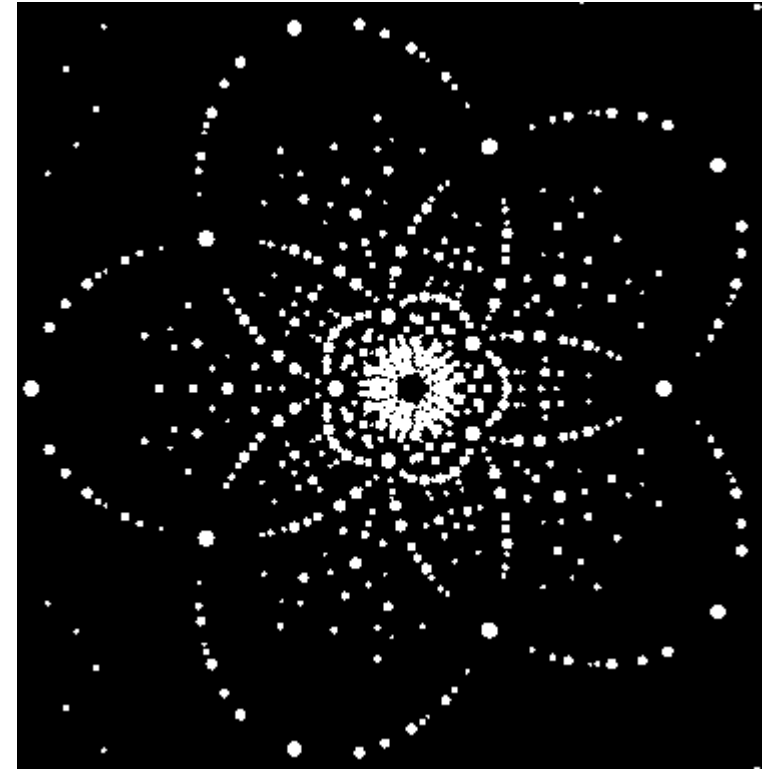
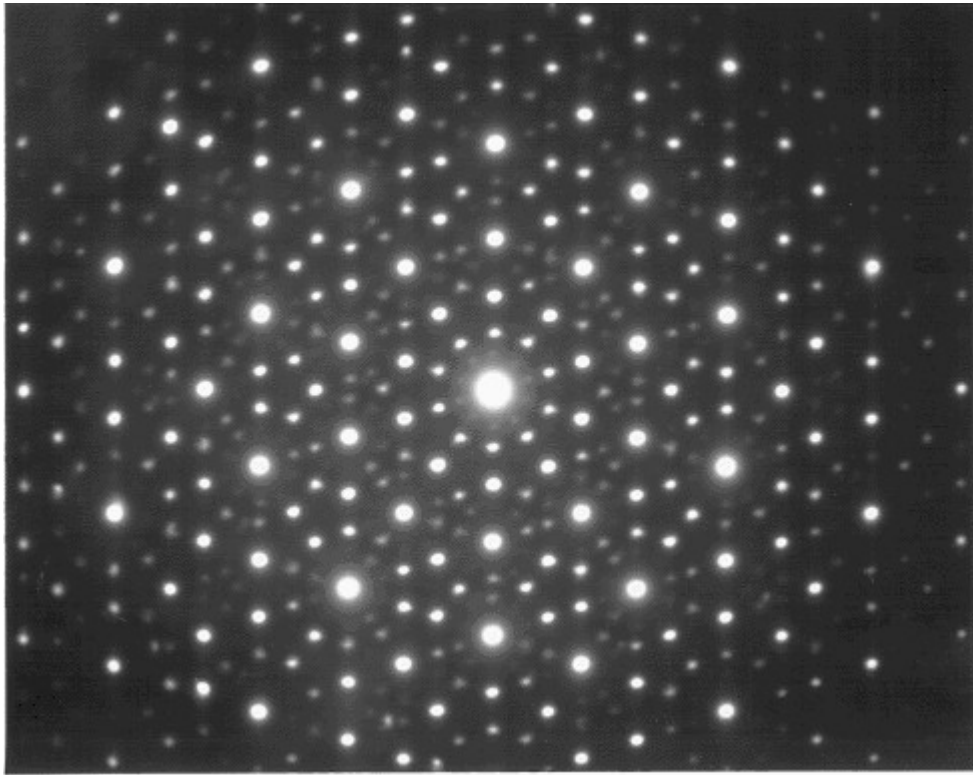
LEED – Low Energy Electron Diffraction



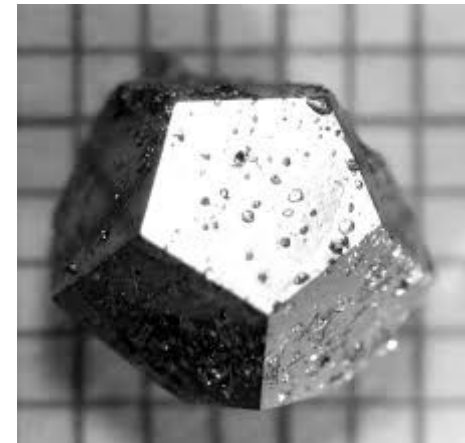
pohled na rovinu (111)



Atomová fyzika a elektronová struktura látek

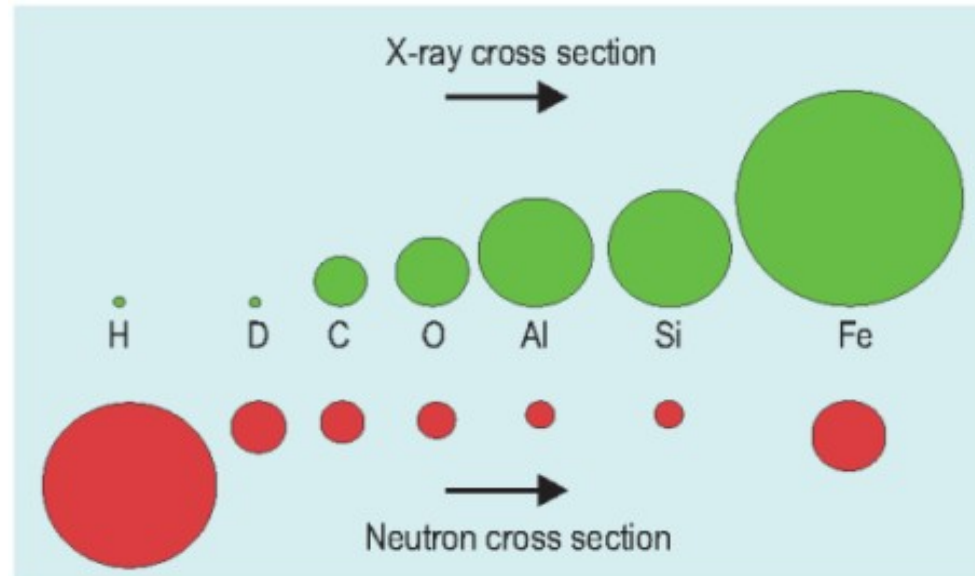


kvazikrystaly

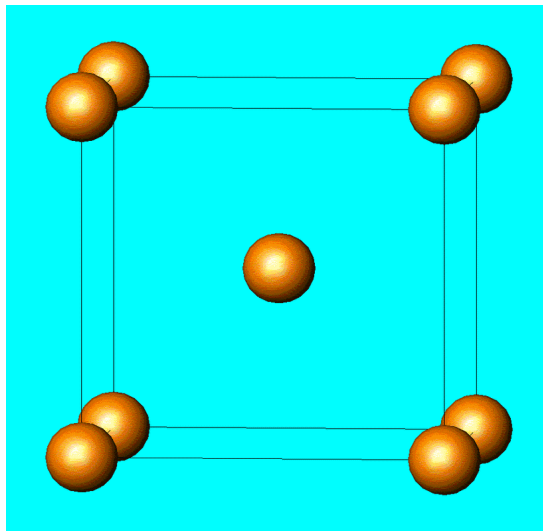


Atomová fyzika a elektronová struktura látek

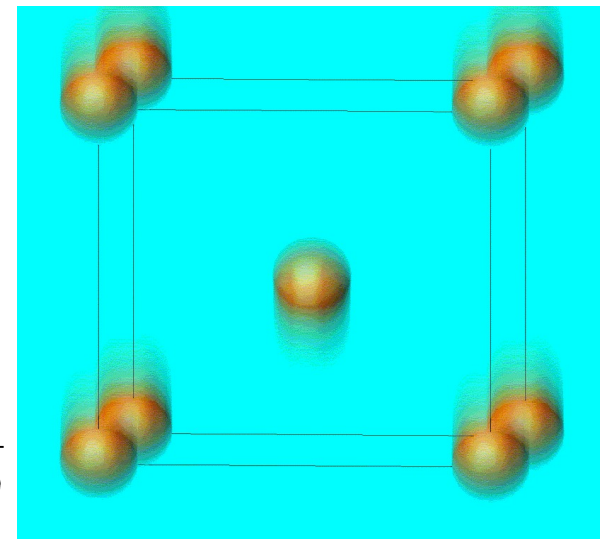
Rozptyl neutronů



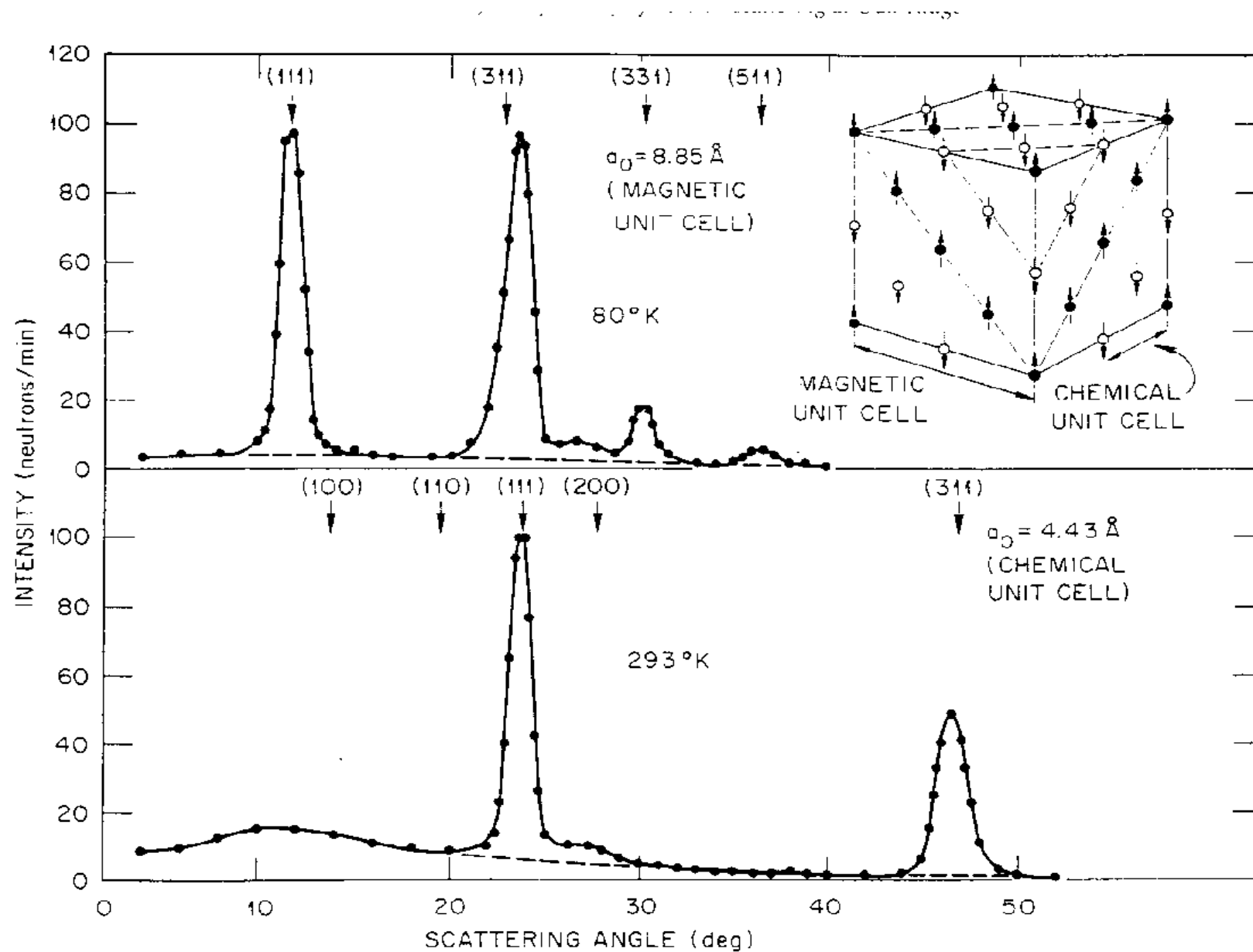
$$I \approx |F(\vec{q})|^2 = \sum_n \sum_m f_n^* f_m e^{-i\vec{q}(\vec{R}_n - \vec{R}_m)}$$



$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv}$$



Atomová fyzika a elektronová struktura látek



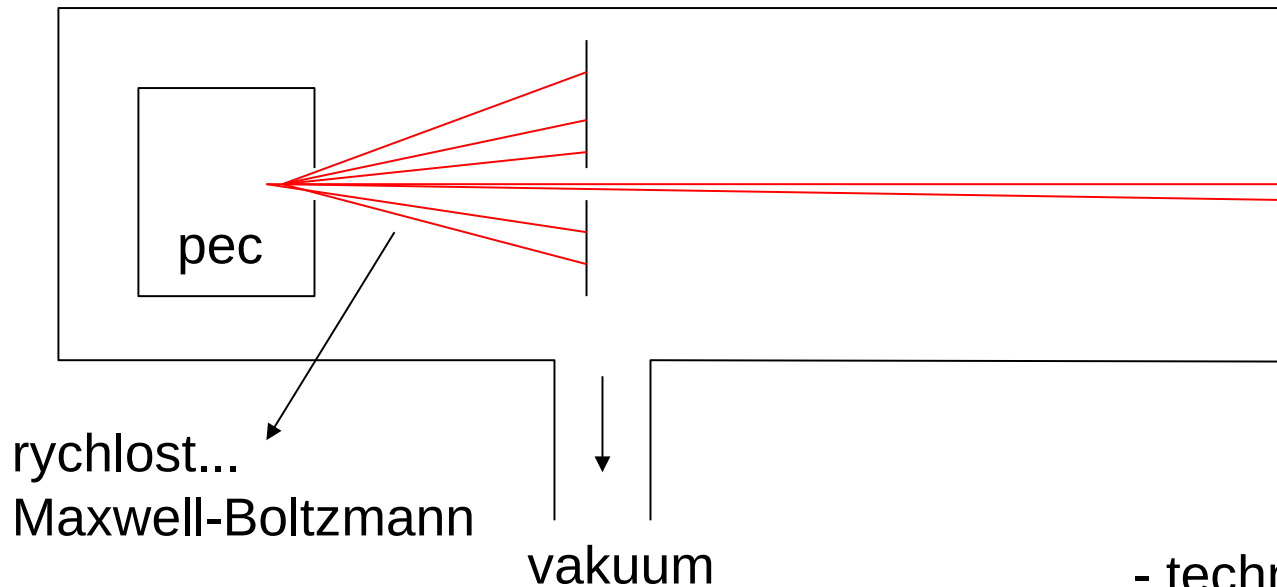
Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Vlnový charakter těžkých částic (molekuly, ...)

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m_0 |e| E_k \text{ (eV)}}}$$



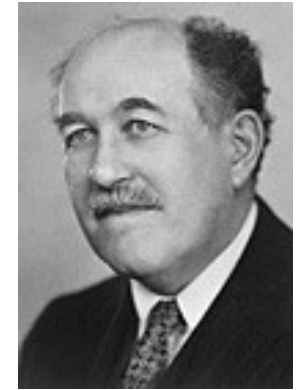
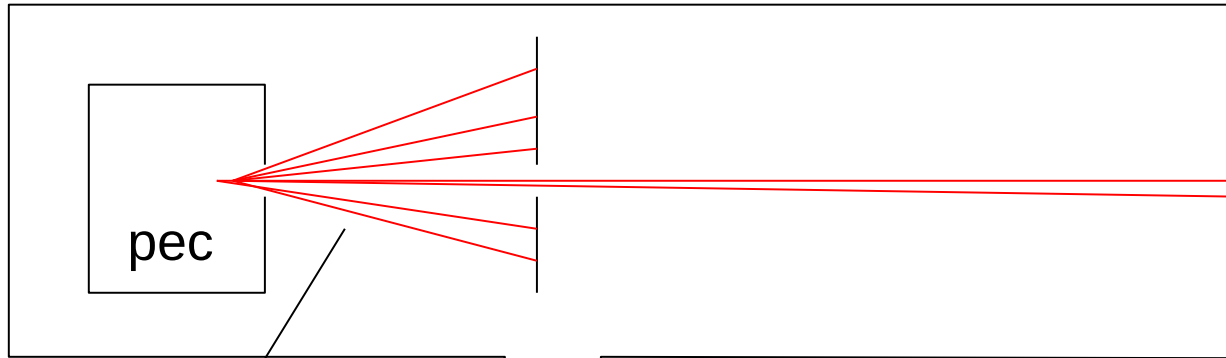
Otto Stern
(1888-1969)
N.c. 1943



- technika molekulových svazků
pozoroval difrakci molekul a atomů
- Stern-Gerlachův pokus

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Vlnový charakter těžkých částic (molekuly, ...)



Otto Stern
(1888-1969)

rychlost...
Maxwell-Boltzmann

vakuum

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad M = A \cdot u$$

$$\langle E_k \rangle = \frac{3}{2} k_B T = \frac{1}{2} M \langle v^2 \rangle$$

$$\frac{3}{2} k_B T M = \frac{1}{2} M^2 \langle v^2 \rangle$$

$$\frac{3}{2} k_B T M = \frac{1}{2} \langle p^2 \rangle = \frac{h^2}{2\lambda^2}$$

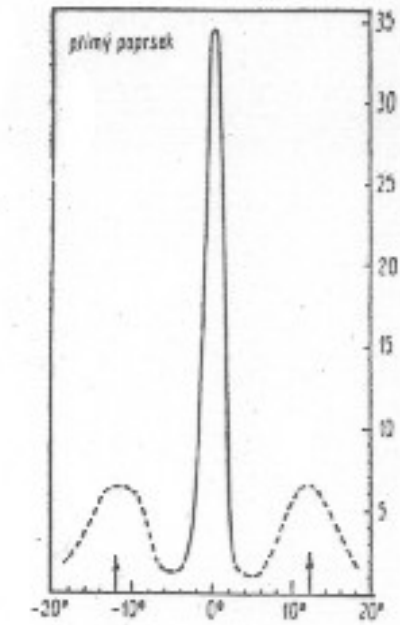
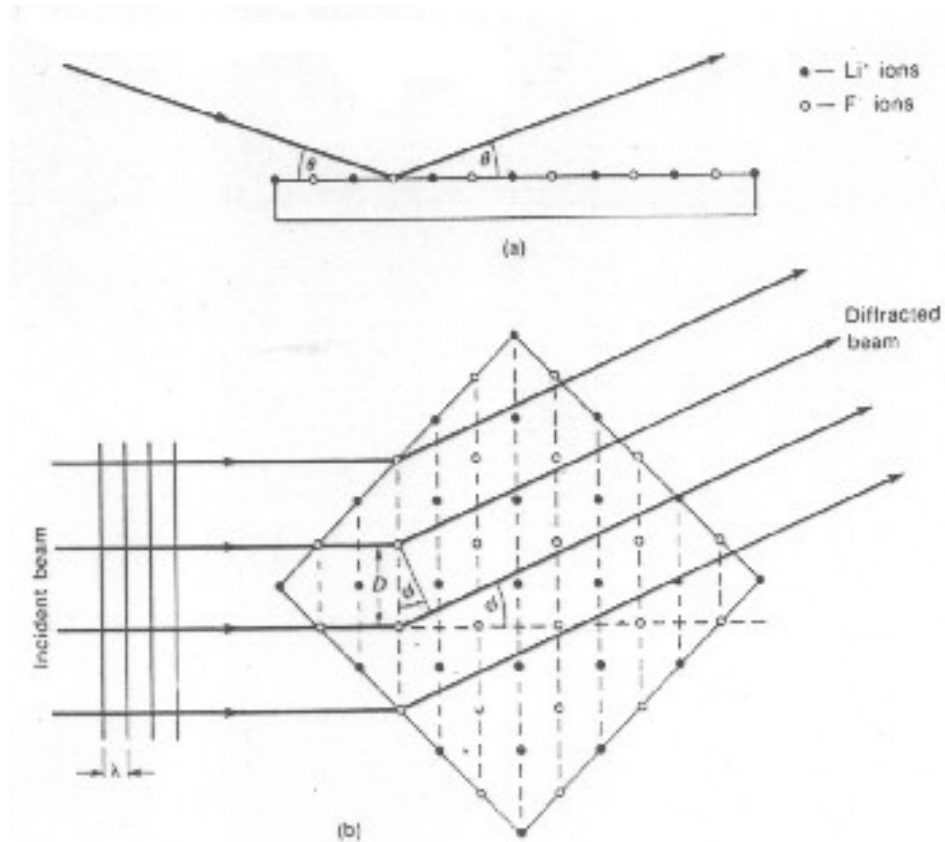
$$\sqrt{\langle v^2 \rangle} = 158 \sqrt{\frac{T}{A}}$$

$$\lambda = 2.5 \times 10^{-9} \frac{1}{\sqrt{AT}}$$

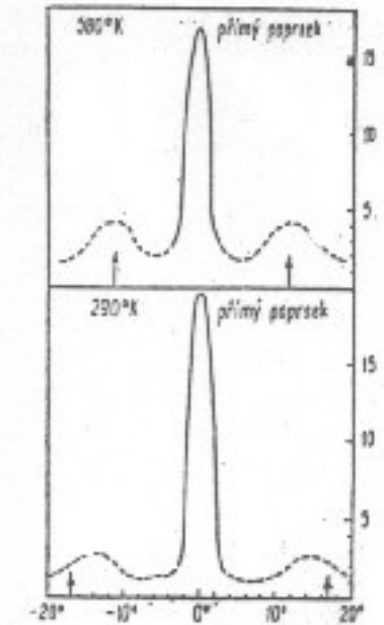
α - částice: $A=4$, $T=900$ K $\rightarrow \lambda = 4.2 \times 10^{-11}$ m

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Vlnový charakter těžkých částic (molekuly, ...)



Obř. 295. Difrakce atomů helia na krystalu fluoridu lithia.



Obř. 296. Difrakce molekul vodíku na krystalu fluoridu lithia.

difrakce atomů He (Ne) jedna z metod studia povrchů, je nedestruktivní