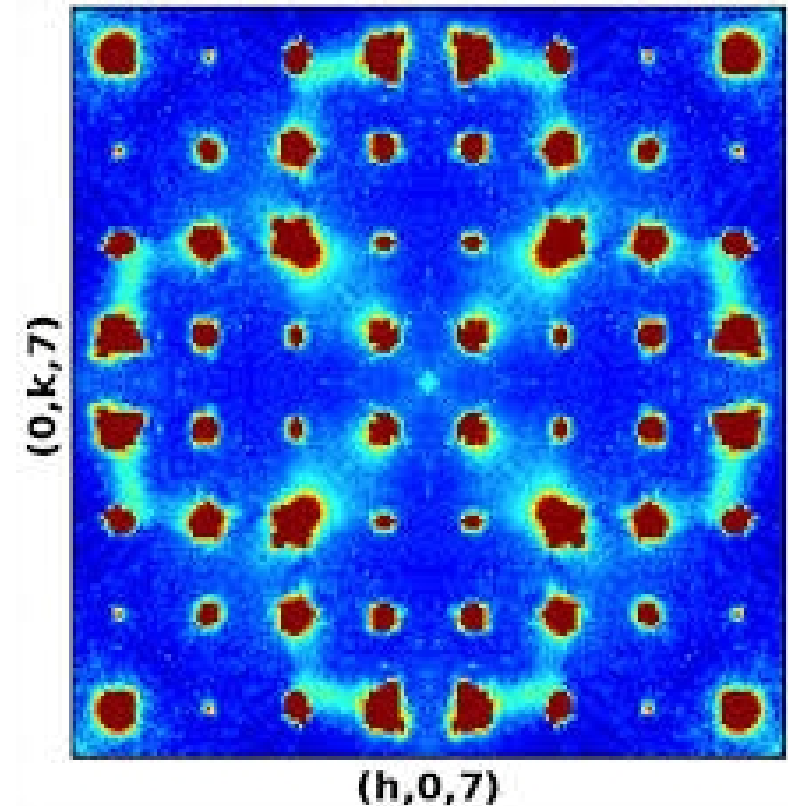
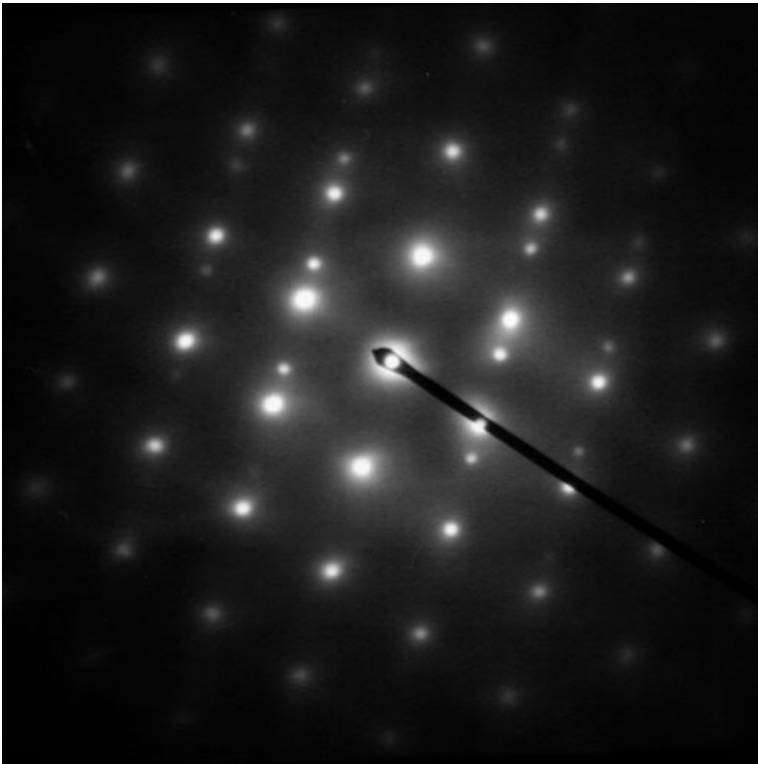


# Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Co byste měli po dnešní přednášce umět:

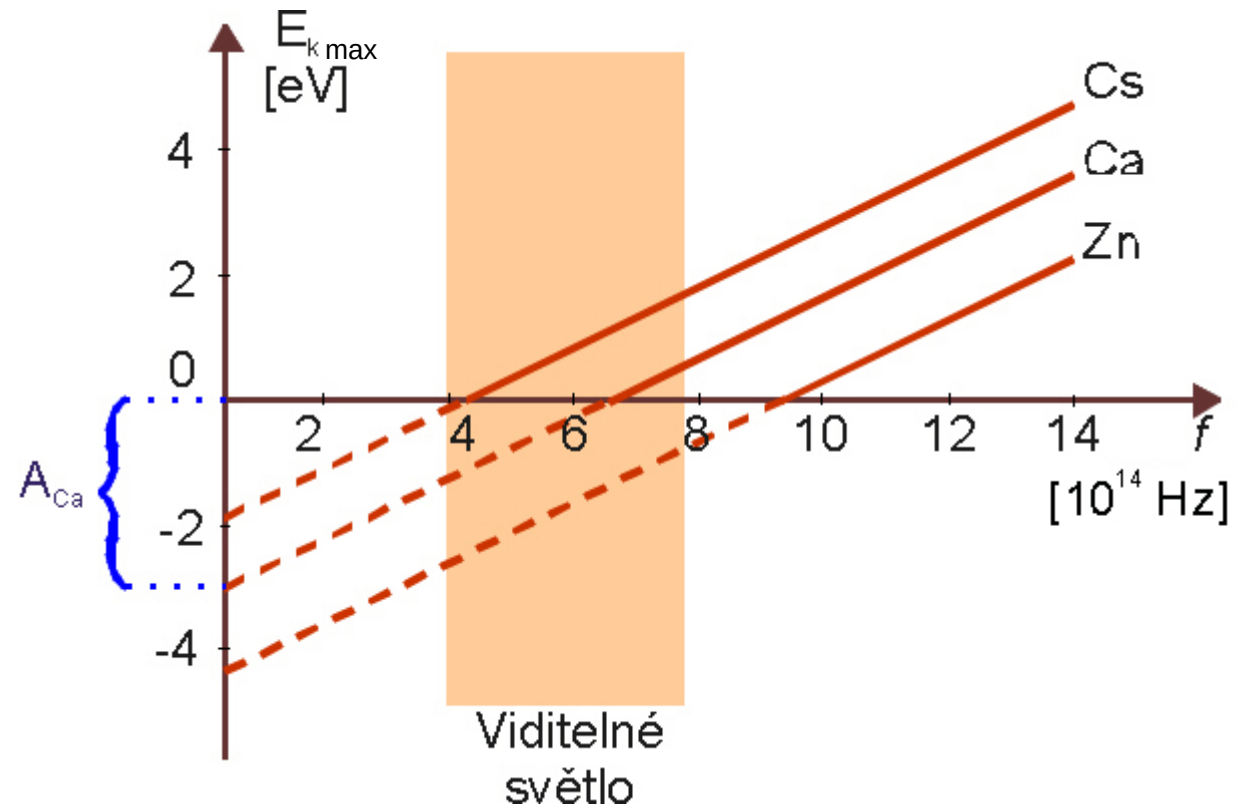
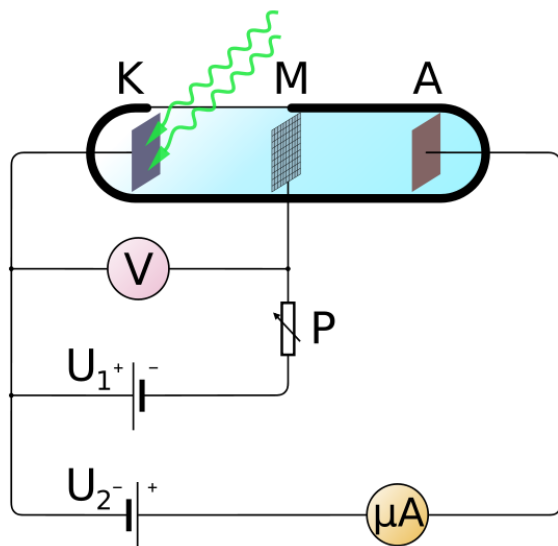
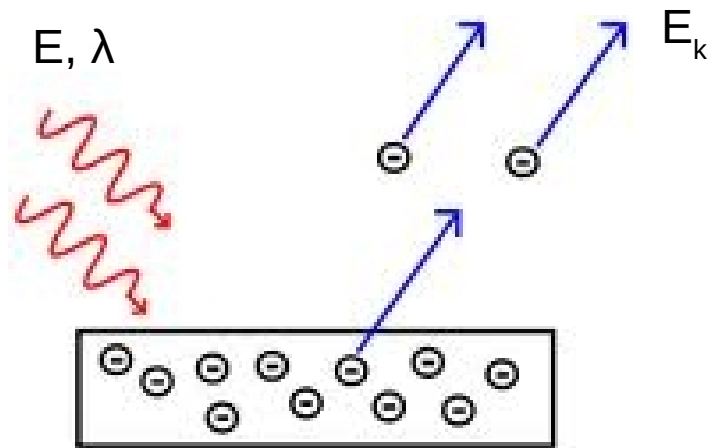
- definovat a ve správných souvislostech použít termíny: dualita vlna-částice, fotoefekt
- porovnat metody rozptylu fotonů/elektronů/neutronů
- prokázat na vhodném experimentu duální vlastnosti (vlna/částice) fotonů
- prokázat na vhodném experimentu duální vlastnosti (vlna/částice) elektronů
- vysvětlit 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

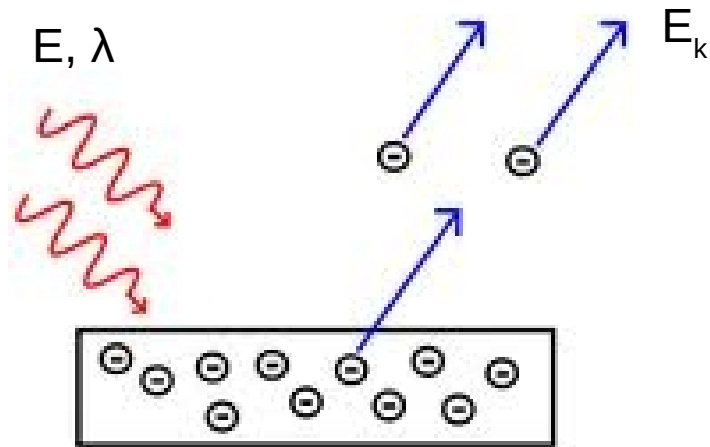
Fotoelektrický jev



# Atomová fyzika a elektronová struktura látek

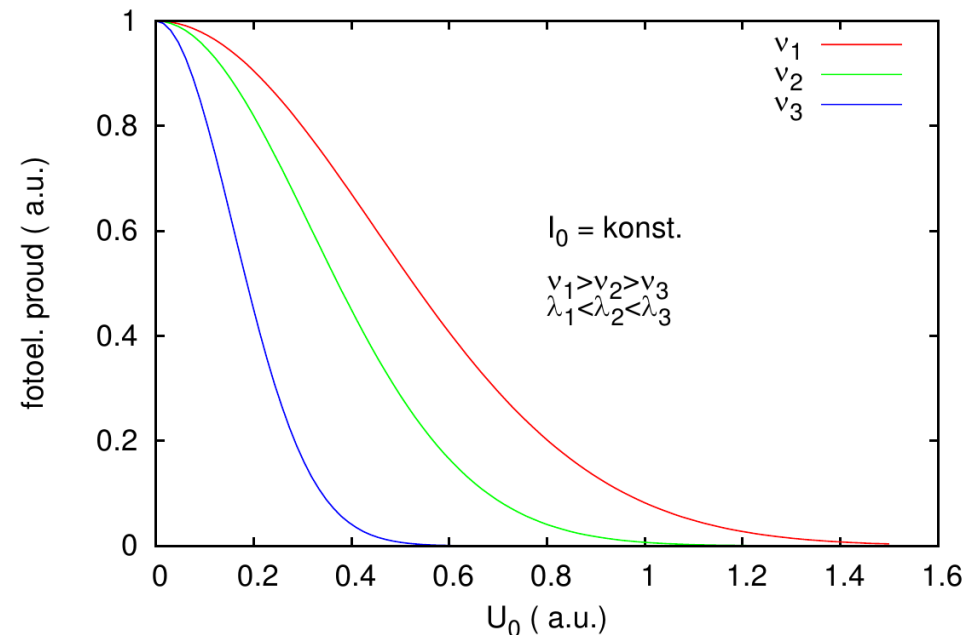
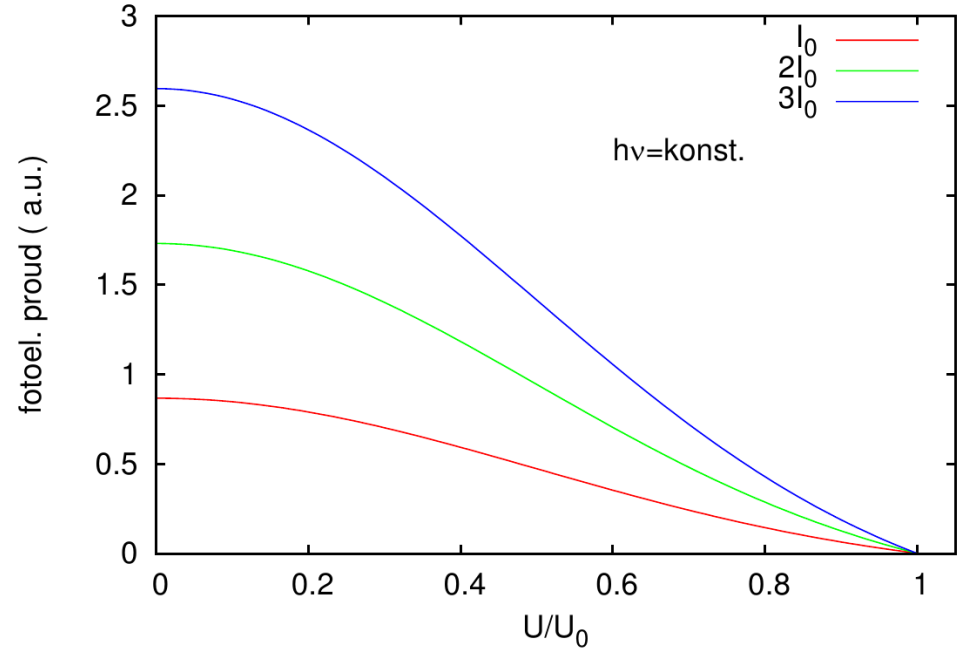
## Dualita částice -vlna

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)

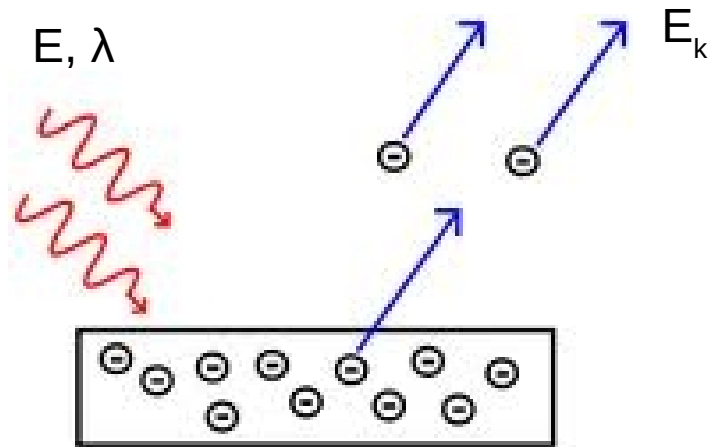


**foton se chová jako částice, nikoliv jako elmag.vlna !!**

# 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

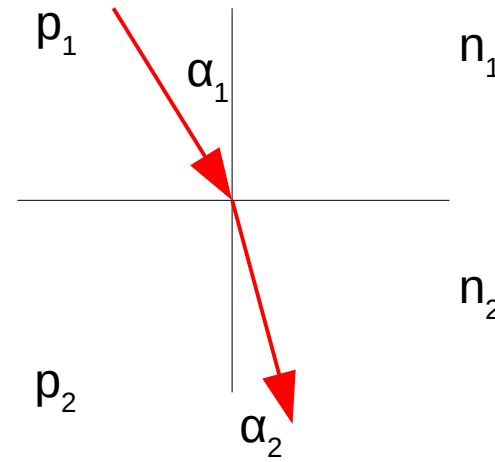
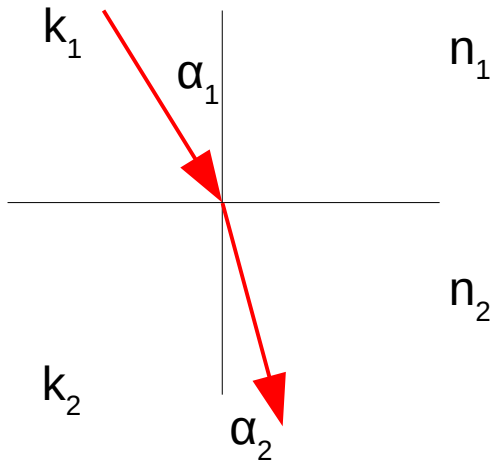
**Příklad:** Jaká je maximální kinetická energie fotoelektronů pro draslík ( $W=2\text{eV}$ ) při dopadu UV záření  $\lambda=3500 \text{ \AA}$ ?

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



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

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

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

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

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

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

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

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

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

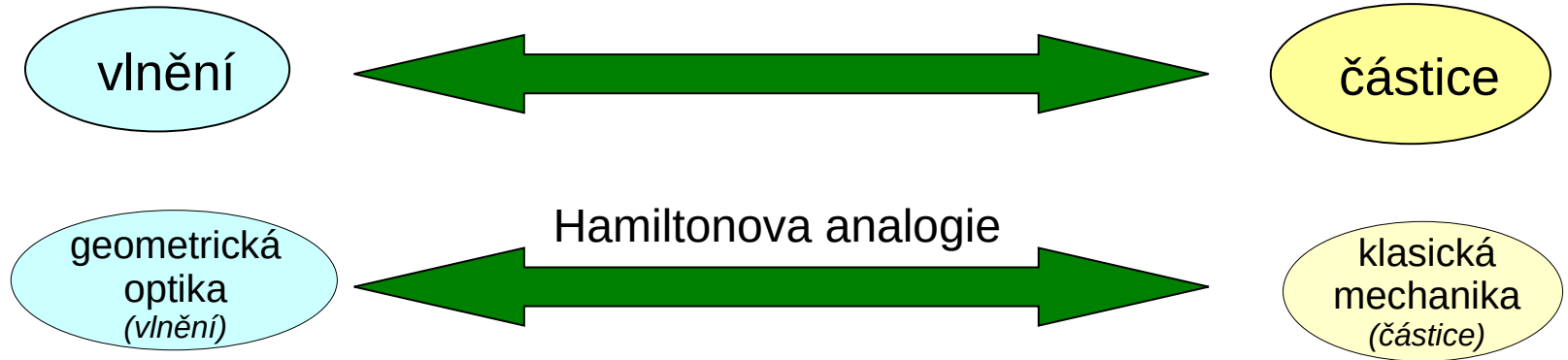
$$n_{1,2} = \frac{\sqrt{2m(E - U_{1,2})}}{\sqrt{2mE}}$$

# 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    | $\omega$  | $\vec{k}$ | $\omega(\vec{k})$ | $u_f = \frac{\omega}{k}$ | $u_g = \frac{d\omega}{dk}$ | $v = \frac{c^2}{u_f}$ |
| 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

$$\omega = ck$$

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

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

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

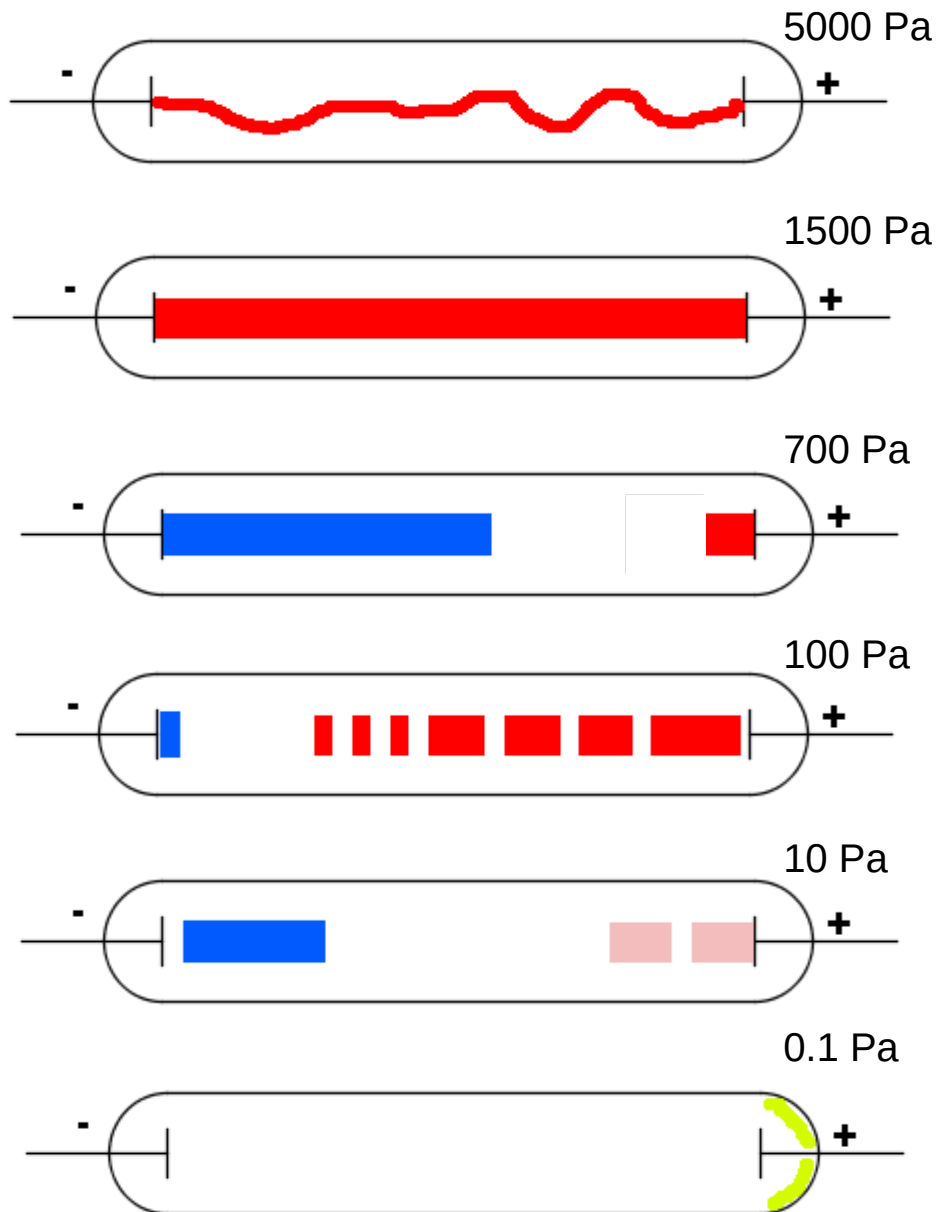
$$E = mc^2$$

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

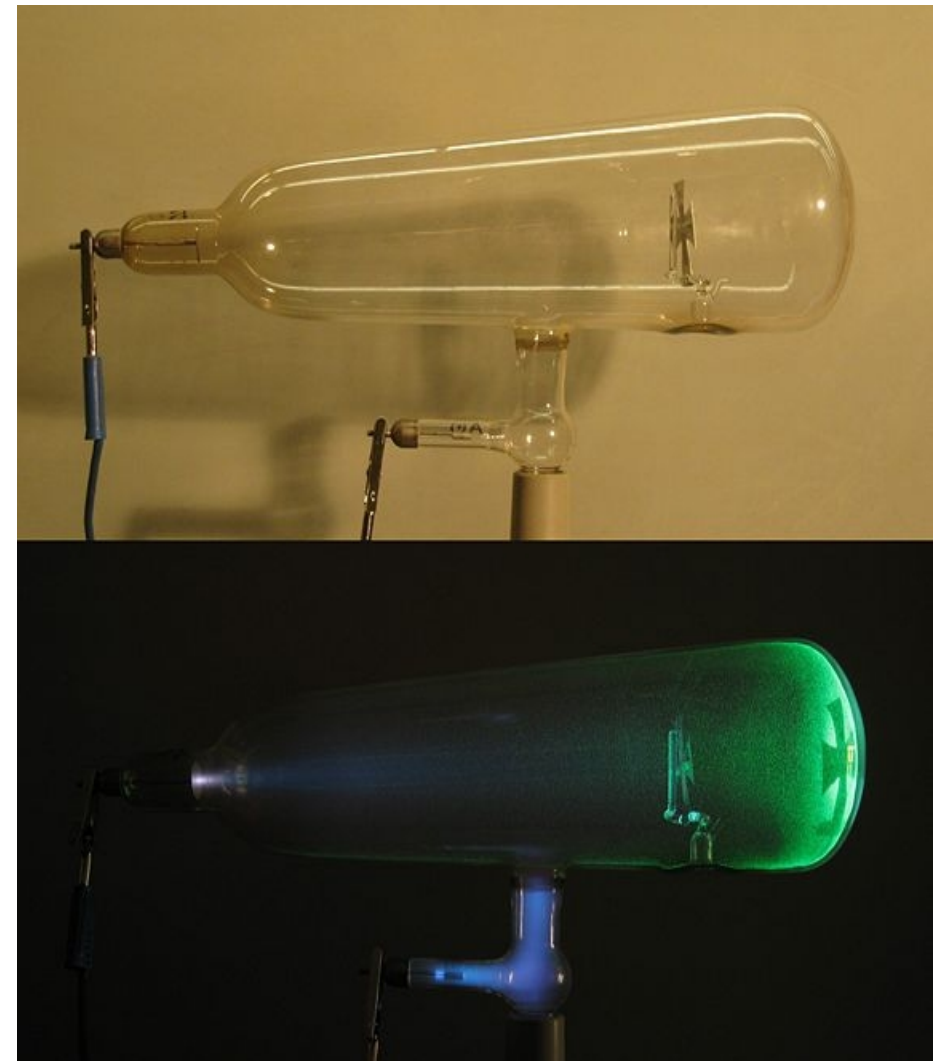
hmotné částice:  $E, p, v \longrightarrow \omega, k, u_f, u_g$        $\omega(\vec{k})$

# Atomová fyzika a elektronová struktura látek

## Výboje v plynech



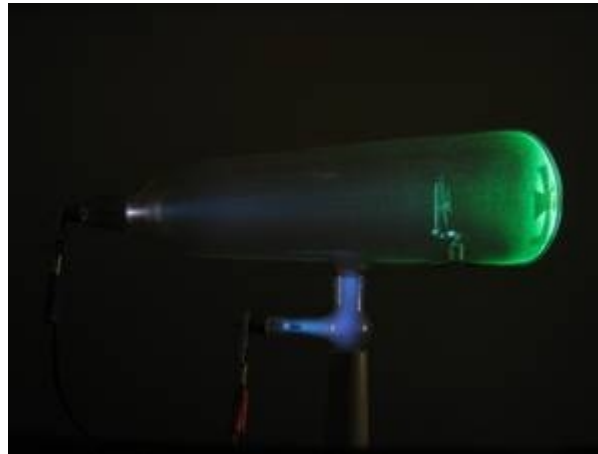
William Crooks – studium katodového záření





# Atomová fyzika a elektronová struktura látek

## Elektron jako částice



→ katoda emituje nějaké paprsky - katodové paprsky

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

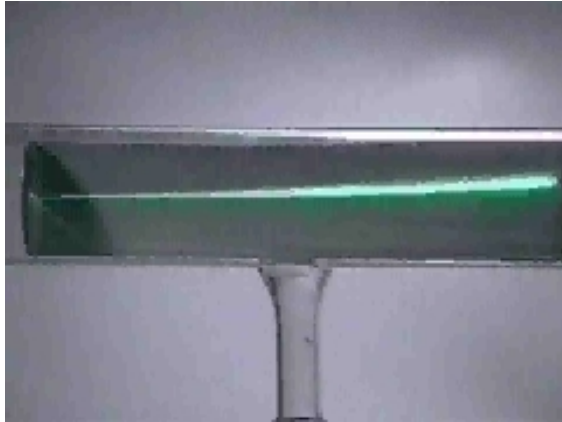
- vlny v neviditelné hmotě, tzv. éteru,  
něco jako světlo? (Goldstein, Hertz, and Lenard)



# Atomová fyzika a elektronová struktura látek

## Elektron jako částice

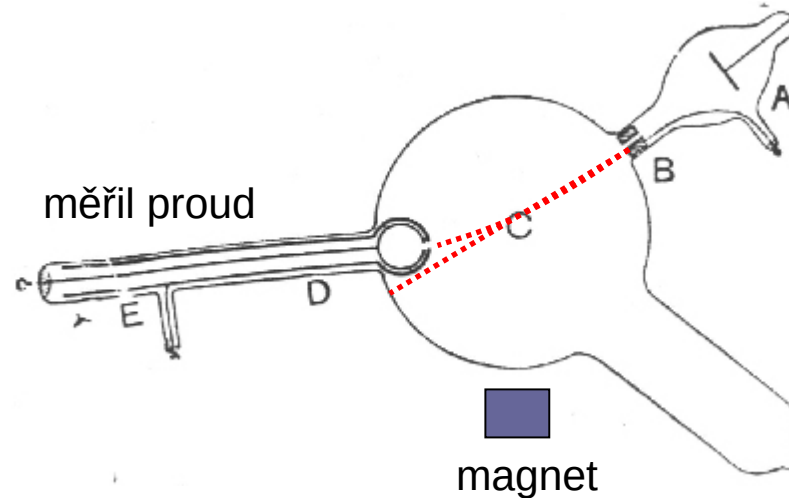
... mnohé experimenty



... 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 zahřívala)
  - šíří se vakuem, čím vyšší, tím lepší
  - jsou ovlivněny elektromagnetickým polem
  - přenos hmoty malinký - malé částice?



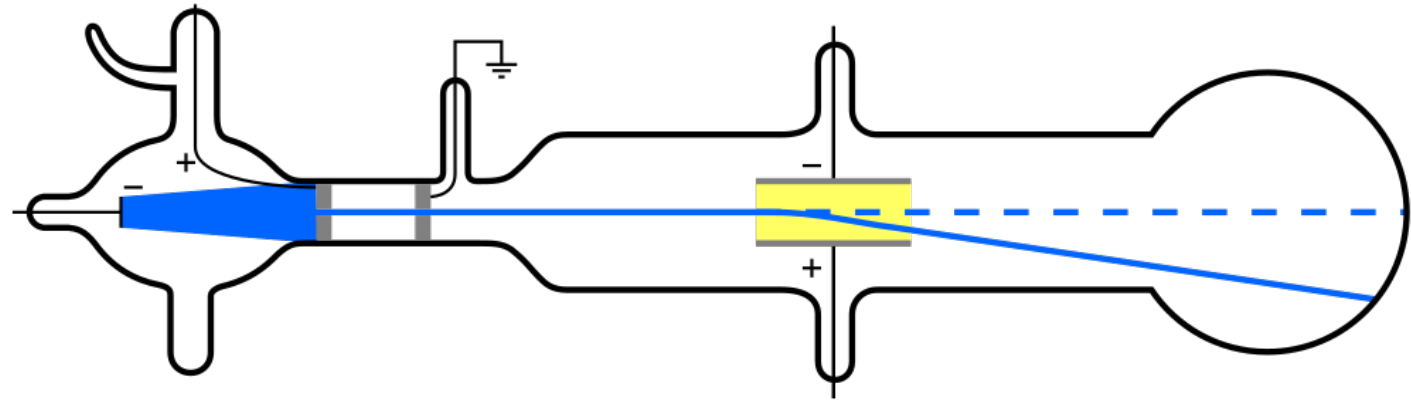
Philipp Eduard Anton  
von Lenard  
(1862-1947)  
(N.c. 1905)

# Atomová fyzika a elektronová struktura látek



Joseph John Thomson  
(1856-1940)

~ 1897 el. pole



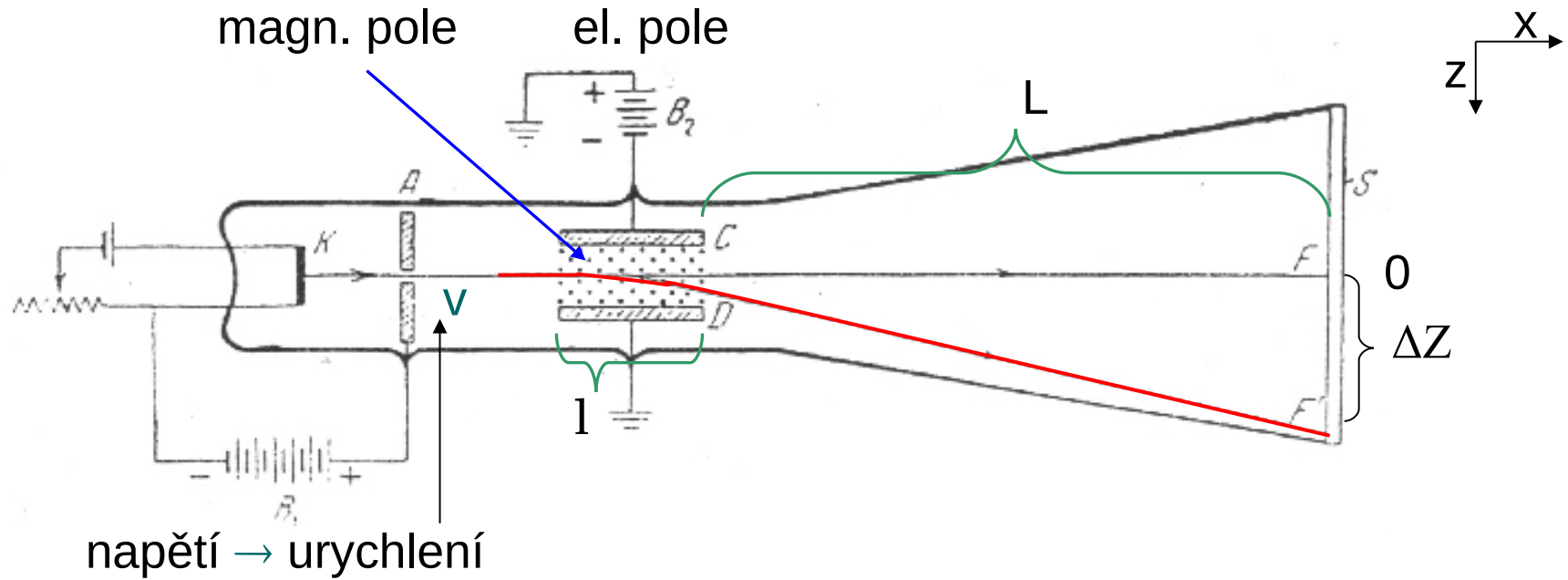
vliv elektromagnetického pole:  $\vec{F} = q (\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B})$

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

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

# Atomová fyzika a elektronová struktura látek

## Elektron jako částice - Thomsonův pokus



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

# 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    | $\omega$  | $\vec{k}$ | $\omega(\vec{k})$ | $u_f = \frac{\omega}{k}$ | $u_g = \frac{d\omega}{dk}$ | $v = \frac{c^2}{u_f}$ |
| 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)

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

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

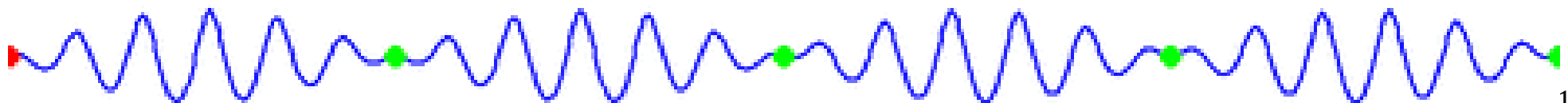
$$u_g = \frac{p}{\sqrt{m_0^2 + \frac{p^2}{c^2}}} = \frac{p}{m} = v$$

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  $\omega(\vec{k})$

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

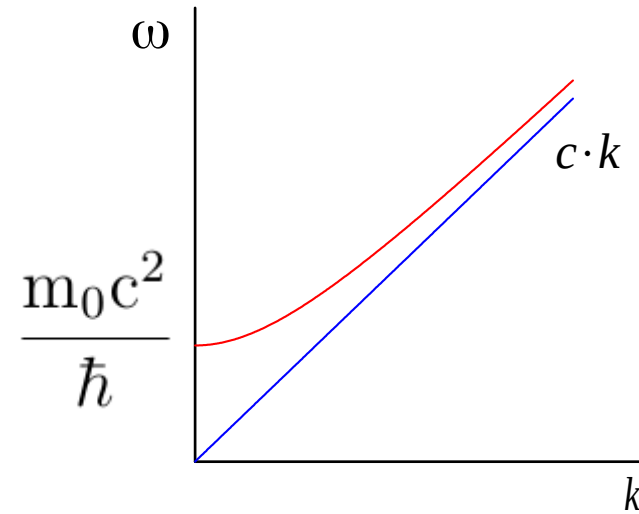
$$\omega(\vec{k}) = \frac{E(\vec{p})}{\hbar} = c \sqrt{\left(\frac{m_0 c}{\hbar}\right)^2 + k^2}$$

celková

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

klidová

kinetická



( $E_k$  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

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

$$E_k \gg m_0c^2$$

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

$$E_k \ll m_0c^2$$

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

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

$$v \approx c$$

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

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

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

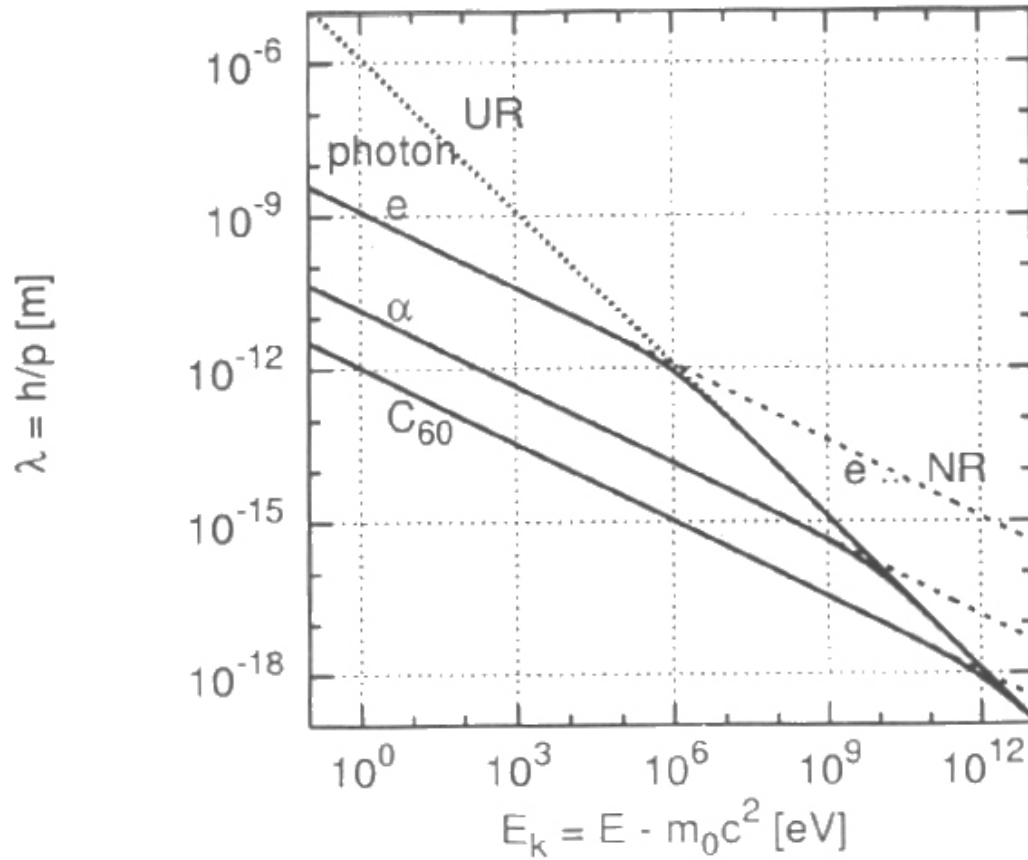
$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m_0E_k}}$$

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

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

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

# Atomová fyzika a elektronová struktura látek



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

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

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

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

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

# 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)

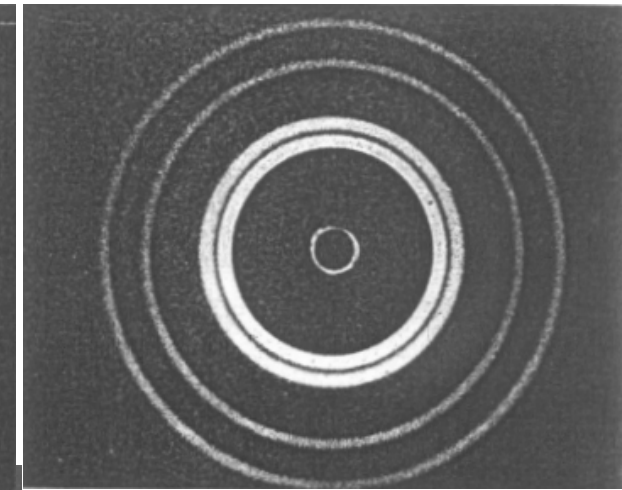
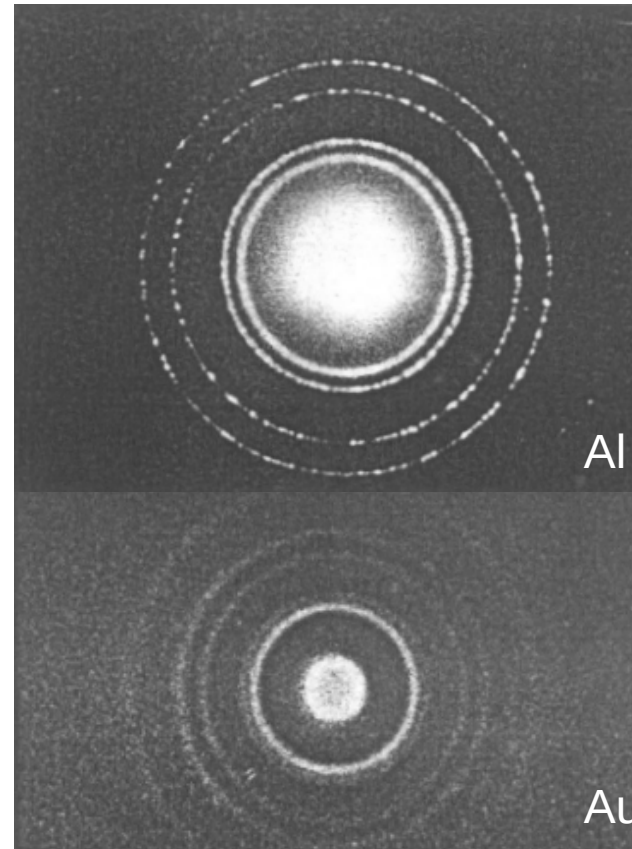
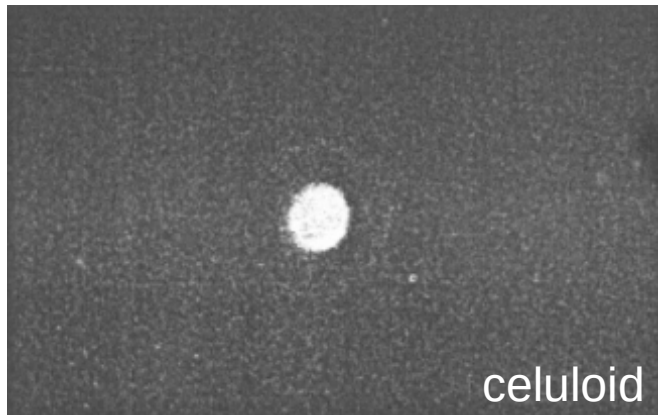
(~1925: HEED na průchod)

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

Nobelova cena 1937

# Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Elektron jako vlna



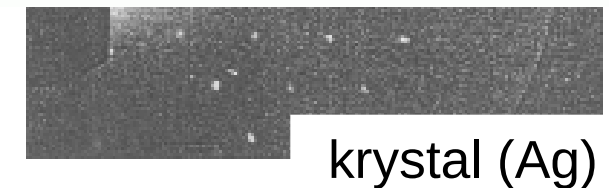
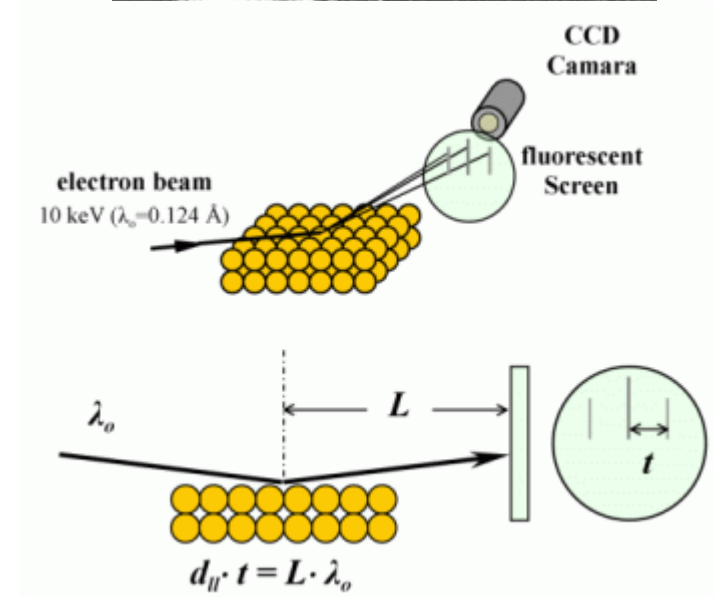
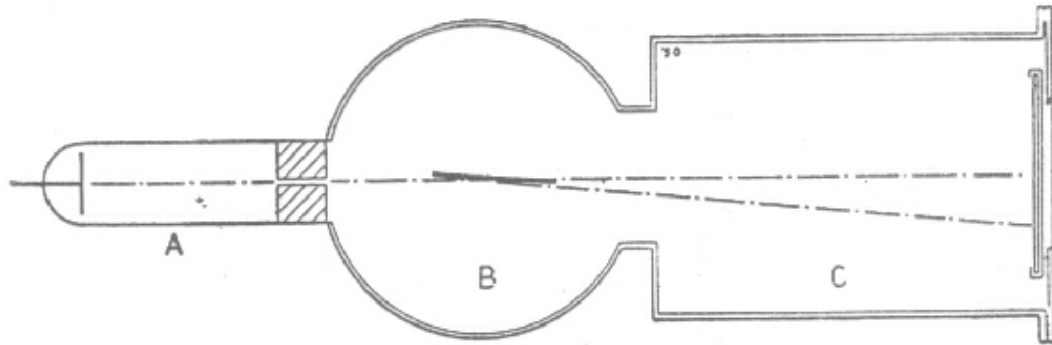
Al rtg

| 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

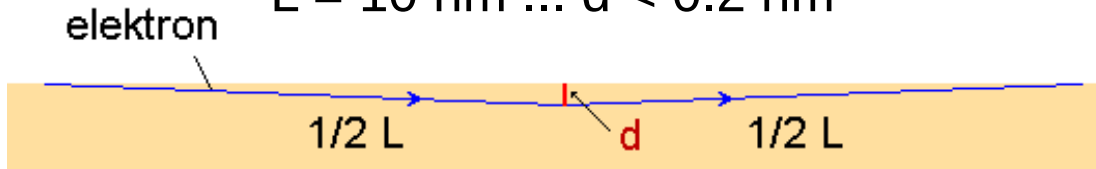
### RHEED – Reflected HEED



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

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

vakuum



možno sledovat růst struktur vrstvu po vrstvě!



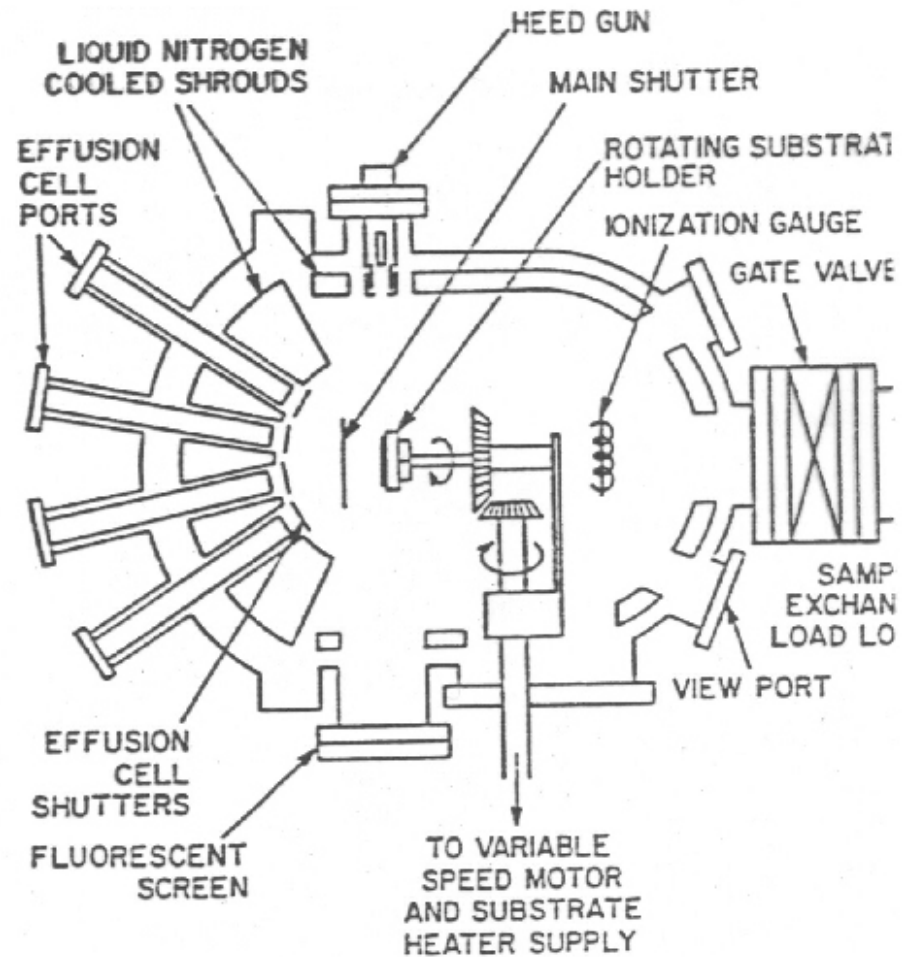
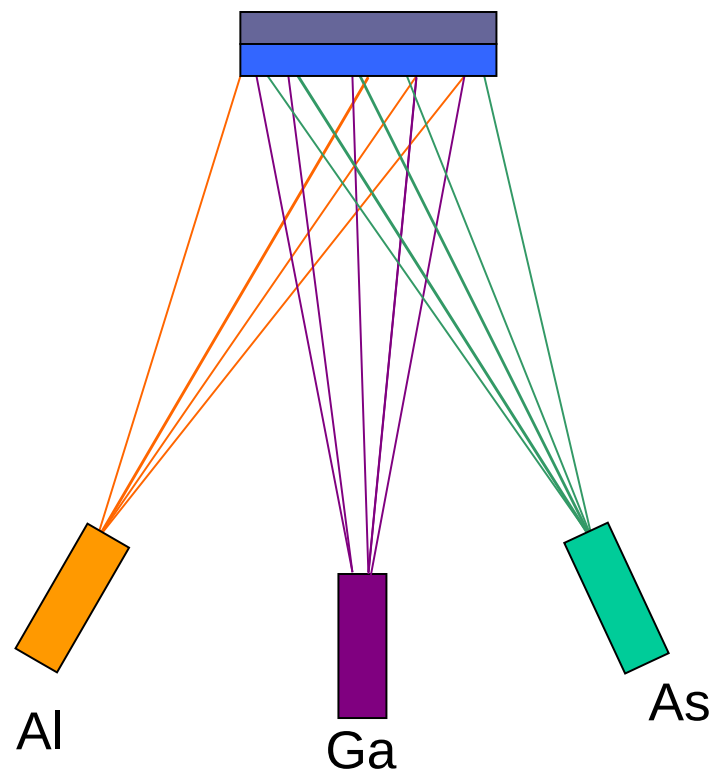
**MBE**

# Atomová fyzika a elektronová struktura látek

## Elektron jako vlna

RHEED – Reflected HEED

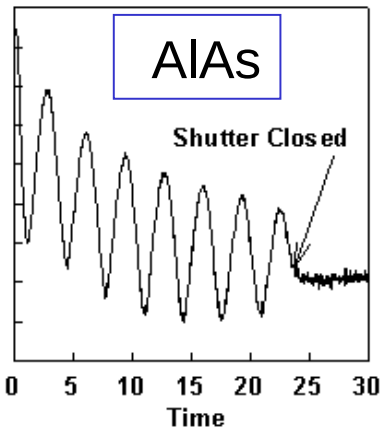
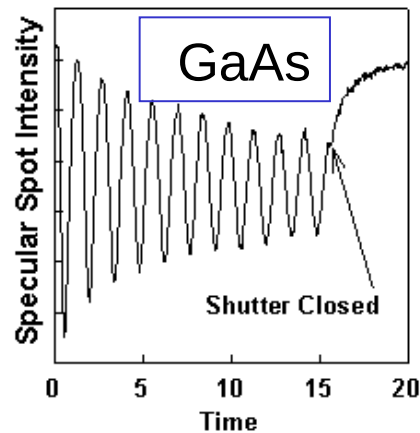
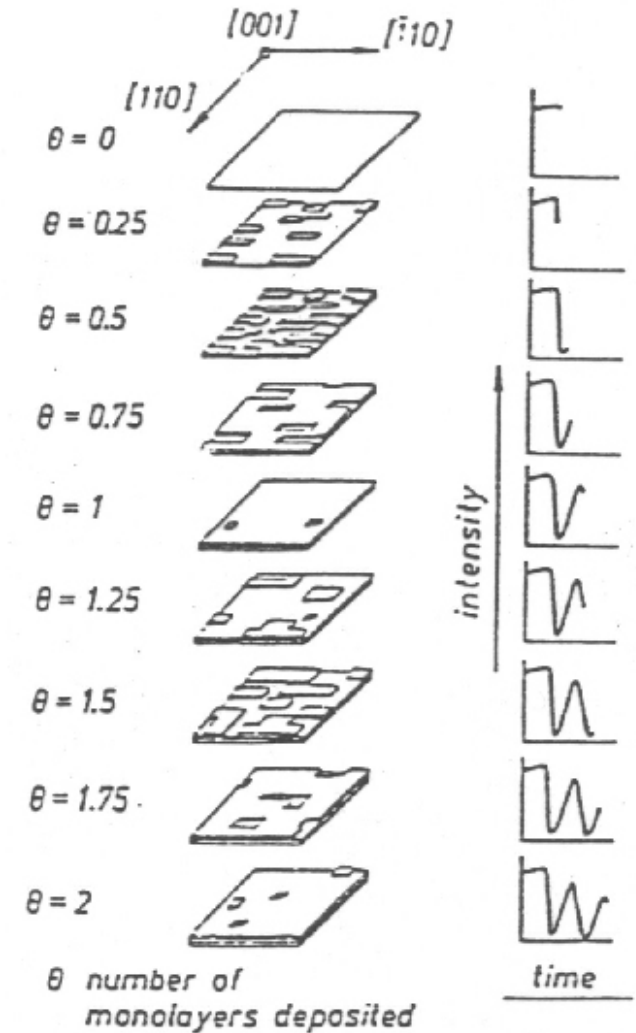
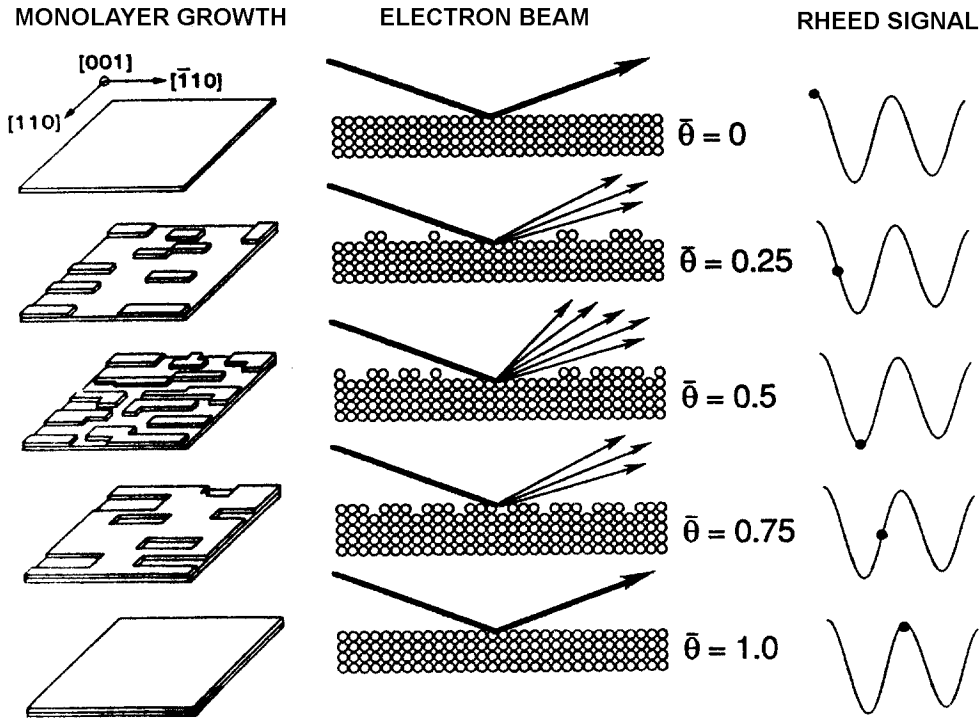
**MBE** Molecular Beam Epitaxy



# 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.

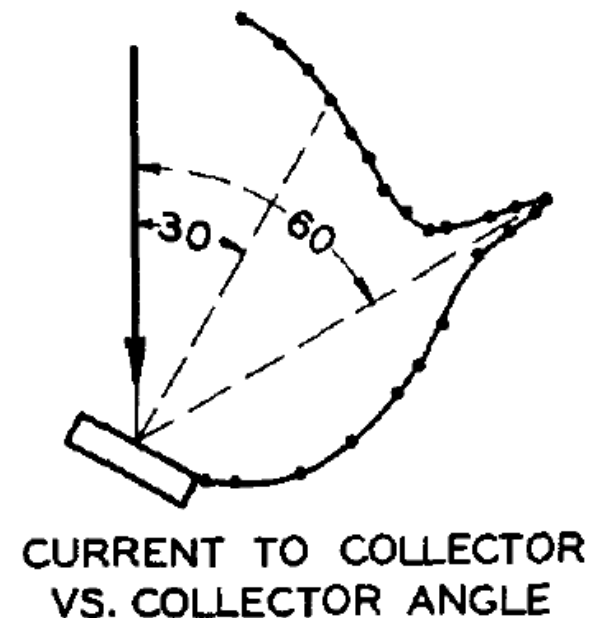
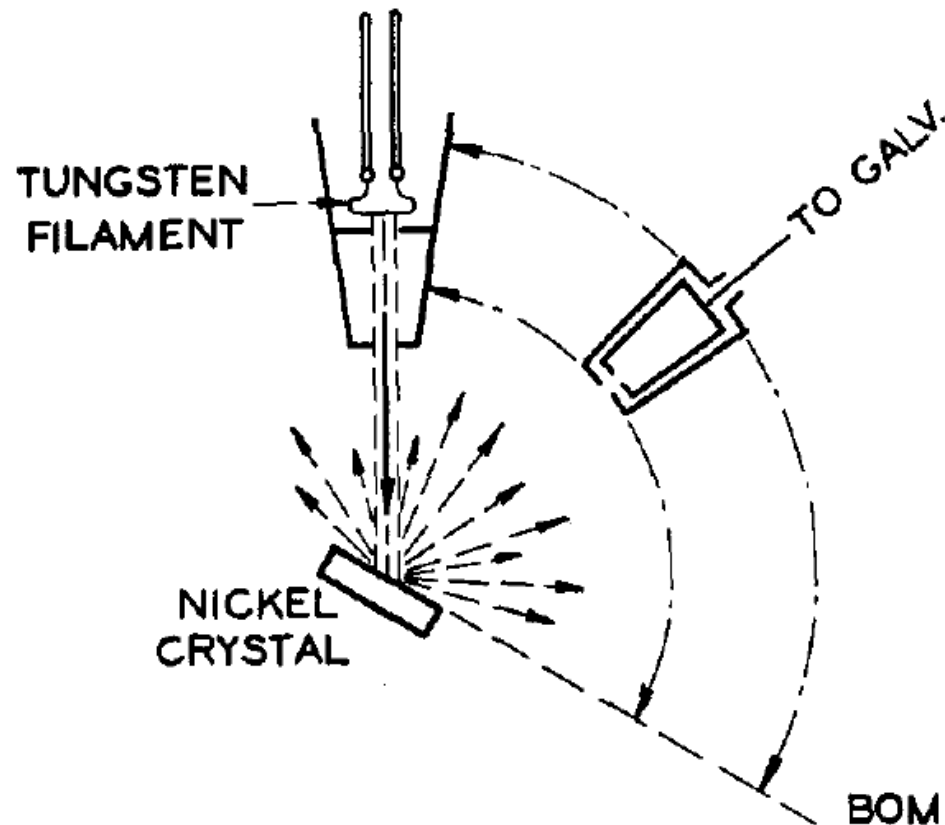


# Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Elektron jako vlna

LEED – Low Energy Electron Diffraction

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



BOMBARDING POTENTIAL, 83 VOLTS  
ANGLE OF INCIDENCE, 30 DEGREES

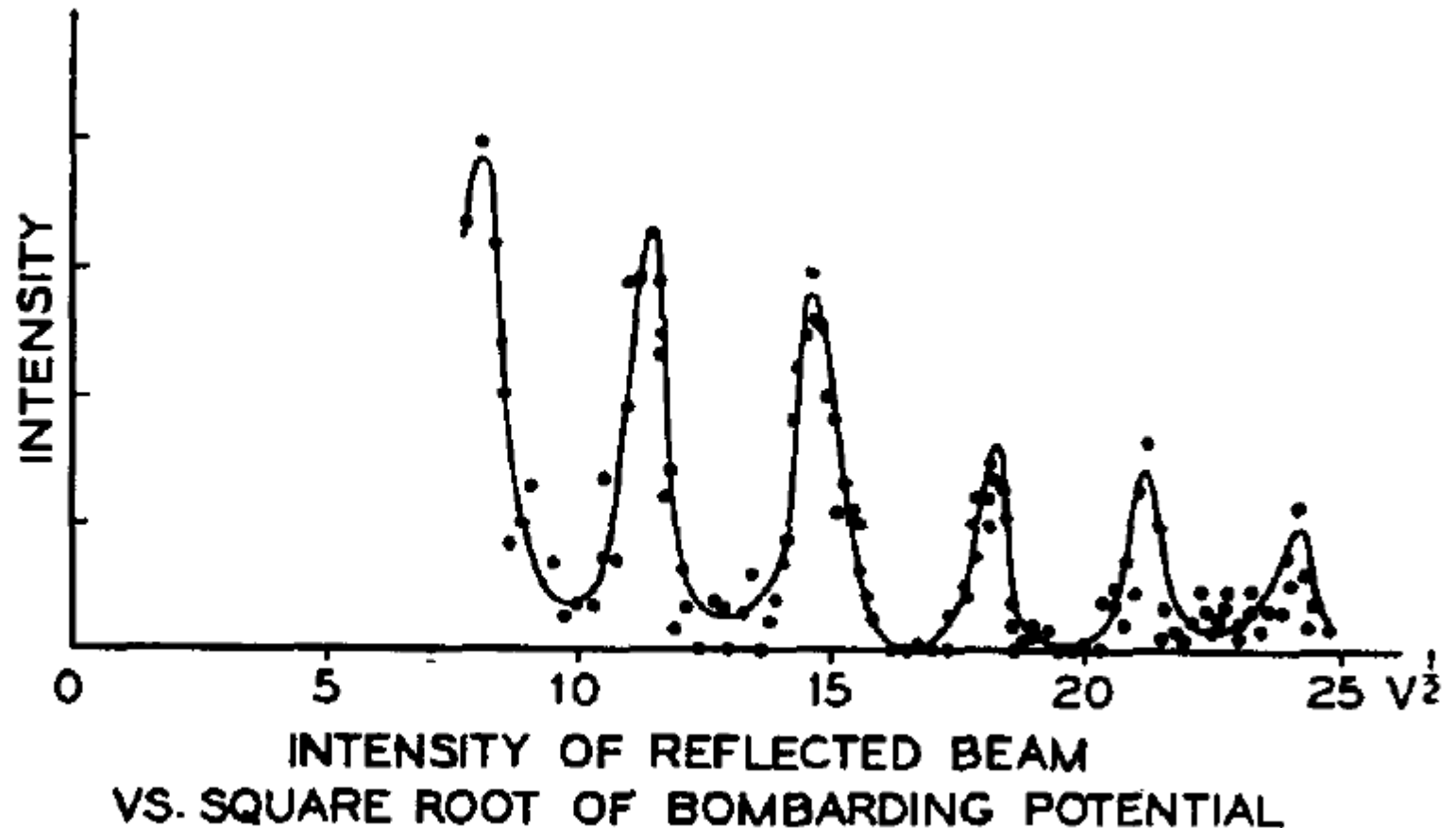
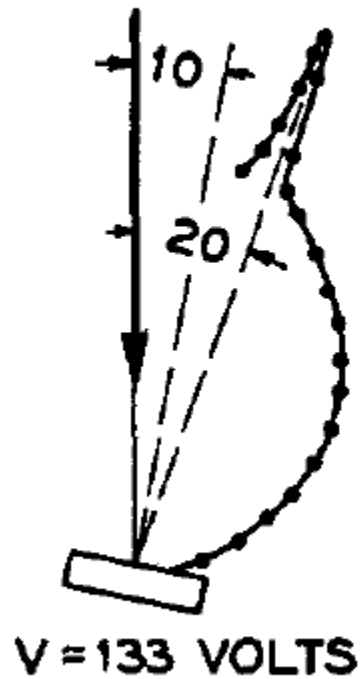
$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2m_e|e|U}} = \frac{1.2264}{\sqrt{U}} \text{ nm}$$

# Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Elektron jako vlna

LEED – Low Energy Electron Diffraction

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



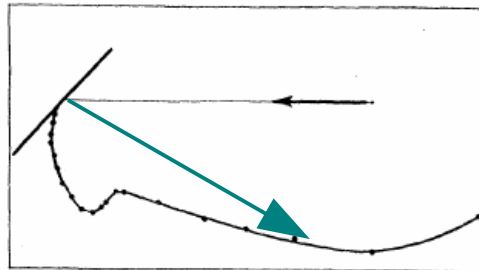
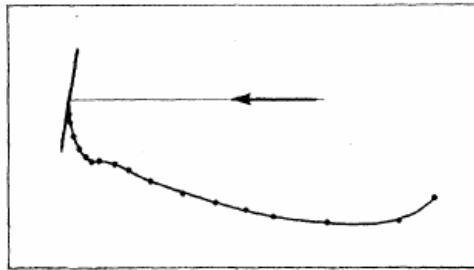
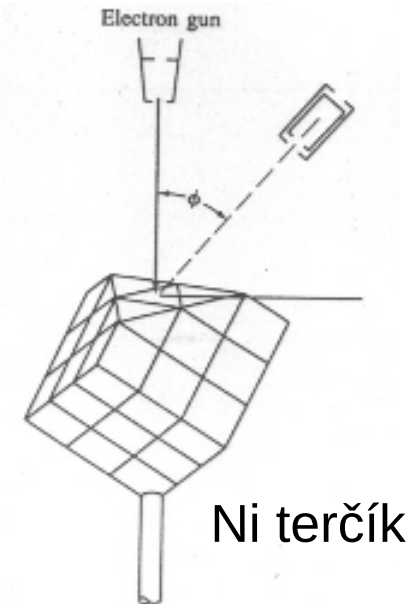
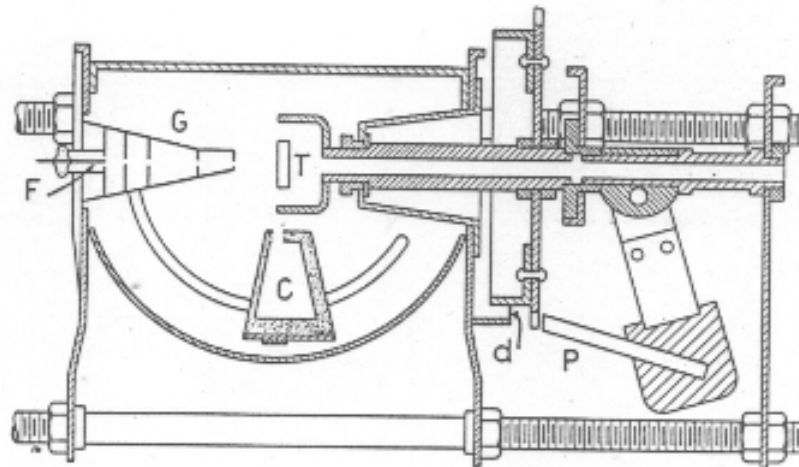
$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2m_e|e|U}} = \frac{1.2264}{\sqrt{U}} \text{ nm}$$

# Atomová fyzika a elektronová struktura látek

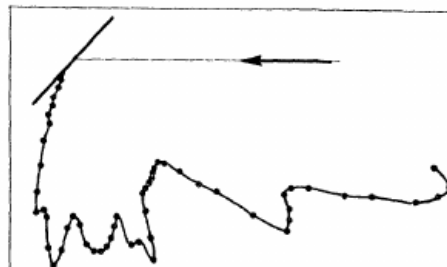
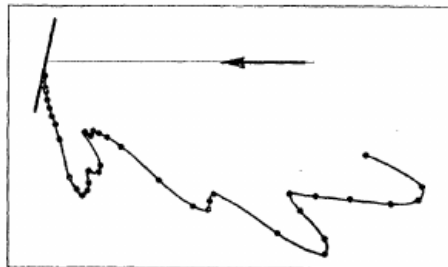
Elektron jako vlna

LEED – Low Energy Electron Diffraction

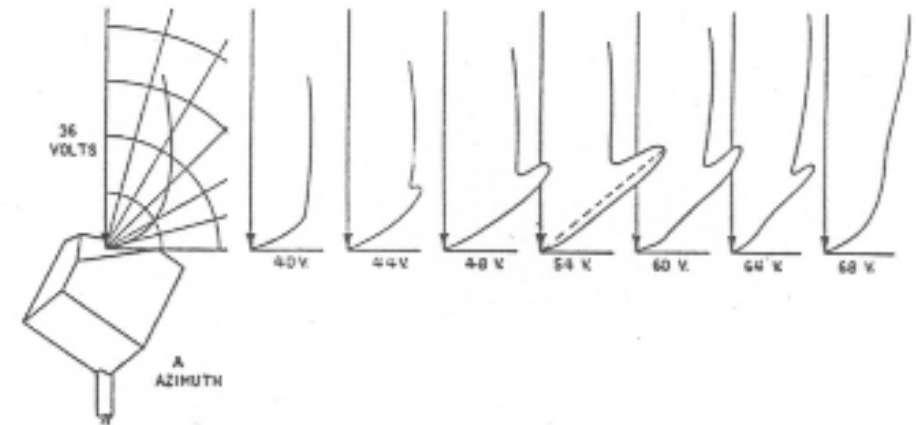
1927 ... Davisson, Germer (Bell lab.)



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.

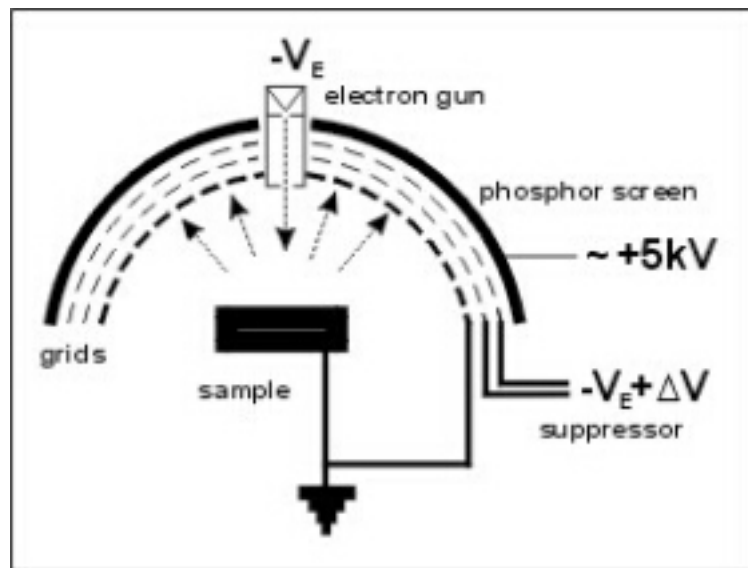
# Atomová fyzika a elektronová struktura látek

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

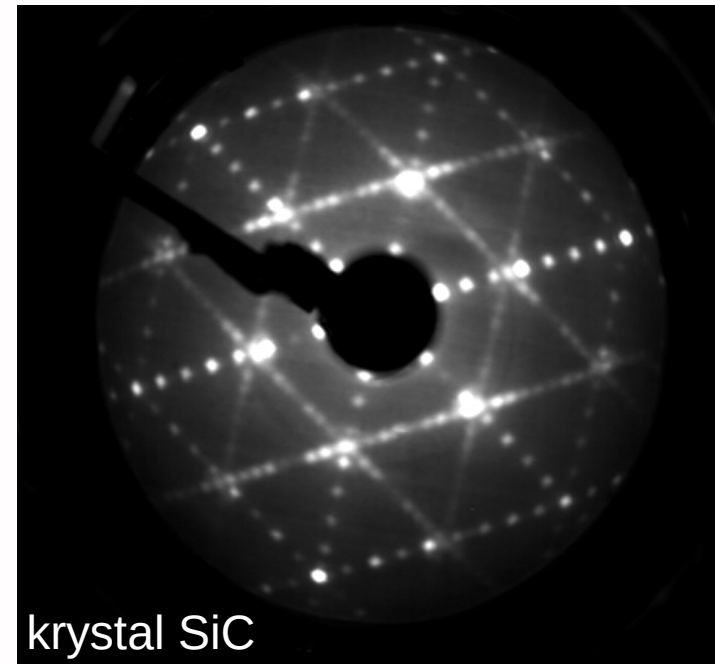


# Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Elektron jako vlna

LEED – Low Energy Electron Diffraction

LEED – povrch – 2D difrakční podmínky



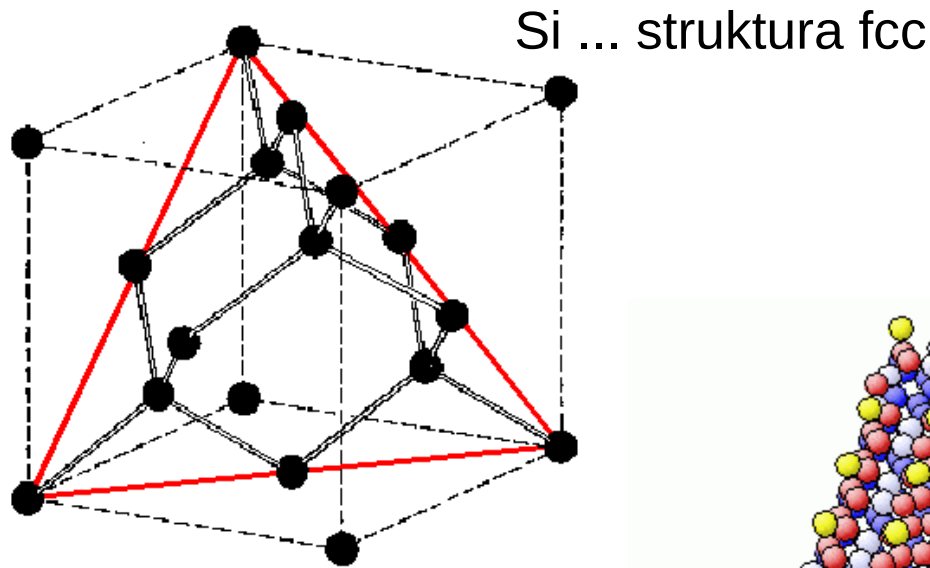
Direct lattice

Reciprocal lattice

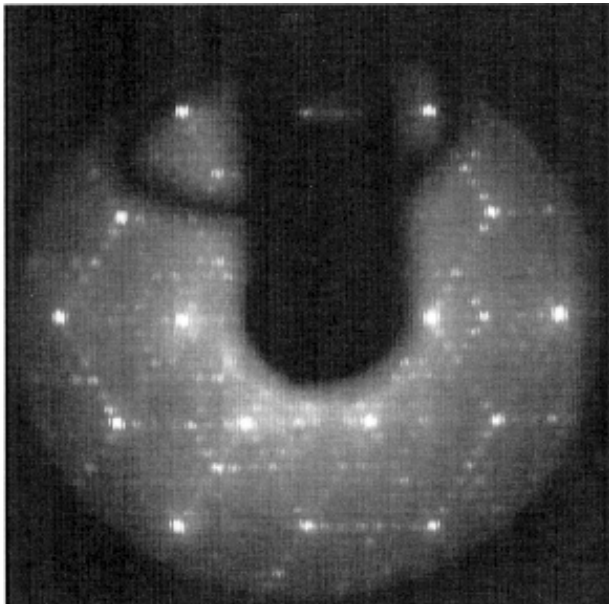
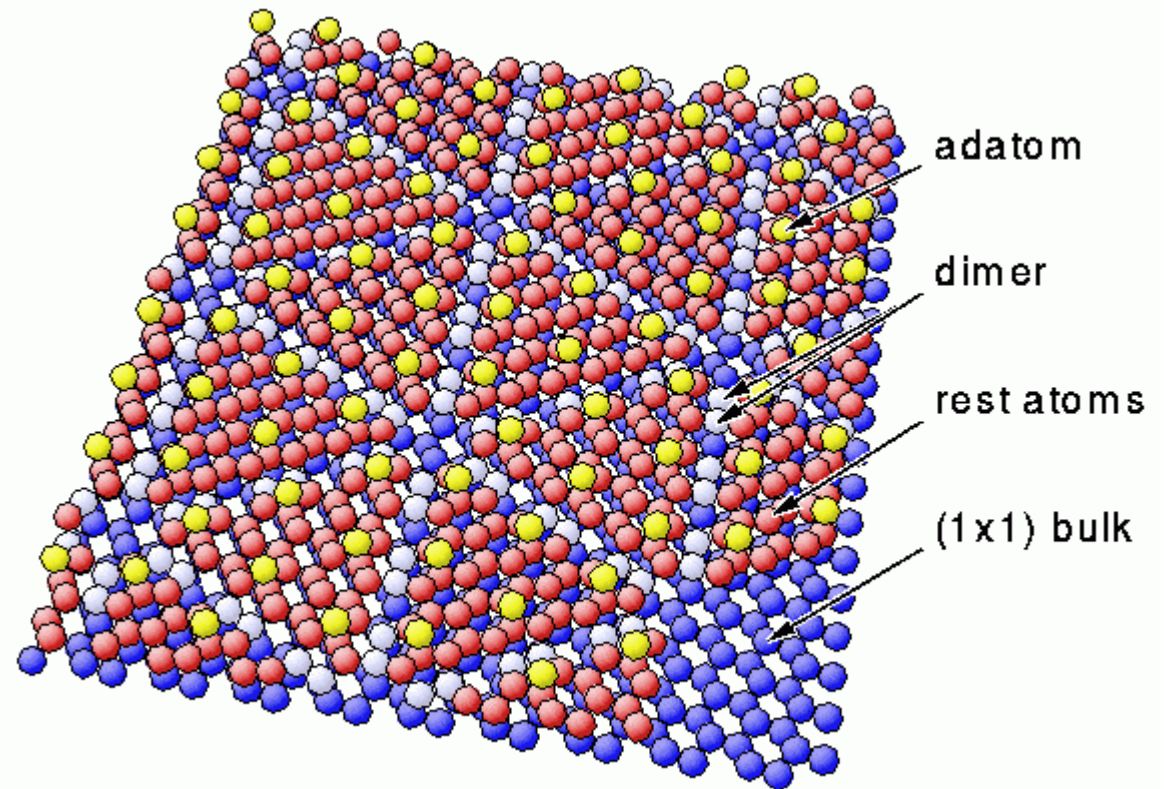
# Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Elektron jako vlna

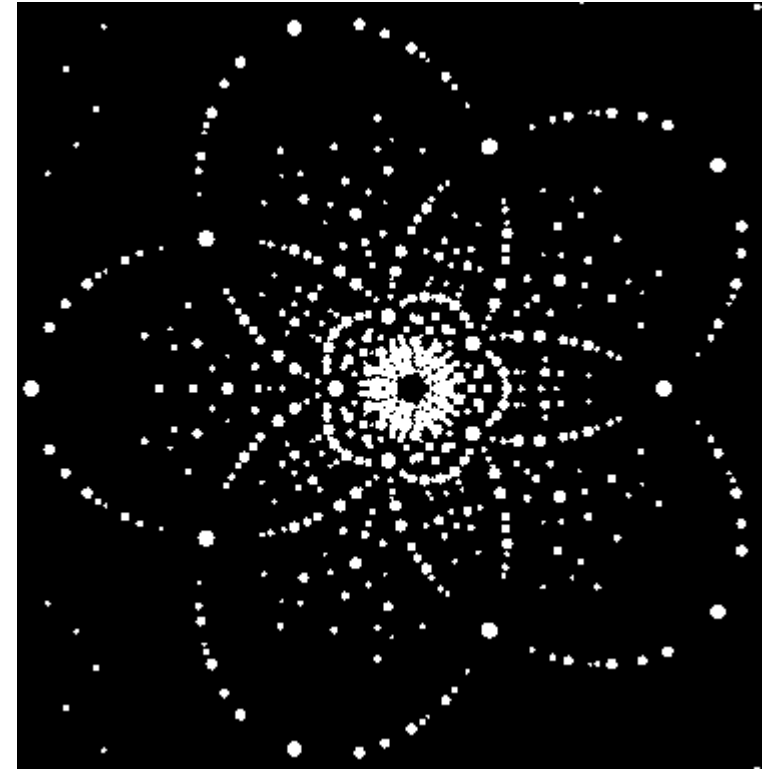
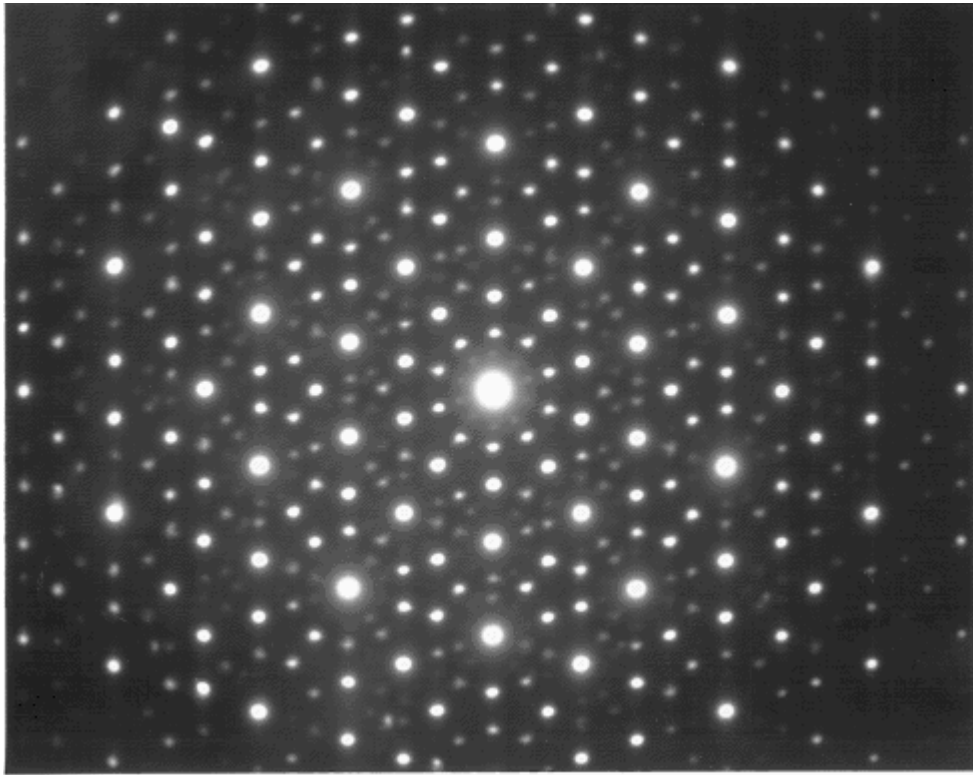
LEED – Low Energy Electron Diffraction



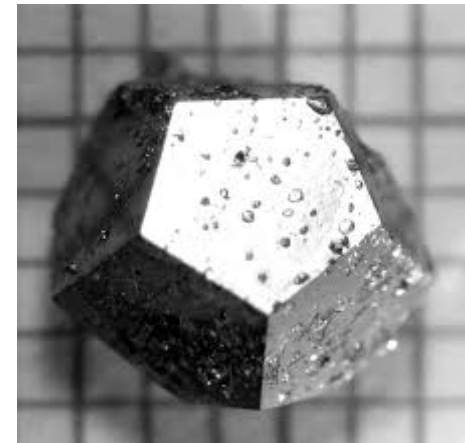
pohled na rovinu (111)



# Atomová fyzika a elektronová struktura látek

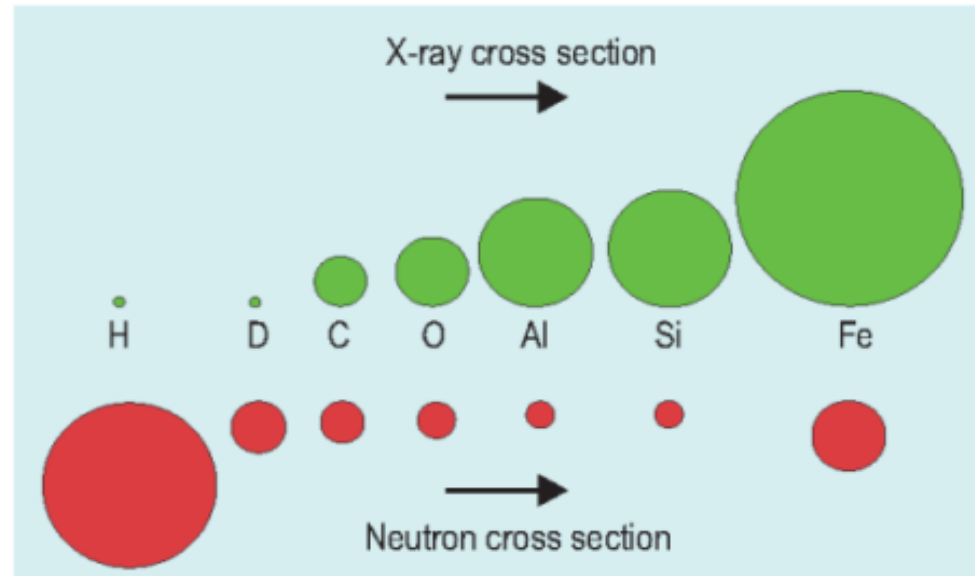


kvazikrystaly

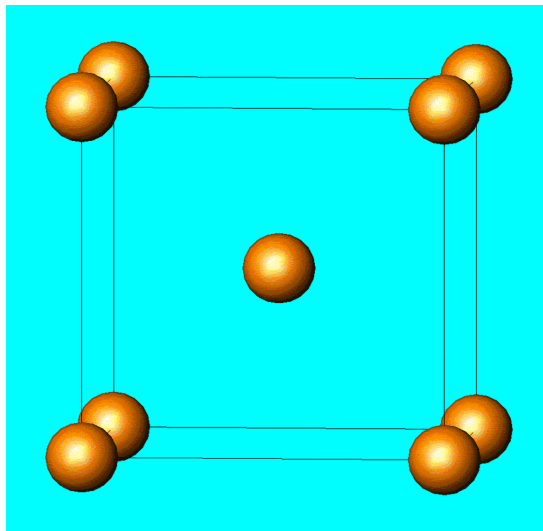


# Atomová fyzika a elektronová struktura látek

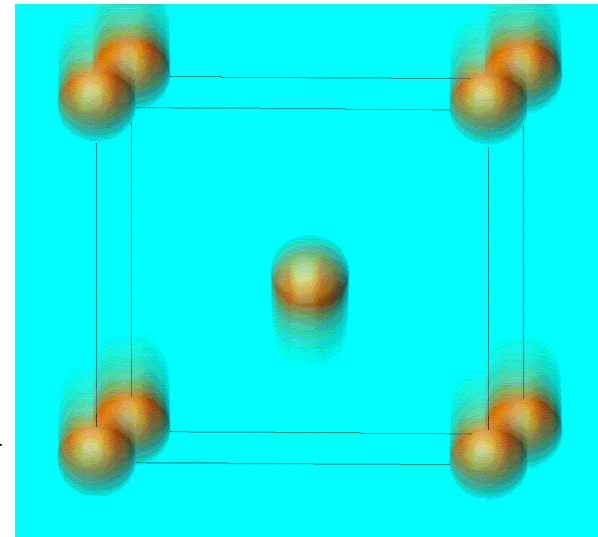
## Rozptyl neutronů



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

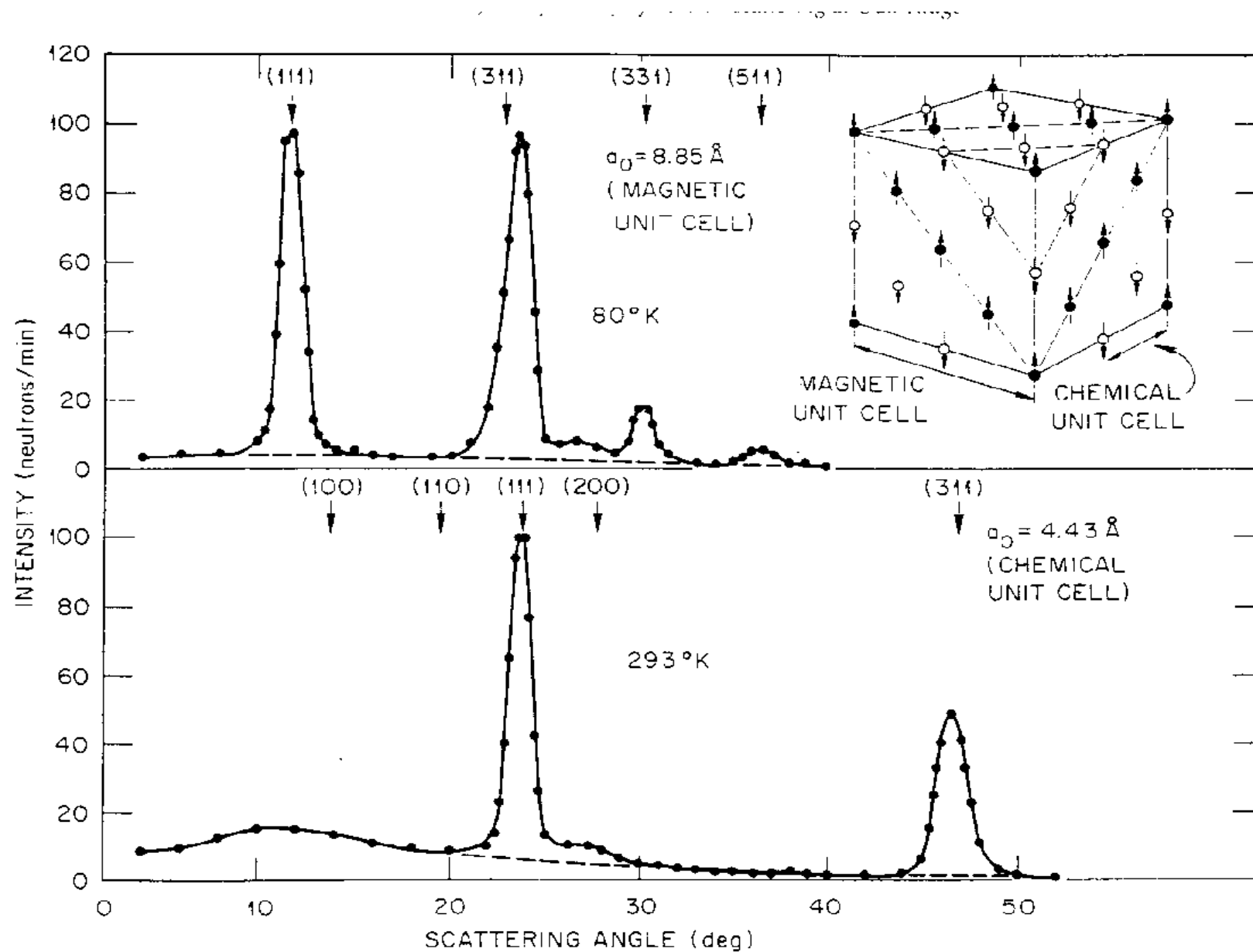


$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv}$$





# Atomová fyzika a elektronová struktura látek



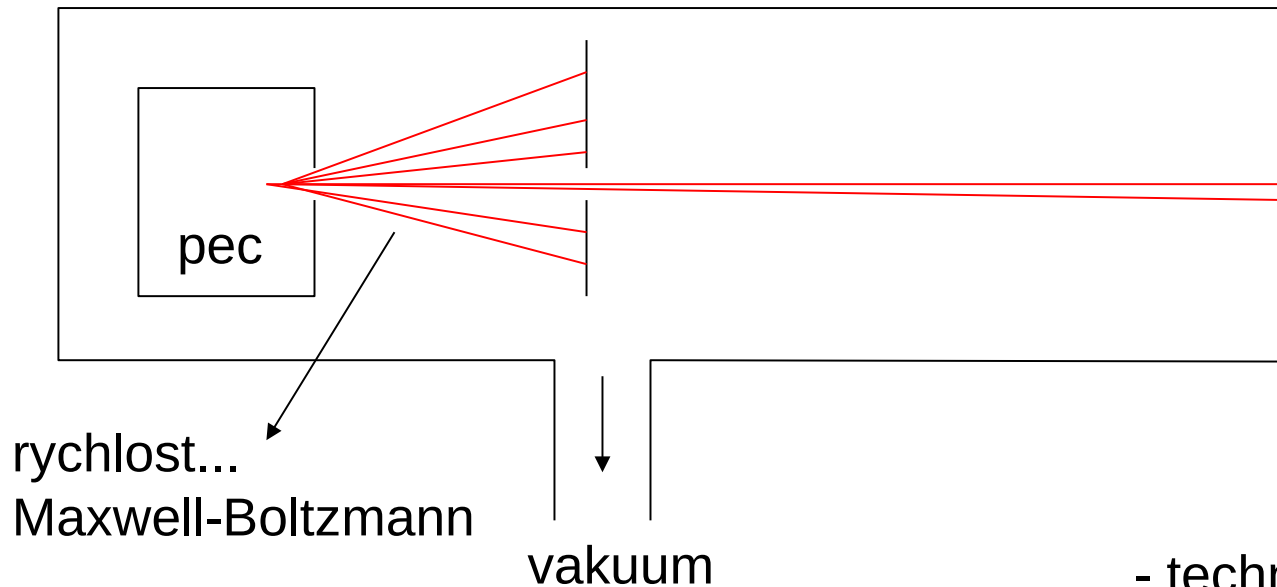
# Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Vlnový charakter těžkých částic (molekuly, ...)

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



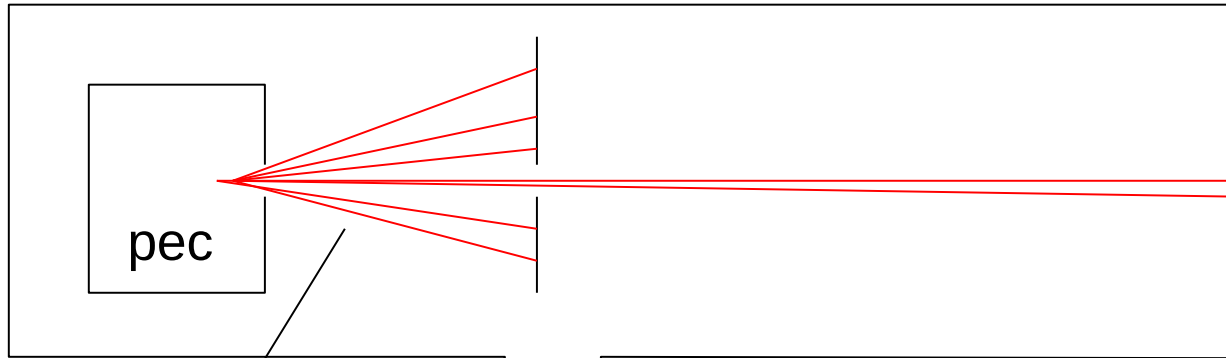
Otto Stern  
(1888-1969)  
N.c. 1943



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

# Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Vlnový charakter těžkých částic (molekuly, ...)



rychlost...  
Maxwell-Boltzmann

vakuum



Otto Stern  
(1888-1969)

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

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

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

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

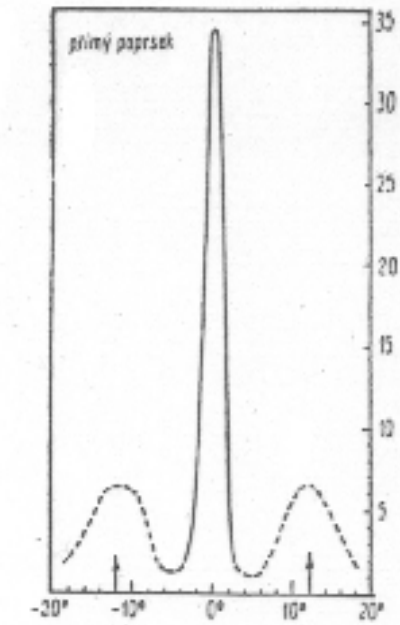
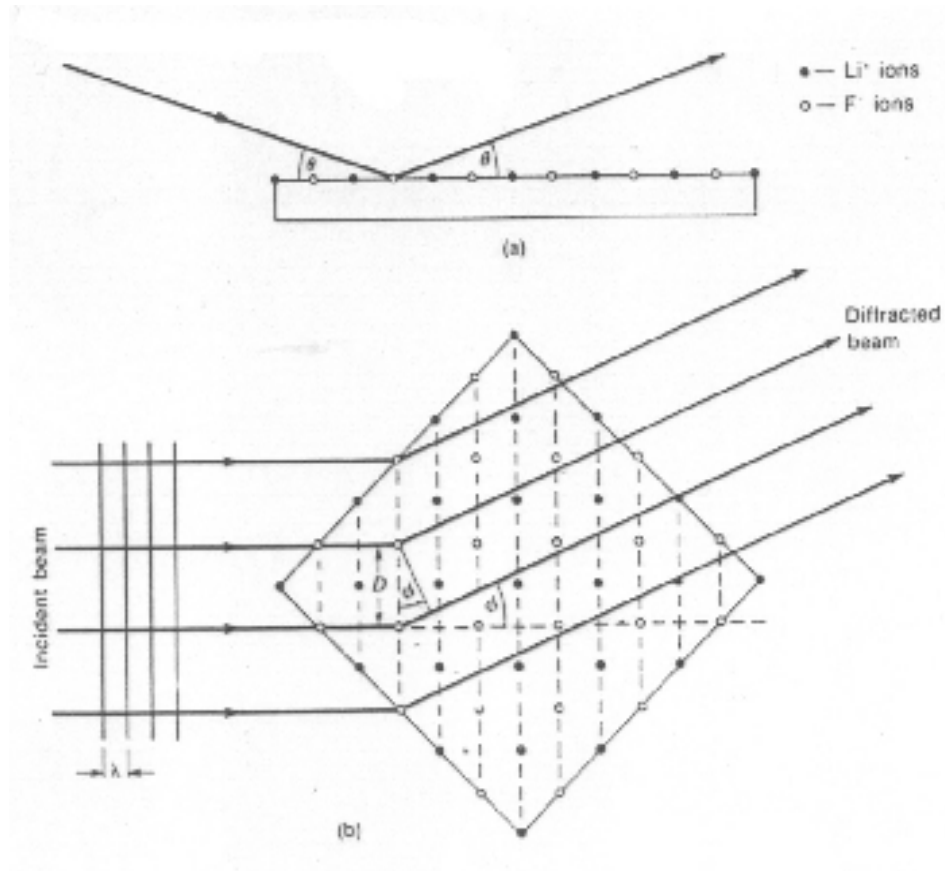
$$\sqrt{\langle v^2 \rangle} = 158 \sqrt{\frac{T}{A}}$$

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

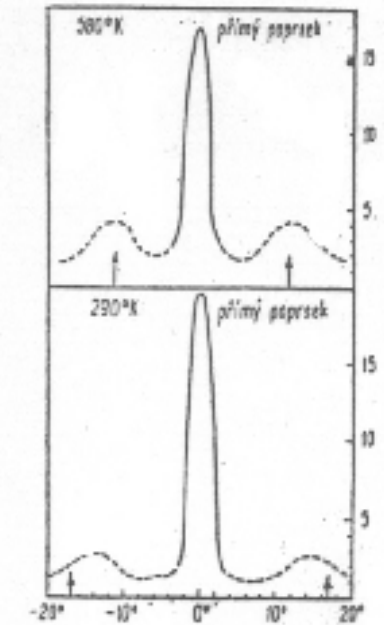
$\alpha$  - částice:  $A=4$ ,  $T=900$  K  $\rightarrow \lambda = 4.2 \times 10^{-11}$  m

# Atomová fyzika a elektronová struktura látek

## Vlnový charakter těžkých částic (molekuly, ...)



Obř. 195. Difrakce atomů helia na krystalu fluoridu lithia.



Obř. 196. Difrakce molekul vodíku na krystalu fluoridu lithia.

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