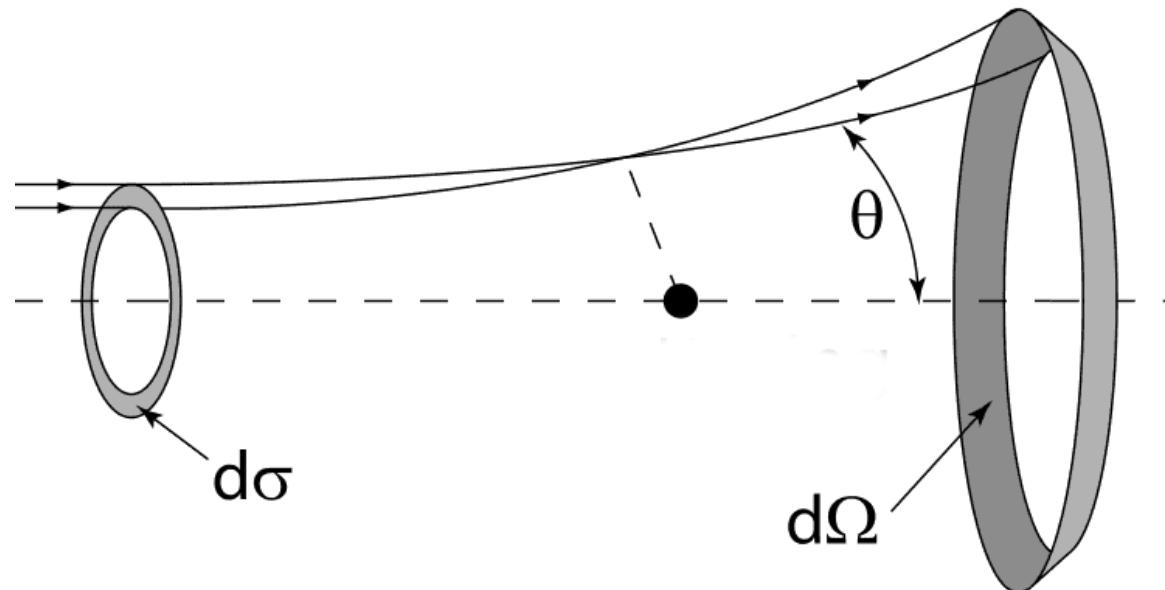


Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Co byste měli po dnešní přednášce umět:

- ukázat rozdíl mezi strukturním a rozptylovým faktorem
- aplikovat tzv. Debyeovu funkci na výpočet rozptylu záření na molekule, nanočástici,...
- vlastními slovy vysvětlit Comptonův rozptyl a jeho důležitost v přijetí dualismu fotonu včetně naznačení výpočtu
- představit historické souvislosti Rutherfordova experimentu, objasnit jeho princip a posoudit jeho důsledky pro poznání struktury látek (včetně naznačení odvození)
- vysvětlit principy elektronových mikroskopů SEM a TEM, včetně změn zobrazení v sekundárních a zpětně odražených elektronech, prvkovou selektivitu, principiální omezení elektronové mikroskopie
- prokázat znalost principů mikroskopů STM a AFM včetně měřících módů



Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Vlnový charakter částic – kvantově-mechanický pohled

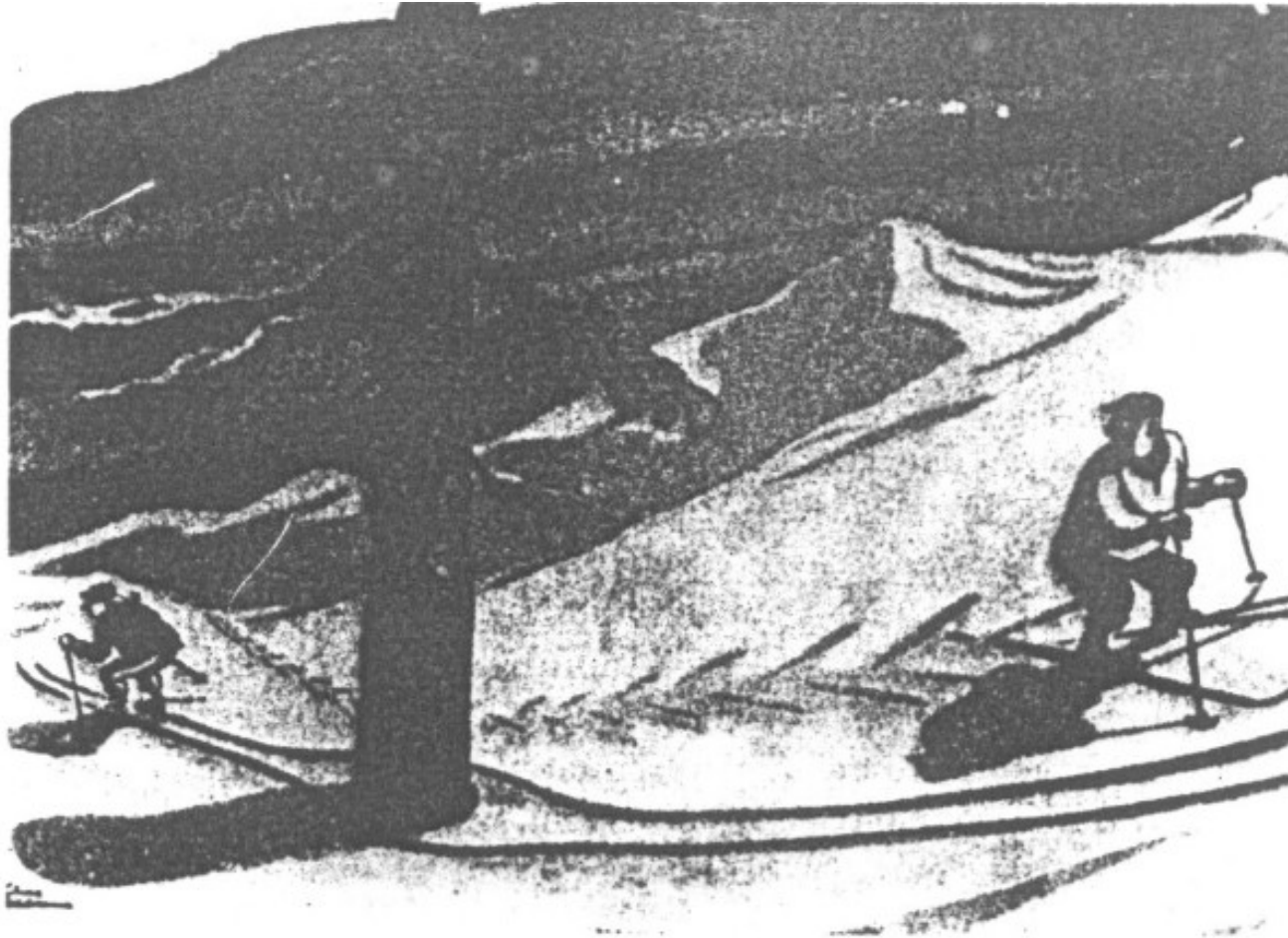
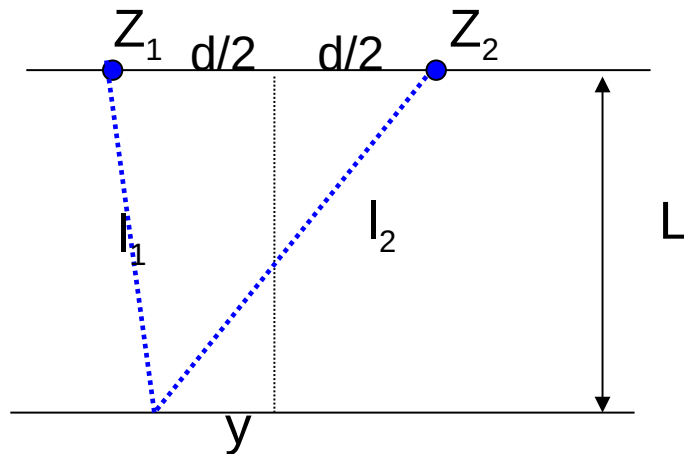
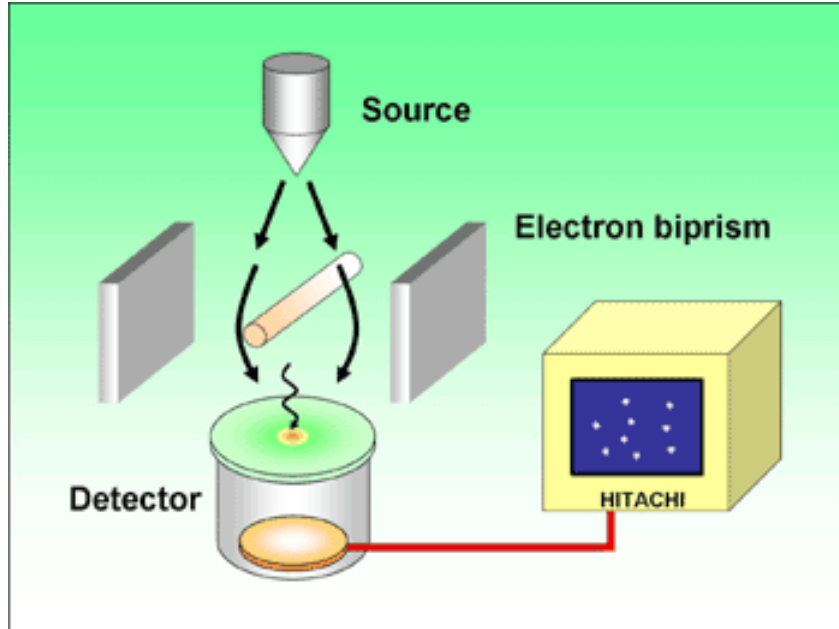


Abbildung 4 Der nicht-klassische Skiläufer.

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

elektronové biprisma



$$l_1^2 = L^2 + \left(\frac{d}{2} - y\right)^2$$

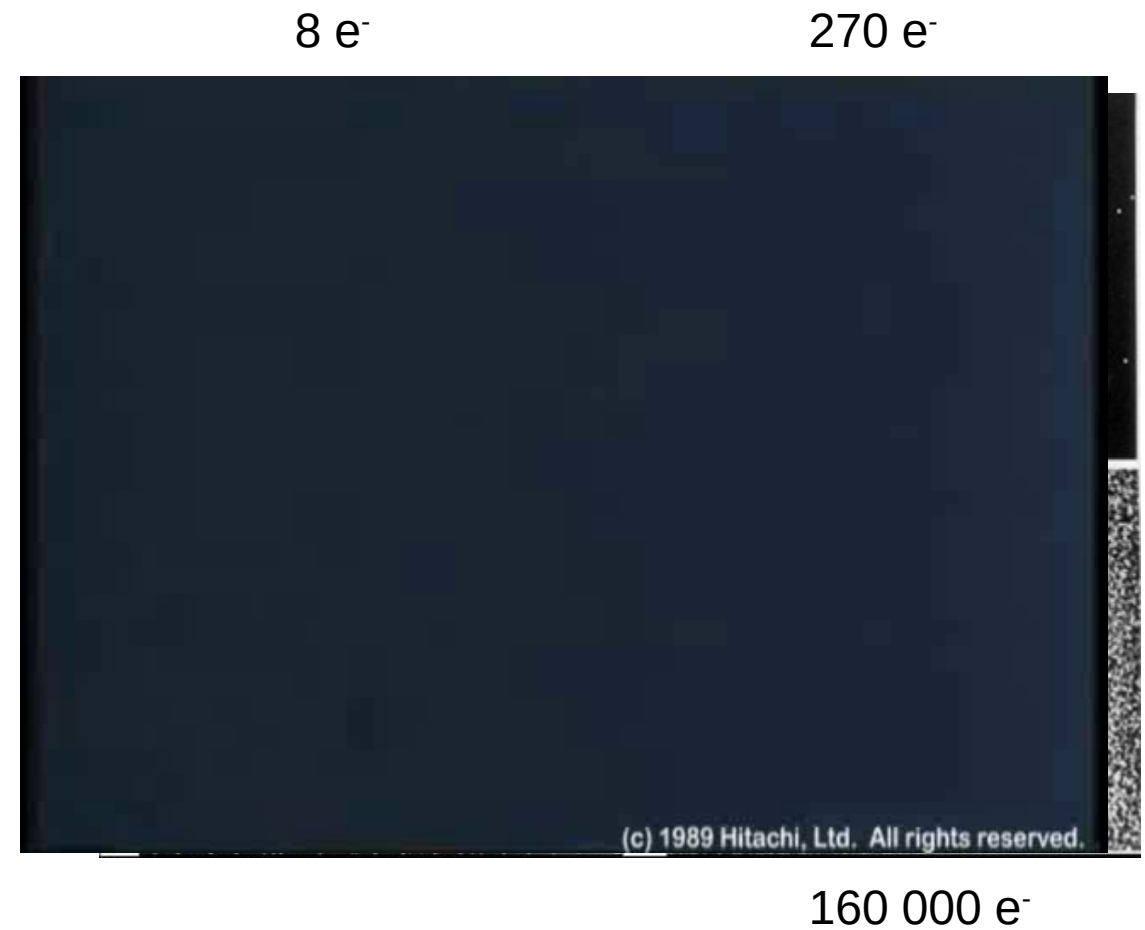
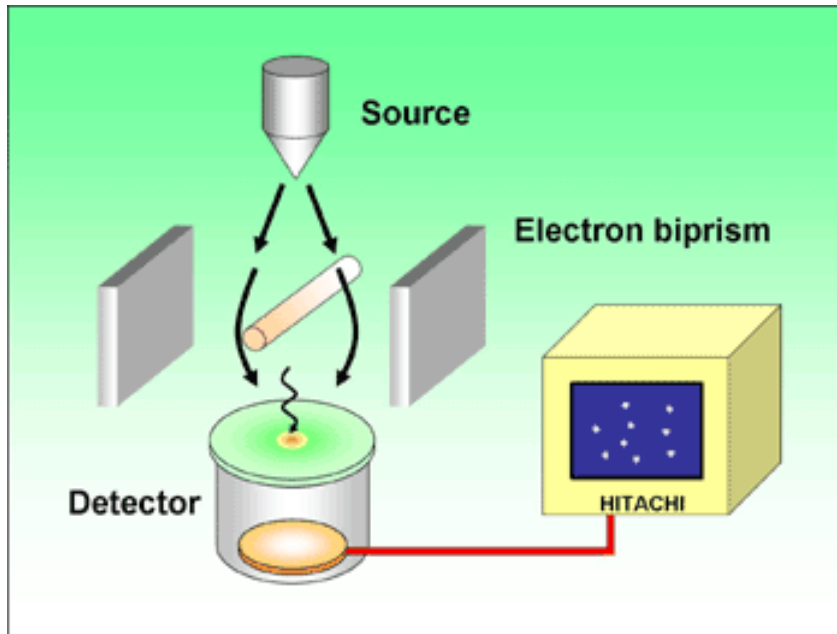
$$l_2^2 = L^2 + \left(\frac{d}{2} + y\right)^2$$

$$(l_2 - l_1) \underbrace{(l_2 + l_1)}_{2L} = 2dy$$

$$(l_2 - l_1) = n\lambda = y \frac{d}{L}$$

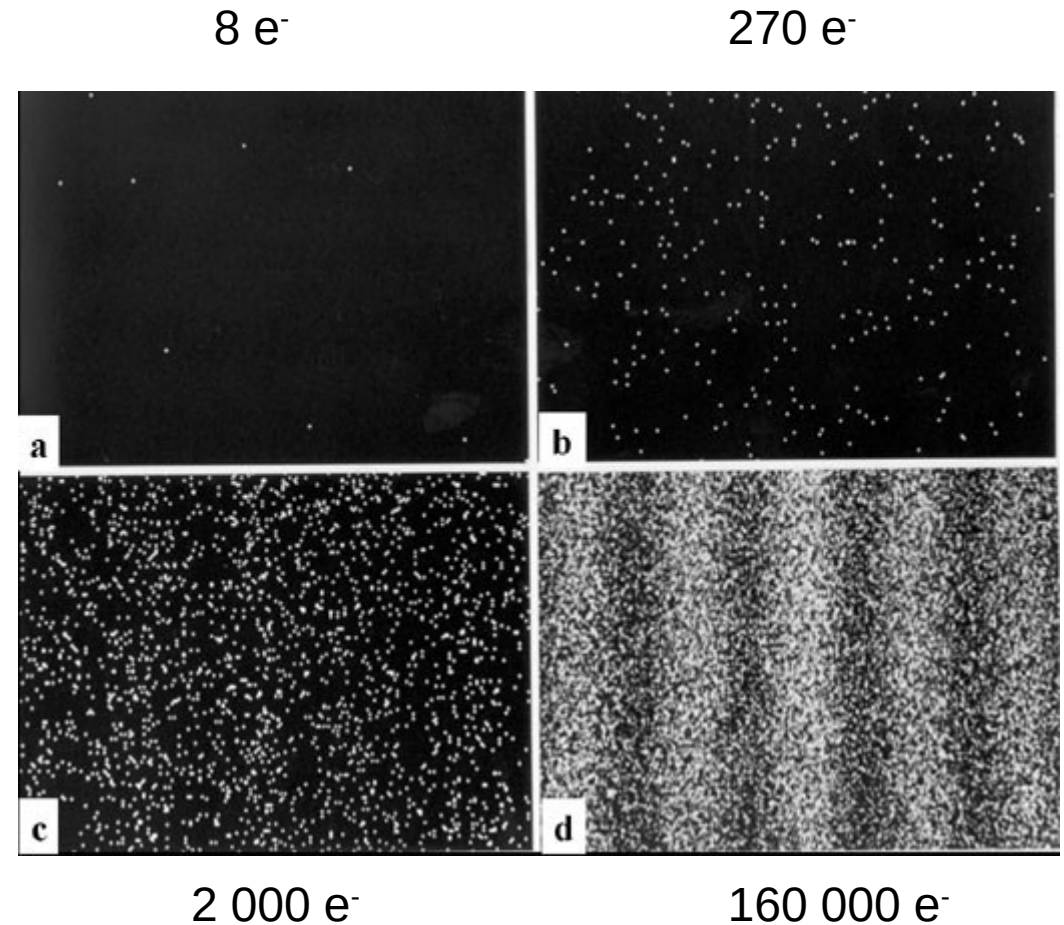
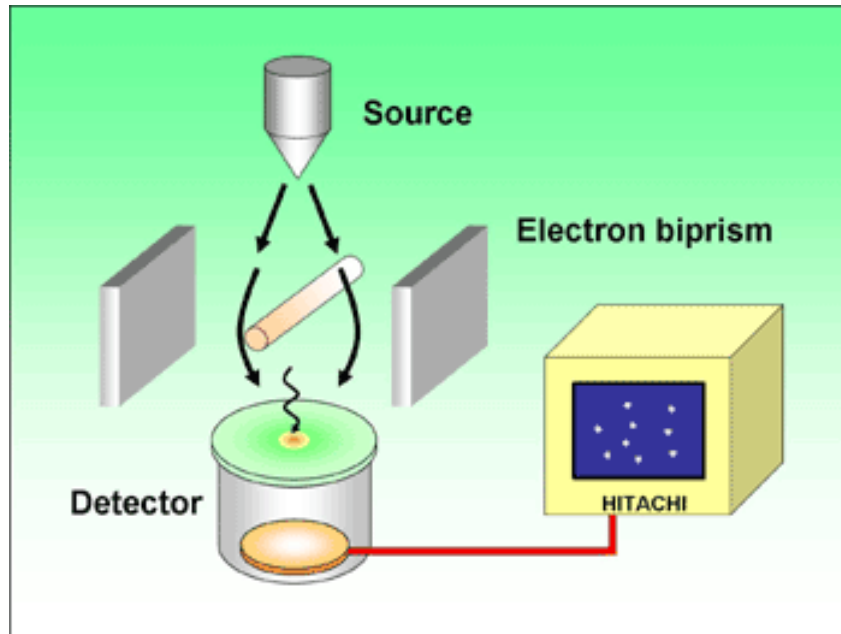
Atomová fyzika a elektronová struktura látek

elektronové biprisma

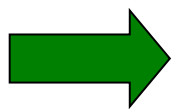


Atomová fyzika a elektronová struktura látek

elektronové biprisma



- elektrony dopadají jako body
- stochastický proces - statistika teček
- **tečky složí interferenční obraz**



- každý elektron vnímá obě cesty
- elektron interferuje sám se sebou

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Vlnový charakter částic – kvantově-mechanický pohled

$$\text{intenzita} \approx |\Psi(\vec{r})|^2$$

Schrödinger ... klasická částice ve vlnové funkci rozmazaná - obláček

M. Born: statistická interpretace

$\Psi(\vec{r})$... hustota pravděpodobnosti

$|\Psi(\vec{r})|^2 dV$ pravděpodobnost na objem dV

$$\int |\Psi(\vec{r})|^2 dV = 1 \quad \text{normalizace, částice existuje}$$



Max Born
(1882-1970)
1954- Nob.cena

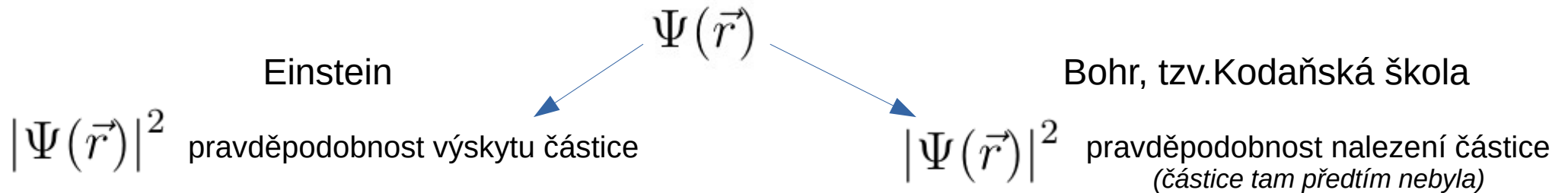


čeho je to pravděpodobnost



Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Vlnový charakter částic – kvantově-mechanický pohled



- částice někde jsou
- jsou tam samy o sobě
- dá se třeba zjistit více než $|\Psi(\vec{r})|^2$

⇒ QM je dobře,
ale něco chybí, je neúplná

- bez detekce částice nejsou nikde s absolutní určitostí
- detekce v kontextu s daným přístrojem
- neurčitost, základní omezení

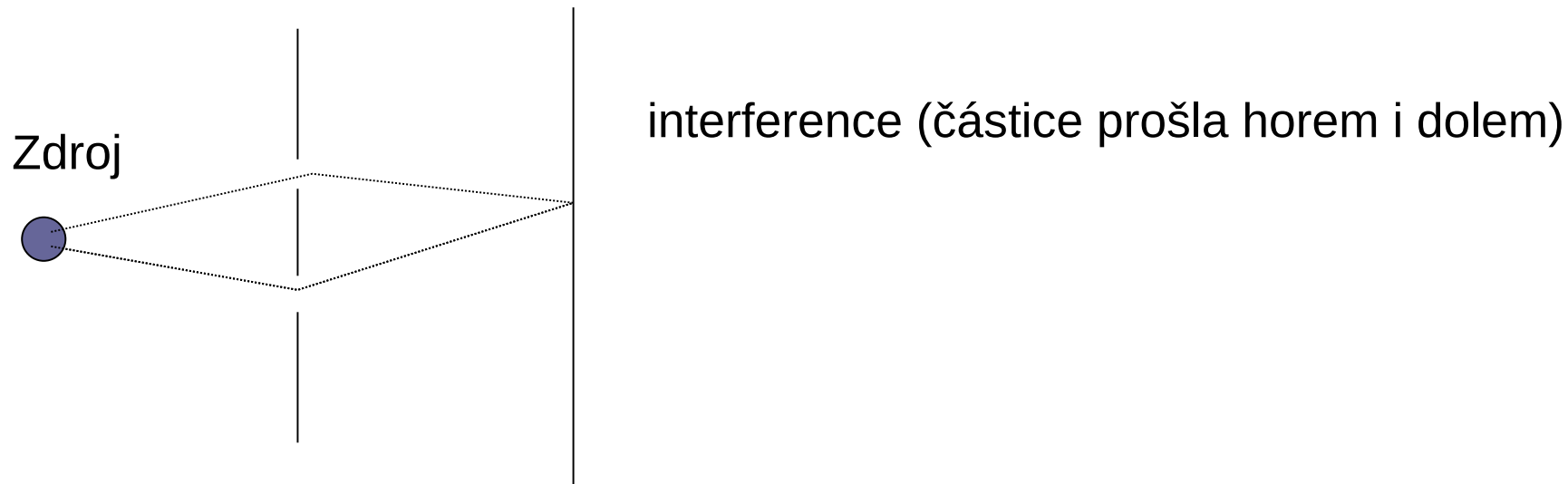
⇒ QM je úplná
(poznání je oslabeno, nám to připadá nepřírozené, divné)

experimentální rozhodnutí ve prospěch kanonické interpretace

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Vlnový charakter částic – kvantově-mechanický pohled

which way ?



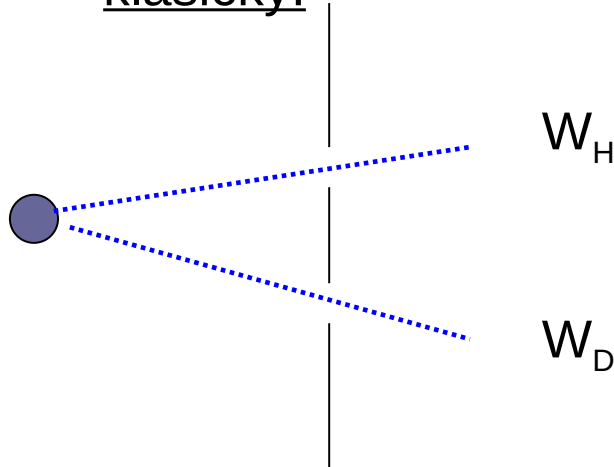
? Ize pozorovat interferenci a zároveň vědět kudy částice prošla?

Einstein vs Bohr

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Vlnový charakter částic – kvantově-mechanický pohled

klasicky:



W_H

$$W = W_H + W_D$$

W_D

kvantově

$$\psi = \psi_H + \psi_D$$

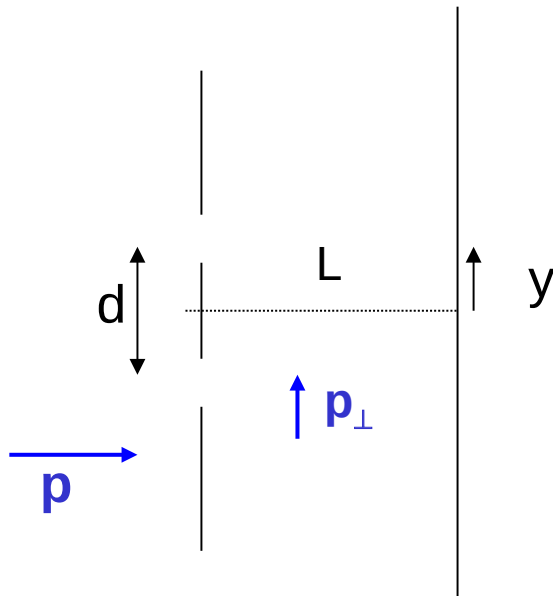
$$W = |\psi_H|^2 + |\psi_D|^2 + 2 \operatorname{Re} \psi_H \psi_D^*$$

nelokální člen

x lokální pohled na částice podle Einsteina

(d – neurčitost v poloze, nevím, jakou šterbinou částice prošla)

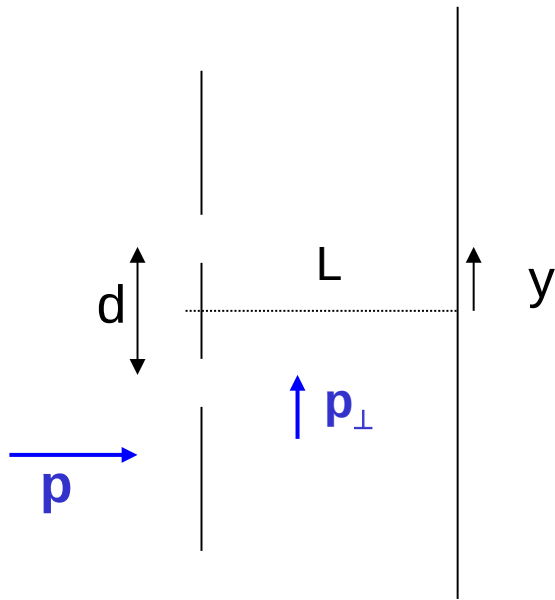
$\Delta y < d/4$ – potřebná přesnost polohy částice



$$\Delta p_{\perp} \Delta y \geq \frac{\hbar}{2} \quad \Rightarrow \quad \Delta p_{\perp} > \frac{2\hbar}{d}$$

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Vlnový charakter částic – kvantově-mechanický pohled



(d – neurčitost v poloze, nevím, jakou šěrbinou částice prošla)

$\Delta y < d/4$ – potřebná přesnost polohy částice

$$\Delta p_{\perp} \Delta y \geq \frac{\hbar}{2}$$

$$\Delta p_{\perp} > \frac{2\hbar}{d}$$

$$\delta = \frac{\Delta p_{\perp}}{p} L \rightarrow p = \frac{h}{\lambda}$$

změna polohy dopadu částice na stínítko vlivem změny p_{\perp}

$$\delta > \frac{\lambda L}{\pi d}$$

$$\delta_0 = \frac{\lambda L}{2d}$$

vzdálenost maxima a minima v interferenčním obrazci

$$\delta \sim \delta_0$$

lokalizací zruším interferenční obrazec!!!

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Rozptyl obecněji

$$F(\vec{q}) = \sum_n f_n(q) e^{-i\vec{q}\vec{R}_n}$$

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

$$\vec{q}\vec{a}_1 = 2\pi h$$

$$\vec{q}\vec{a}_2 = 2\pi k$$

$$\vec{q}\vec{a}_3 = 2\pi l$$

podmínky difrakce
(konstruktivní interference)

$$2d_{hkl} \sin \theta_{hkl} = \lambda$$

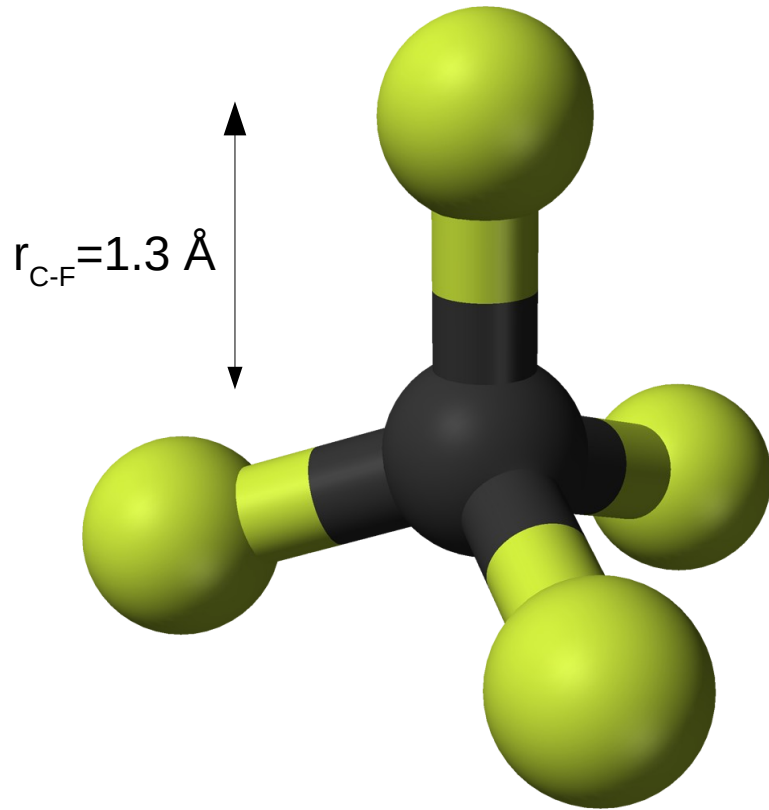
$$\vec{B}_{hkl} = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3$$

vektor reciproké mříže (kolmý k rovině (hkl))

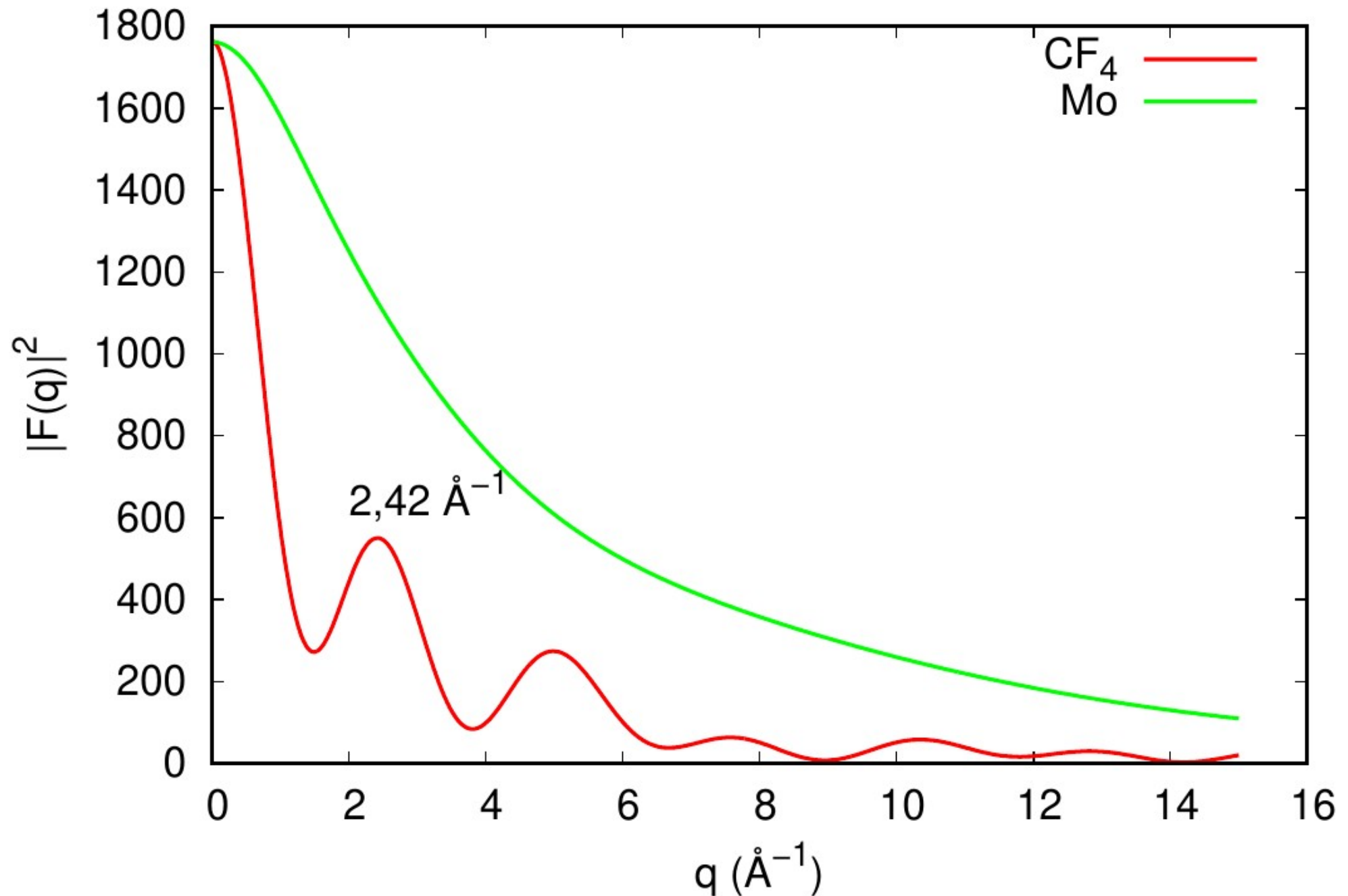
$$d_{hkl} = \frac{2\pi}{|\vec{B}_{hkl}|}$$

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

$$F(\vec{q}) = \sum_n f_n(q) e^{-i\vec{q}\vec{R}_n}$$



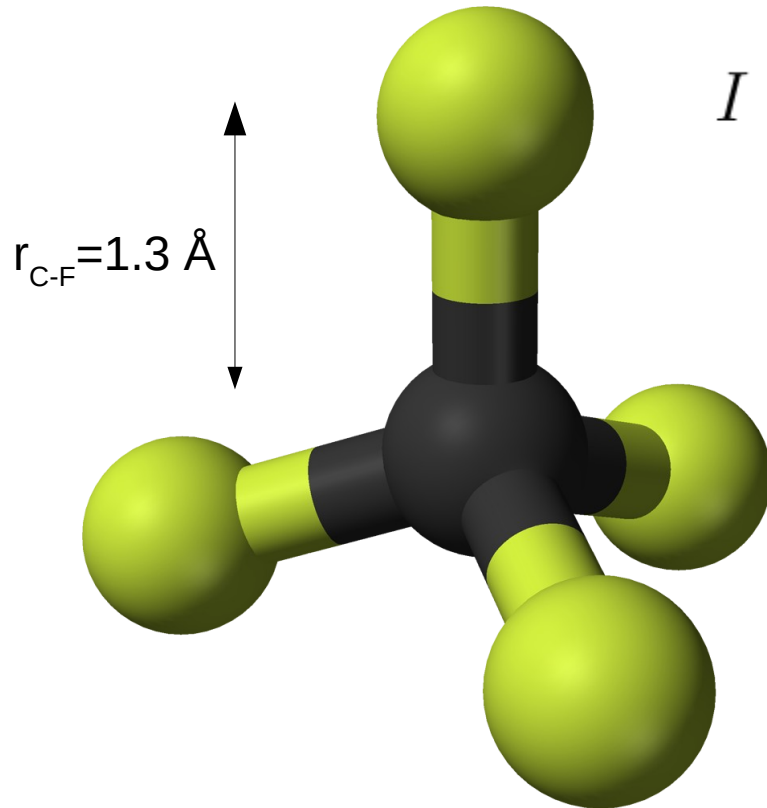
Atomová fyzika a elektronová struktura látek



Atomová fyzika a elektronová struktura látek

$$F(\vec{q}) = \sum_n f_n(q) e^{-i\vec{q}\vec{R}_n}$$

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



$$I \approx |F(q)|^2 = \sum_n \sum_m f_n(q) f_m^*(q) e^{iqr_{nm} \cos \varphi}$$

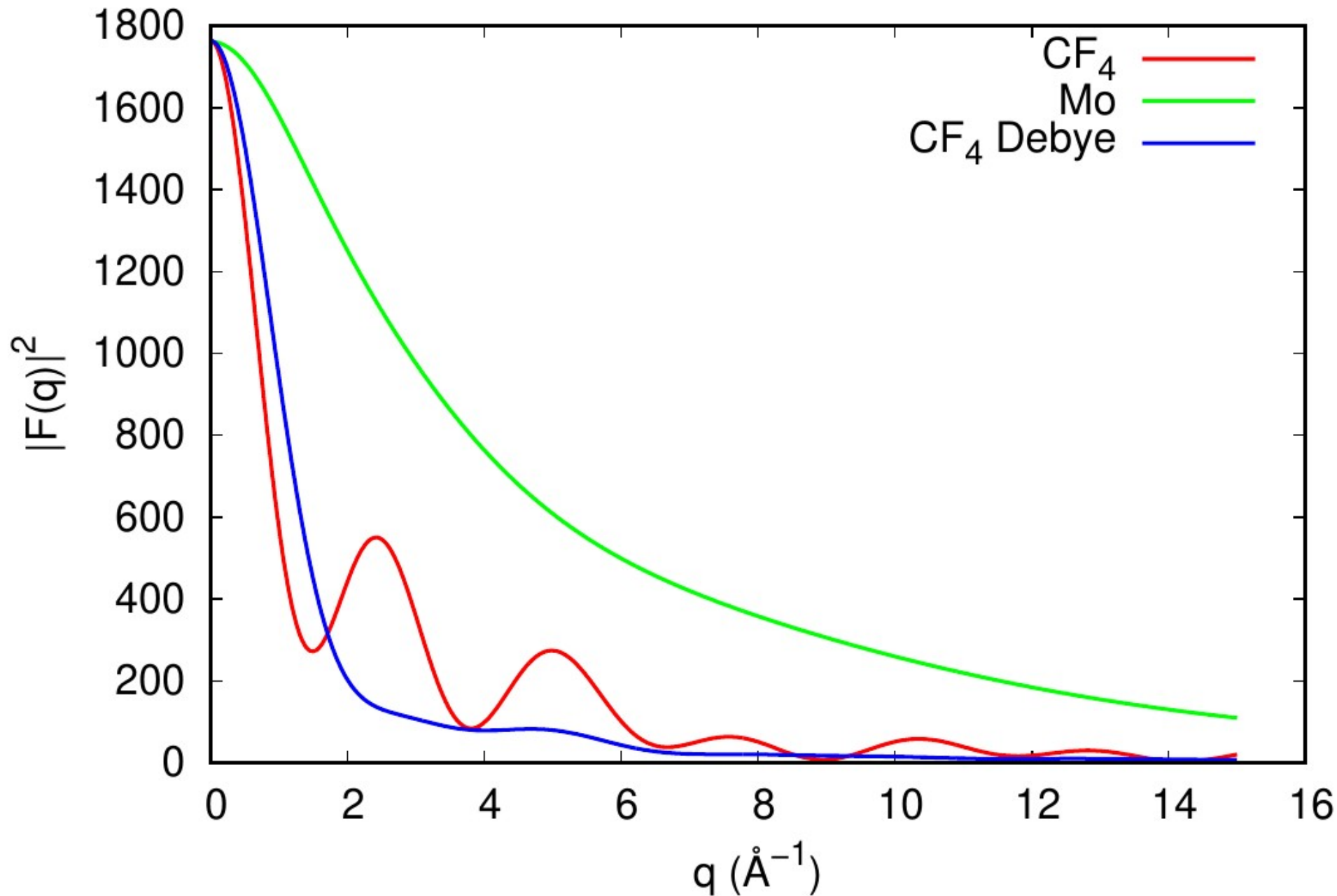


středování

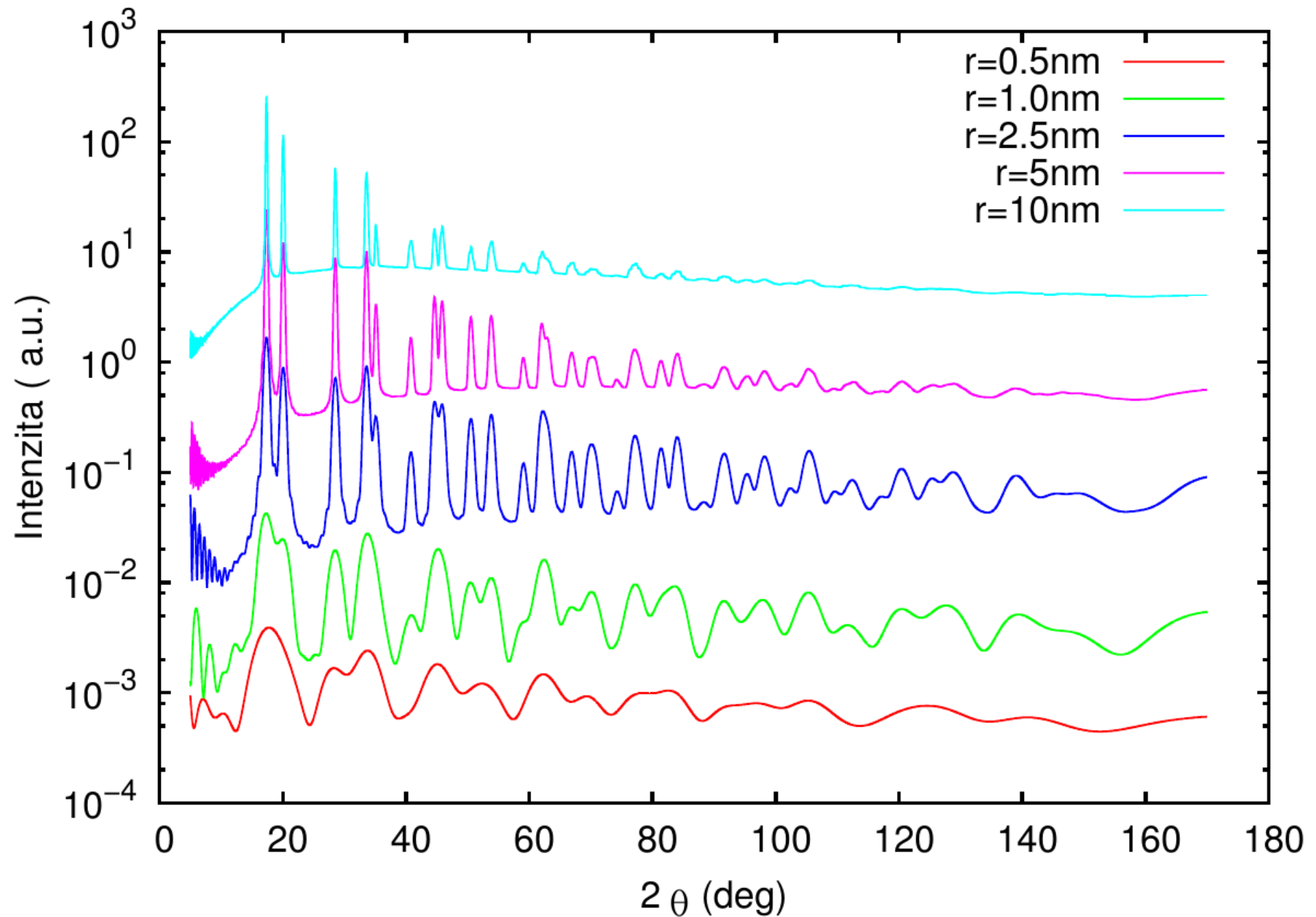
$$I \approx |F(q)|^2 = \sum_n \sum_m f_n(q) f_m^*(q) \frac{\sin(qr_{nm})}{qr_{nm}}$$

Debyeův vztah

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

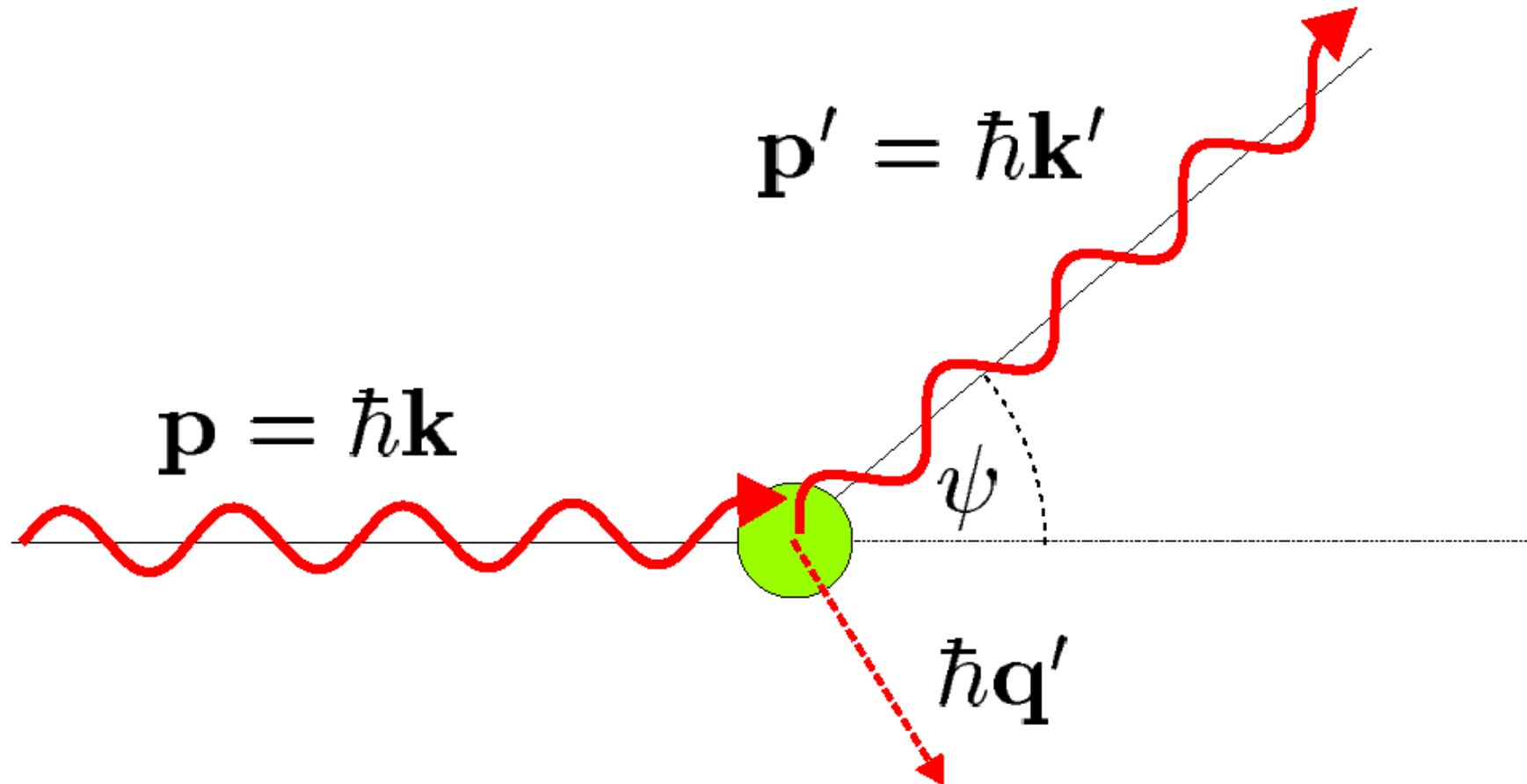


Atomová fyzika a elektronová struktura látek



Atomová fyzika a elektronová struktura látek

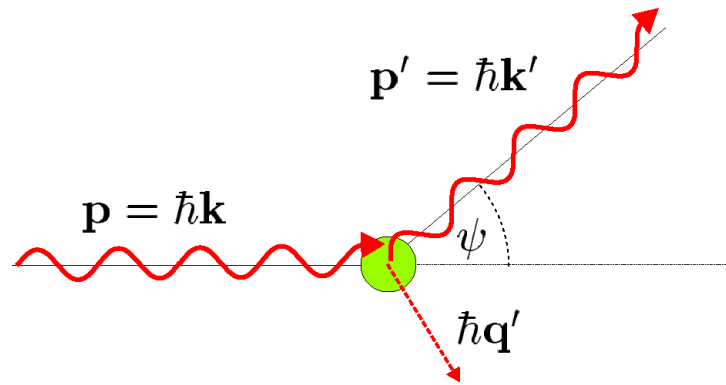
Comptonův rozptyl



Jak se změní vlnová délka fotonu po rozptylu?

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Comptonův rozptyl



$$E + E_e = E' + E'_e$$

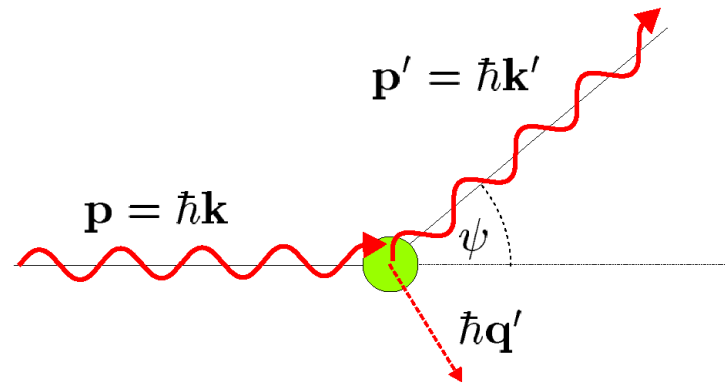
$$\vec{p} = \vec{p}' + \vec{p}'_e$$

$$E - E' = \frac{EE'}{m_e c^2} (1 - \cos \psi)$$

$$\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = \frac{h}{m_e c} (1 - \cos \psi)$$

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

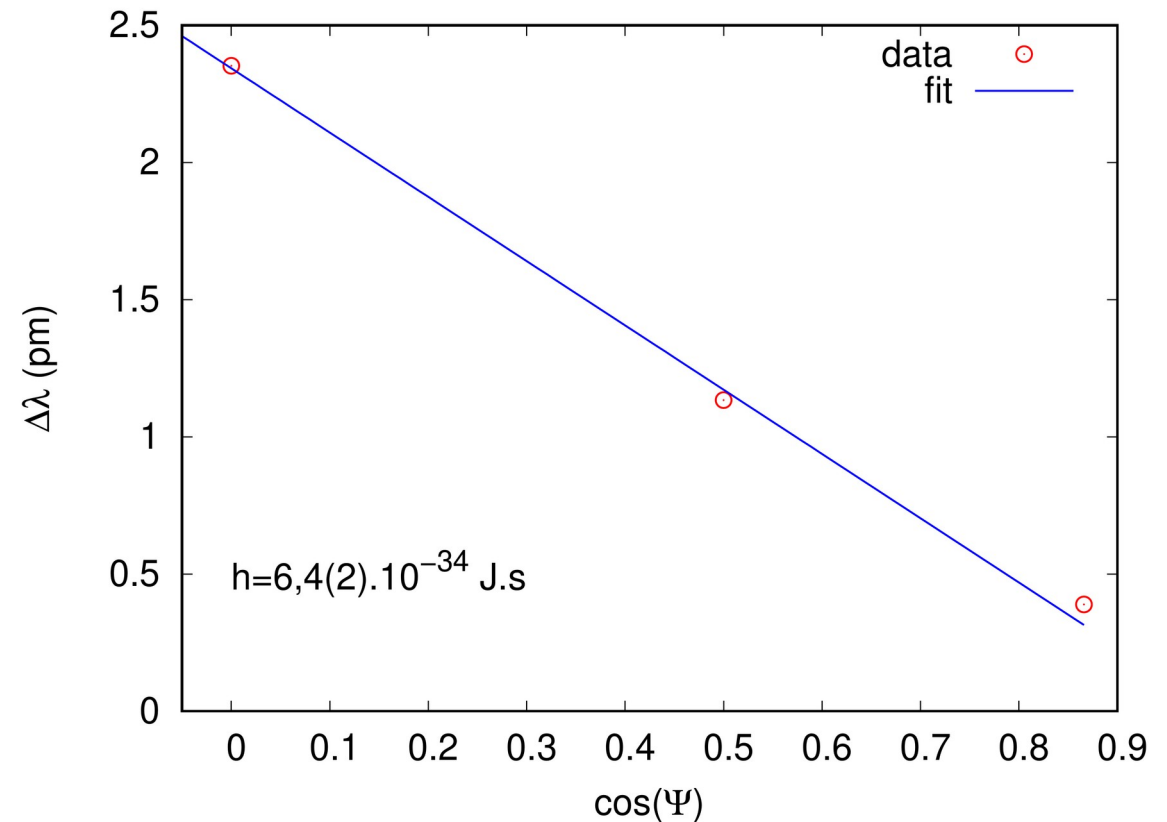
Comptonův rozptyl



$$\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = \frac{h}{m_e c} (1 - \cos\psi)$$

$$E_\gamma(^{137}\text{Cs}) = 661,7 \text{ keV}$$

Ψ (°)	E'_γ (keV)	$\Delta\lambda$ (pm)
30	547,930	0,39
60	412,279	1,13
90	293,391	2,35

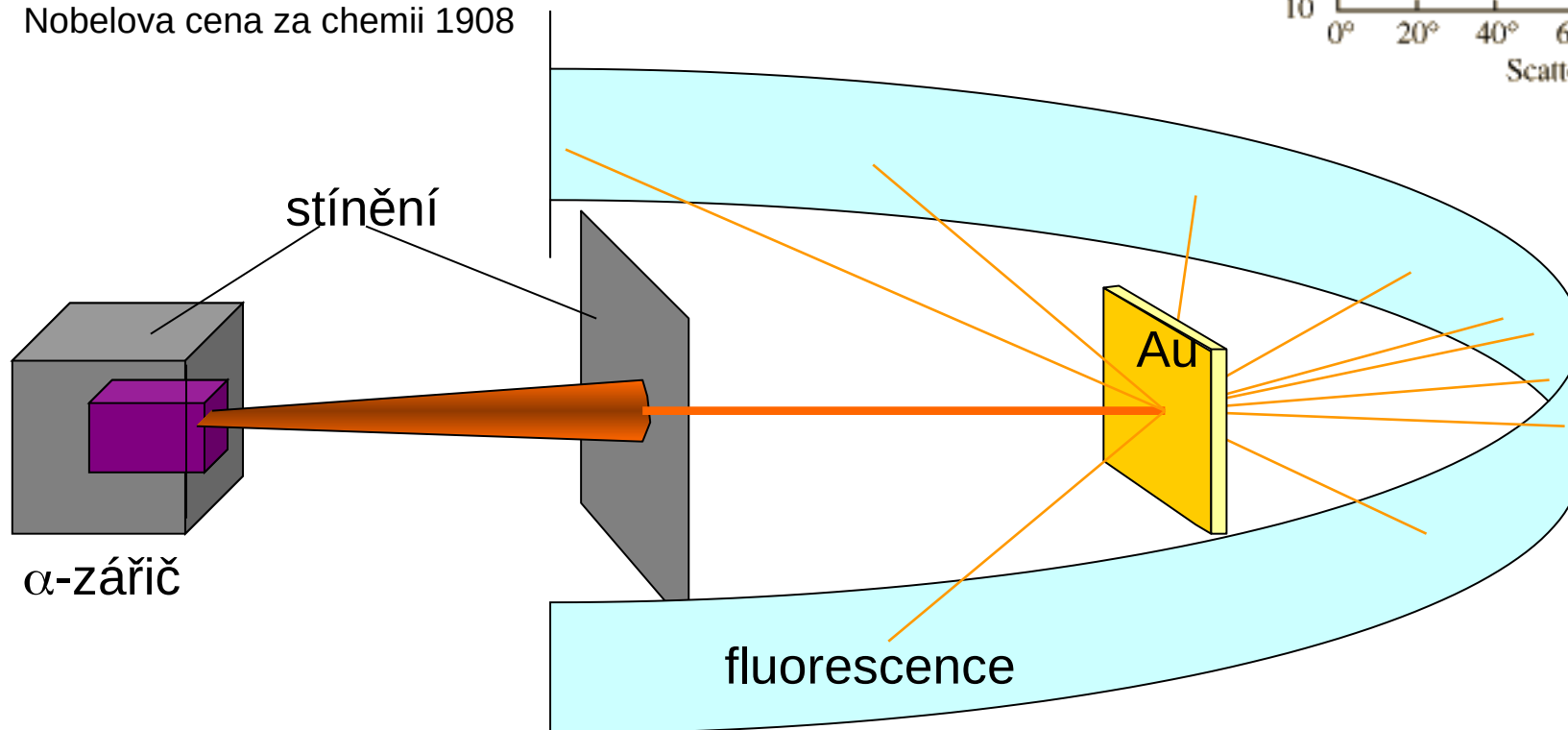
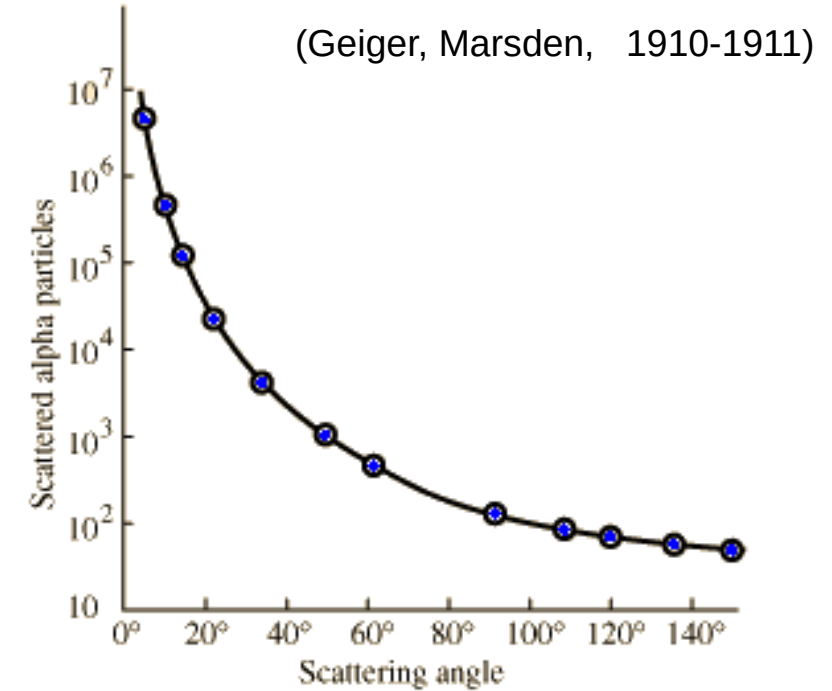
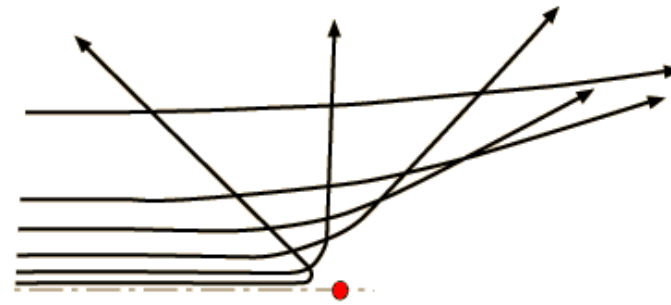


Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Rutherfordův rozptyl

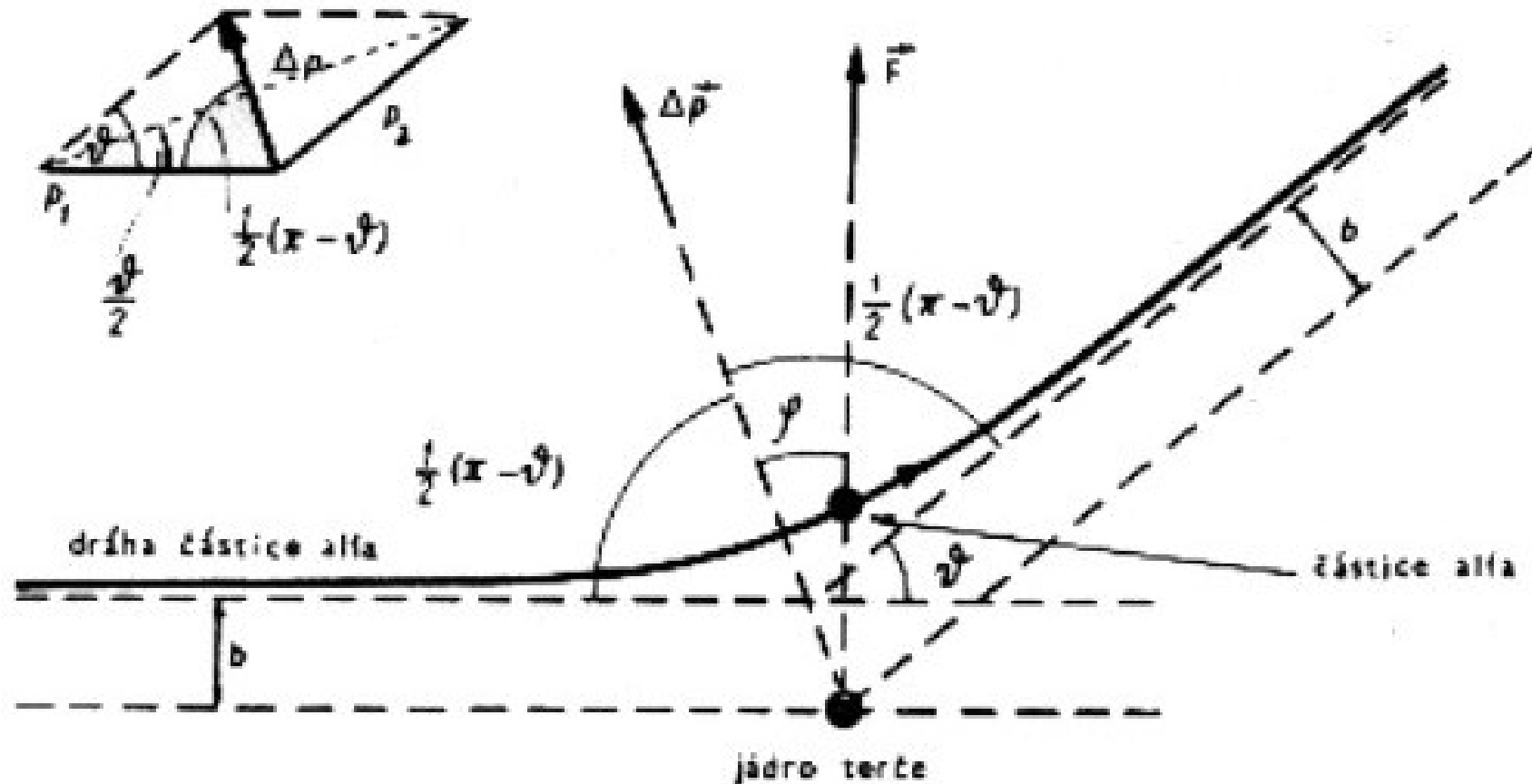


Ernest Rutherford
(1871-1937)
Nobelova cena za chemii 1908



Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Rutherfordův rozptyl



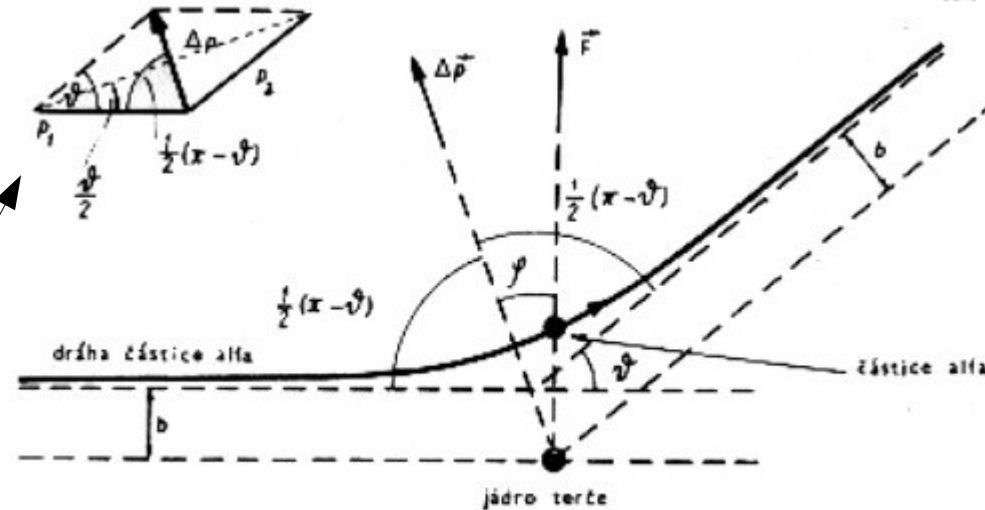
Obr. 5.7 Geometrická ilustrace pro popis Rutherfordova rozptylu.

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Rutherfordův rozptyl

zákon zachování momentu hybnosti
(působení částice a jádra jen na spojnici)

$$I = m\omega r^2 = m \frac{d\varphi}{dt} r^2 = mvb = konst.$$



Obr. 5.7 Geometrická ilustrace pro popis Rutherfordova rozptylu.

$$\frac{dt}{d\varphi} = \frac{r^2}{vb}$$

$$\Delta \vec{p} = \vec{p}_2 - \vec{p}_1 = \int \vec{F} dt \quad \text{změna hybnosti } \alpha\text{-částice vlivem Coulombické interakce}$$

$$p_1 = p_2 = mv \quad \text{jádro nehybné – není změna hybnosti}$$

$$\frac{1}{2} \Delta p = mv \sin \frac{\vartheta}{2}$$

$$2mv \sin \frac{\vartheta}{2} = \int_0^{\infty} F \cos \varphi dt$$

$$= \int_{-\frac{\pi-\vartheta}{2}}^{\frac{\pi-\vartheta}{2}} F \cos \varphi \frac{dt}{d\varphi} d\varphi$$

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Rutherfordův rozptyl

síla F je coulombická

$$F = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{2Ze^2}{r^2} \quad \frac{dt}{d\varphi} = \frac{r^2}{vb}$$

$$2mv \sin \frac{\vartheta}{2} = \int_{-\frac{\pi-\vartheta}{2}}^{\frac{\pi-\vartheta}{2}} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{2Ze^2}{r^2} \frac{r^2}{vb} \cos \varphi d\varphi$$

$$E_{k,\alpha} b \frac{4\pi\epsilon_0}{Ze^2} = \cotg \frac{\vartheta}{2}$$

pod jakým úhlem se rozptýlí částice, je-li v ∞ záměrná vzdálenost b ($b(v)$ se nazývá srážkový parametr)

$$d\sigma = \frac{dN}{n}$$

diferenciální účinný průřez

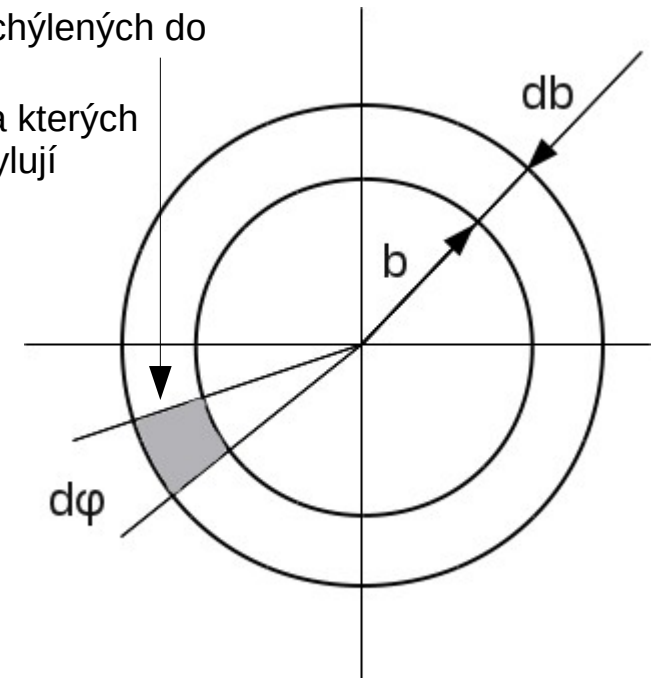
počet částic odchýlených do

hustota jader, na kterých se částice rozptylují

$$d\sigma = b(\vartheta) db d\varphi = b(\vartheta) \left| \frac{db(\vartheta)}{d\vartheta} \right| d\vartheta d\varphi$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{b(\vartheta)}{\sin \vartheta} \left| \frac{db(\vartheta)}{d\vartheta} \right|$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{Ze'^2}{E_{k,\alpha}} \right)^2 \frac{1}{4 \sin^4 \frac{\vartheta}{2}}$$

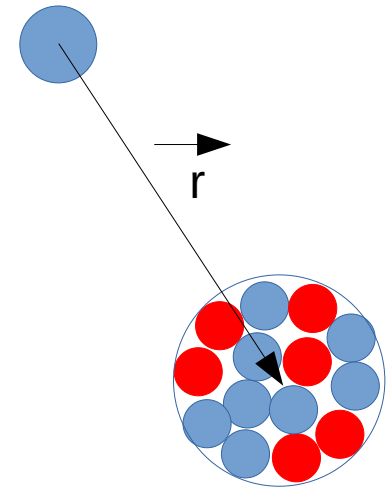
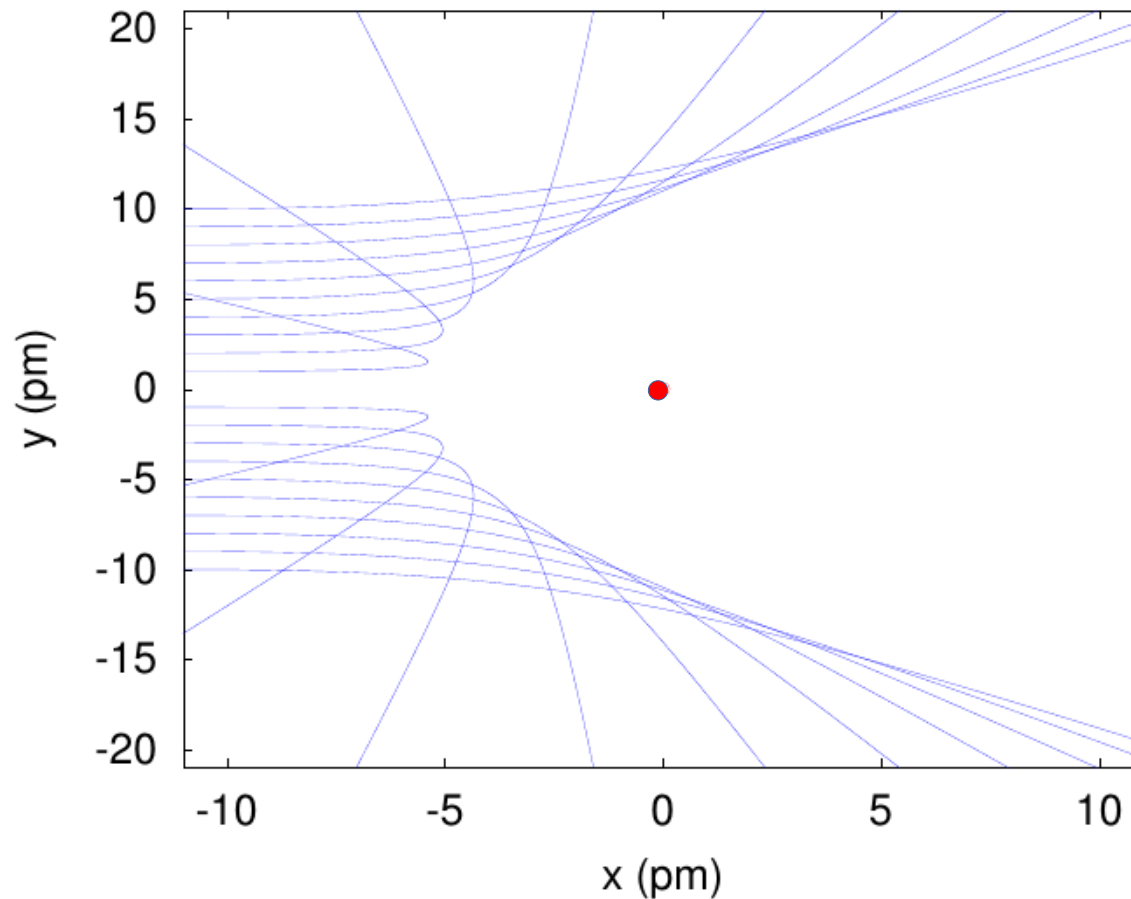


Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Rutherfordův rozptyl

$$m_{\alpha} \frac{d^2x}{dt^2} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Q_{\alpha}Q_{Au}}{r^3} x$$

$$m_{\alpha} \frac{d^2y}{dt^2} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Q_{\alpha}Q_{Au}}{r^3} y$$



Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Mikroskopy

Klasický optický mikroskop zvětšuje obraz předmětu pomocí optické soustavy

rozlišení $\sim 0.2\mu\text{m}$

Jak zvýšit rozlišení tak, abychom viděli atomy???

kratší vlnová délka

TEM, SEM – elektronový mikroskop

jiné principy

STM – skanovací tunelovací mikroskop

AFM – mikroskop atomové síly



Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Elektronový mikroskop



Ernst Ruska
(1906-1988)

TEM

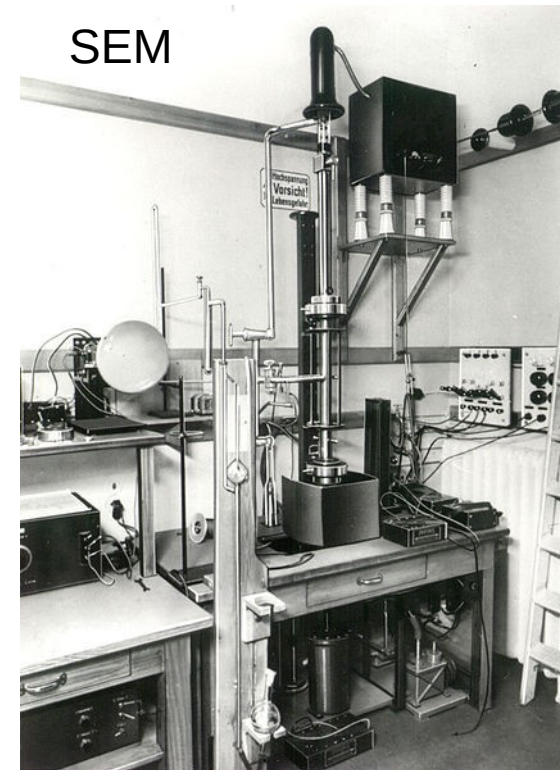


1931



Manfred von Ardenne
(1907-1997)

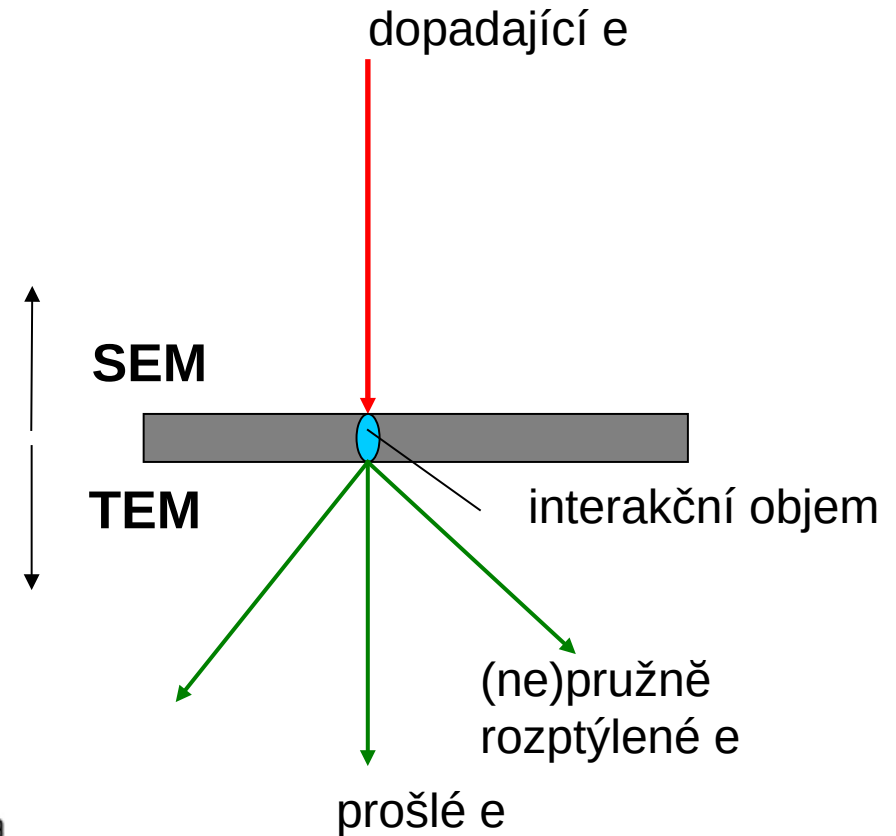
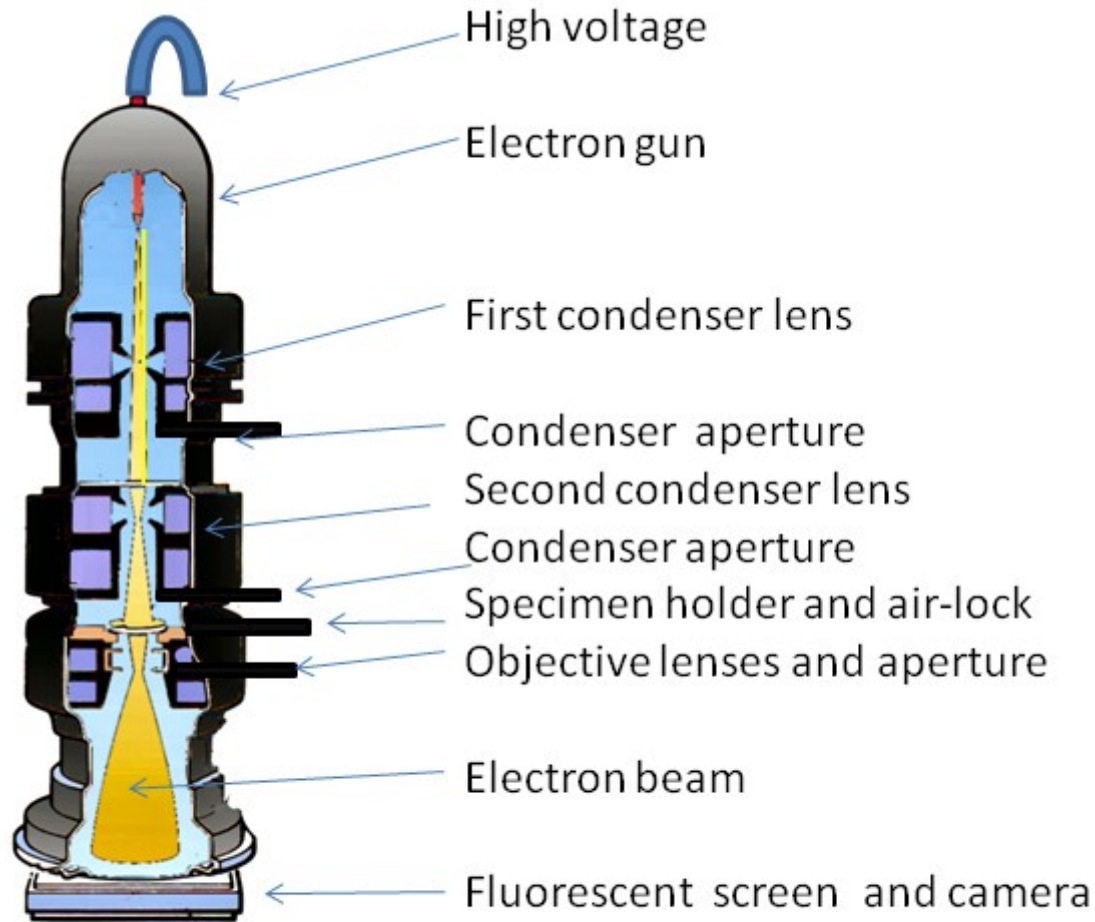
SEM



1937

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

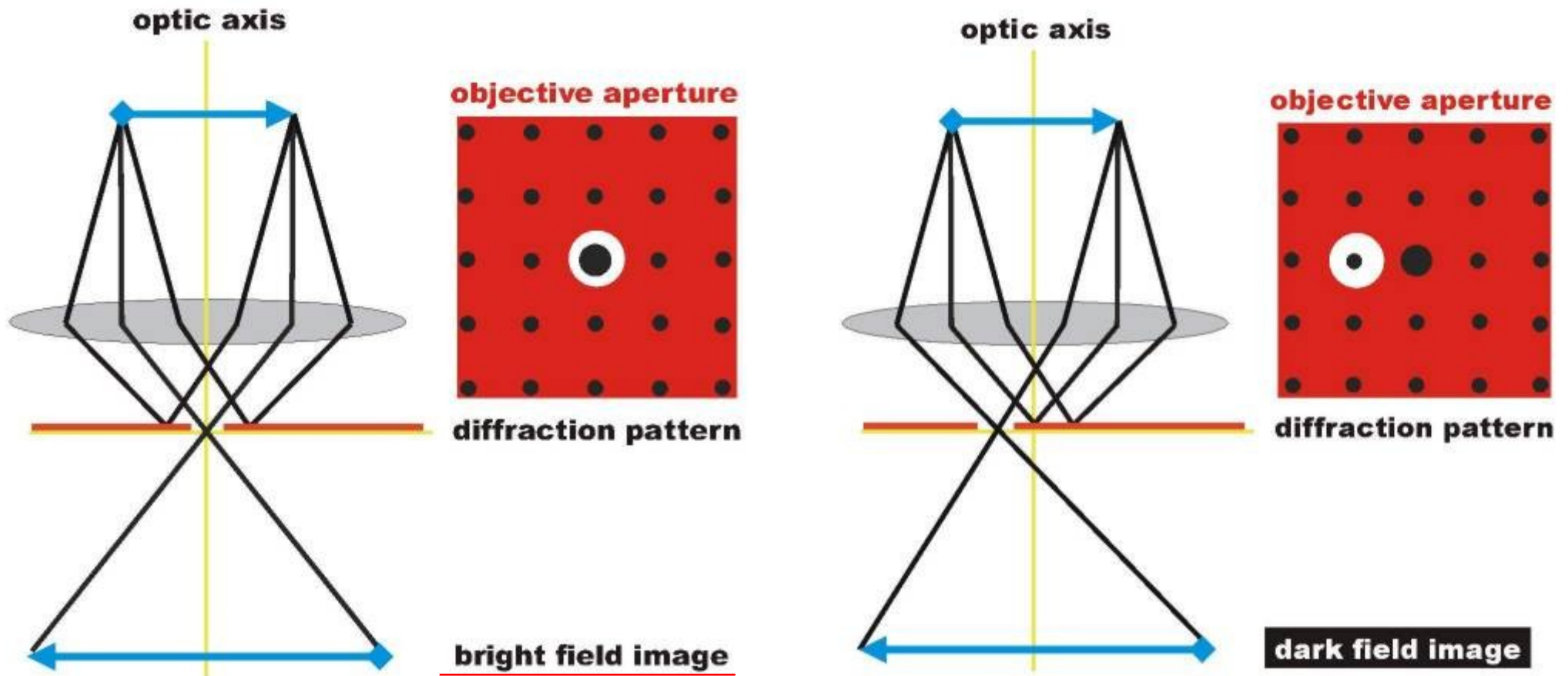
Elektronový mikroskop



Transmission Electron Microscope

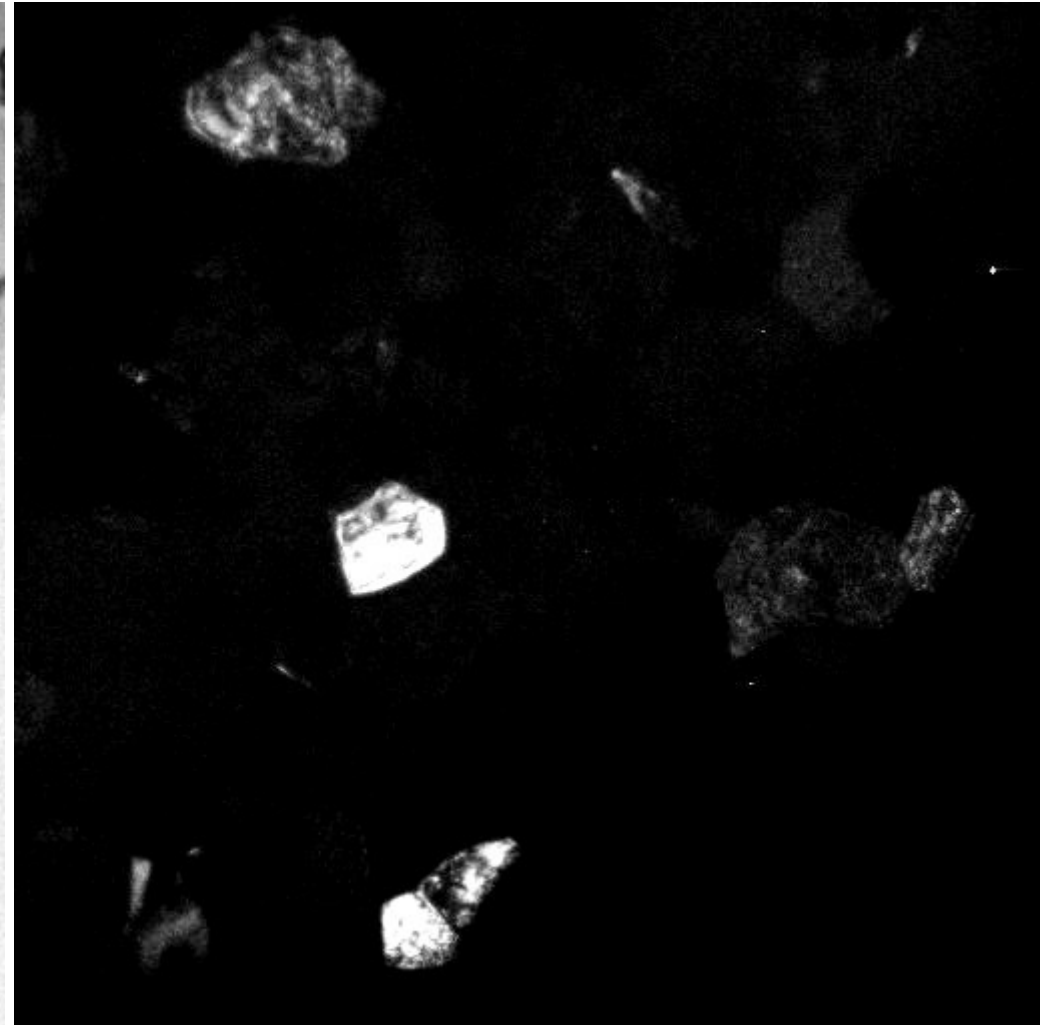
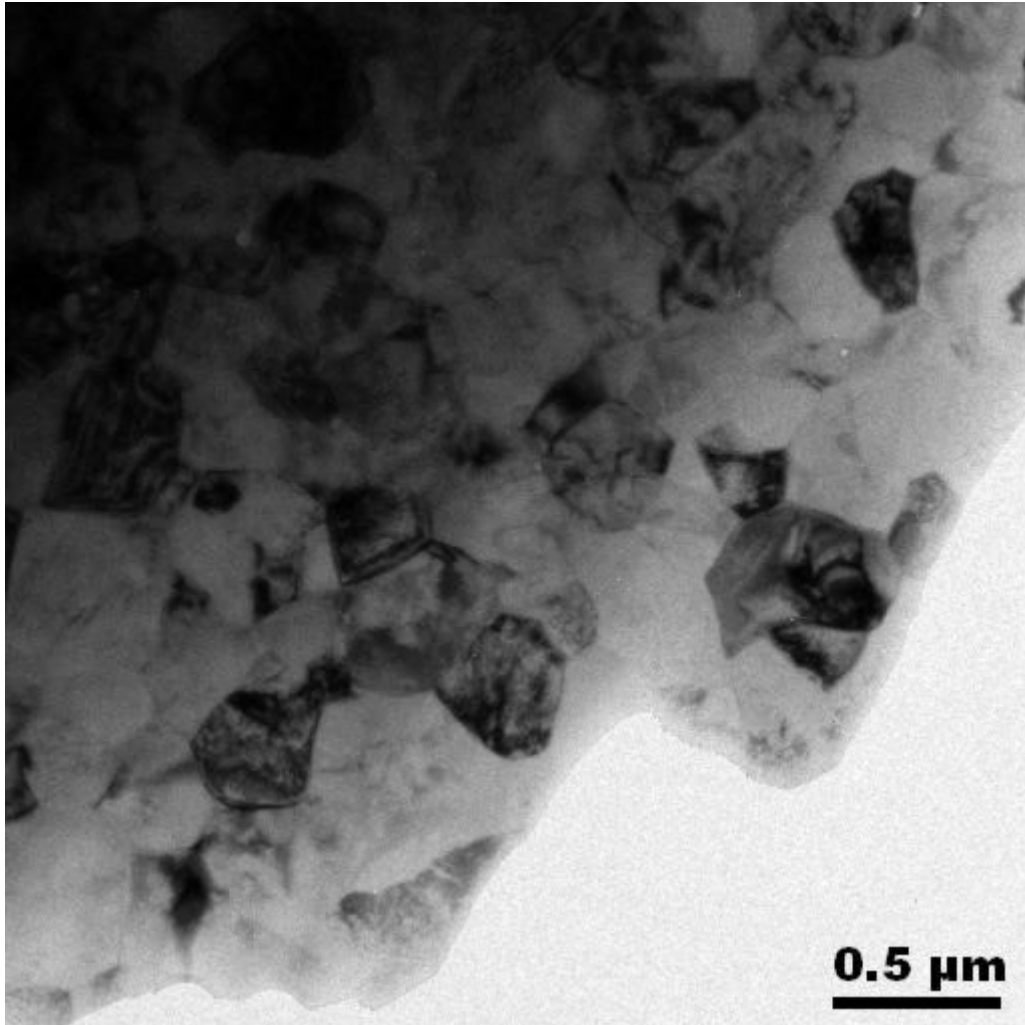
Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Elektronový mikroskop



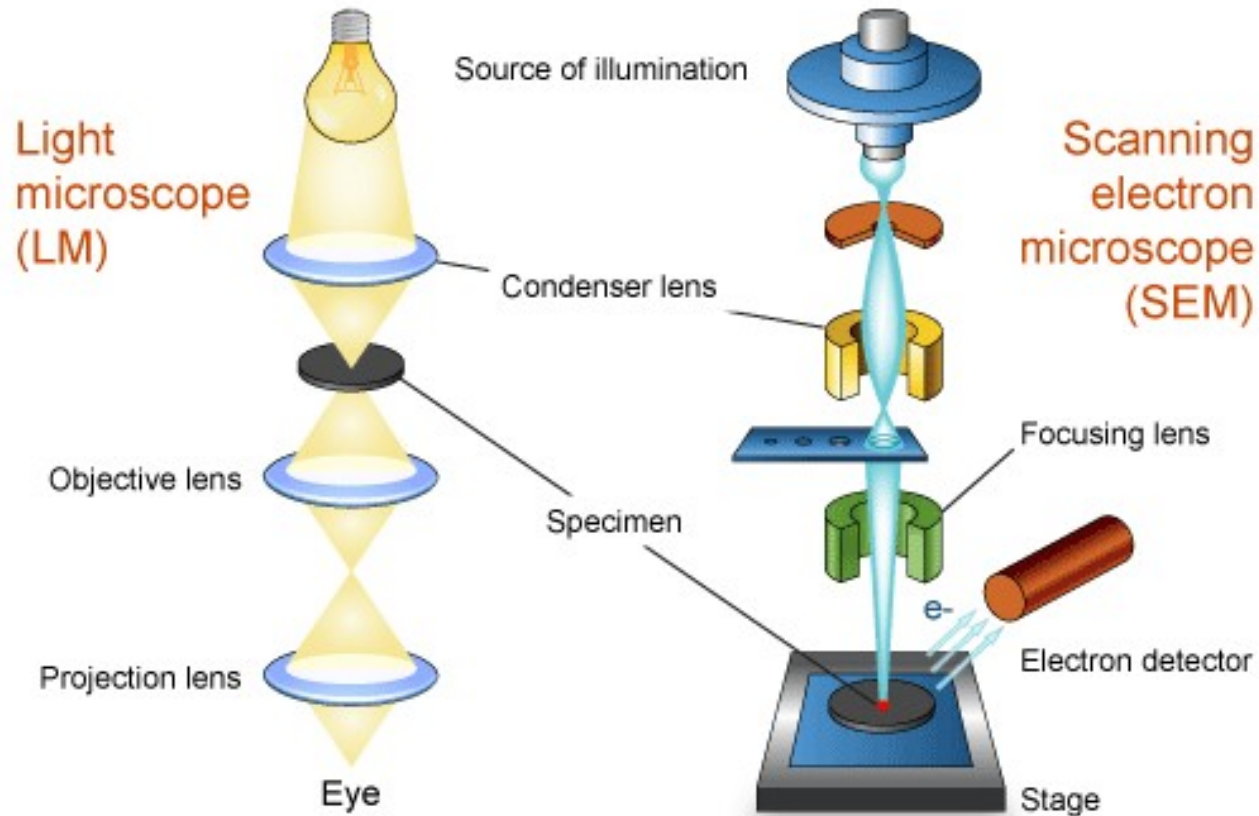
Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Elektronový mikroskop



Atomová fyzika a elektronová struktura látek

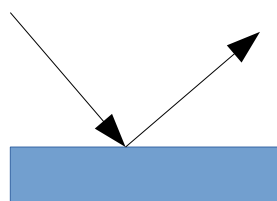
Elektronový mikroskop



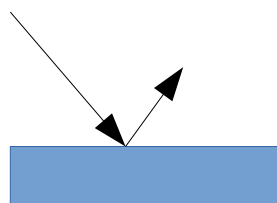
Atomová fyzika a elektronová struktura látek

těžší prvky

lehčí prvky

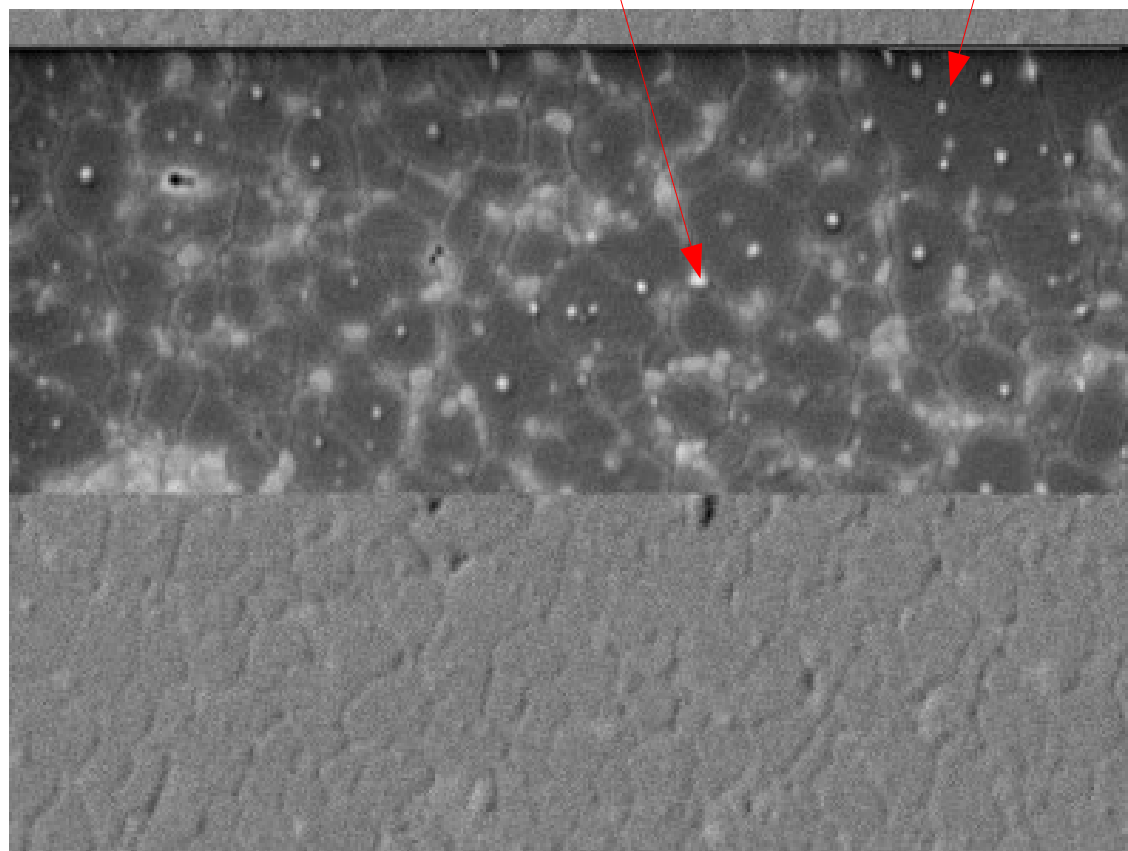


BS

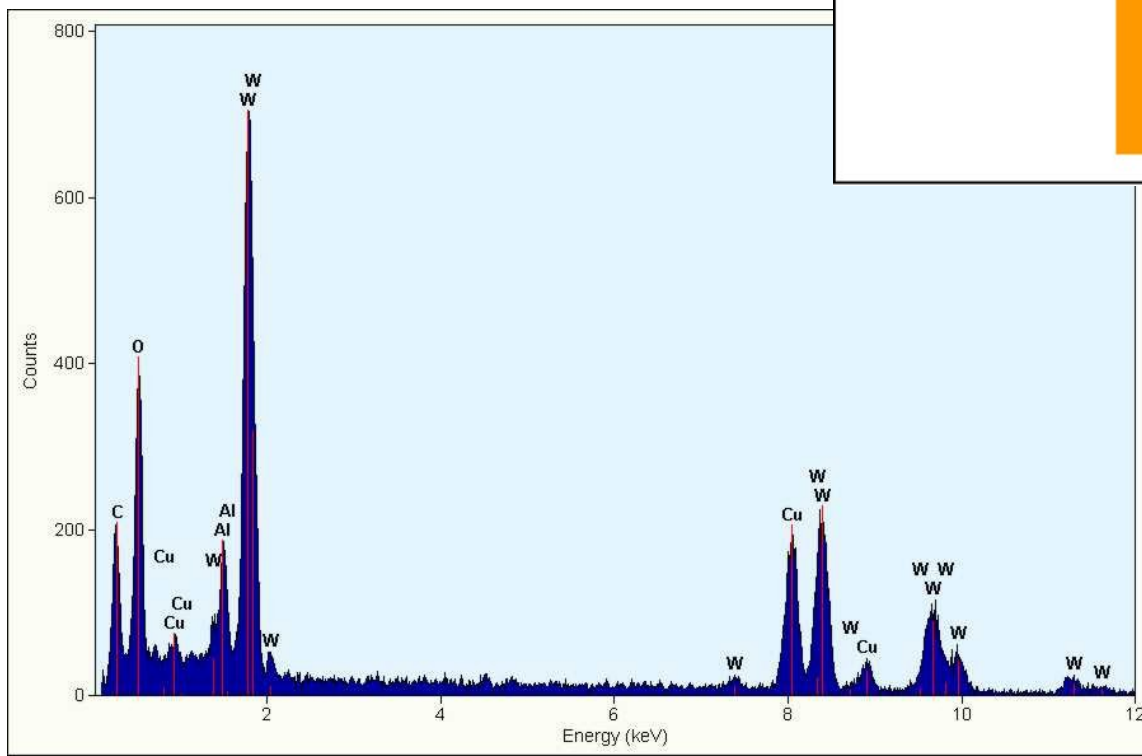
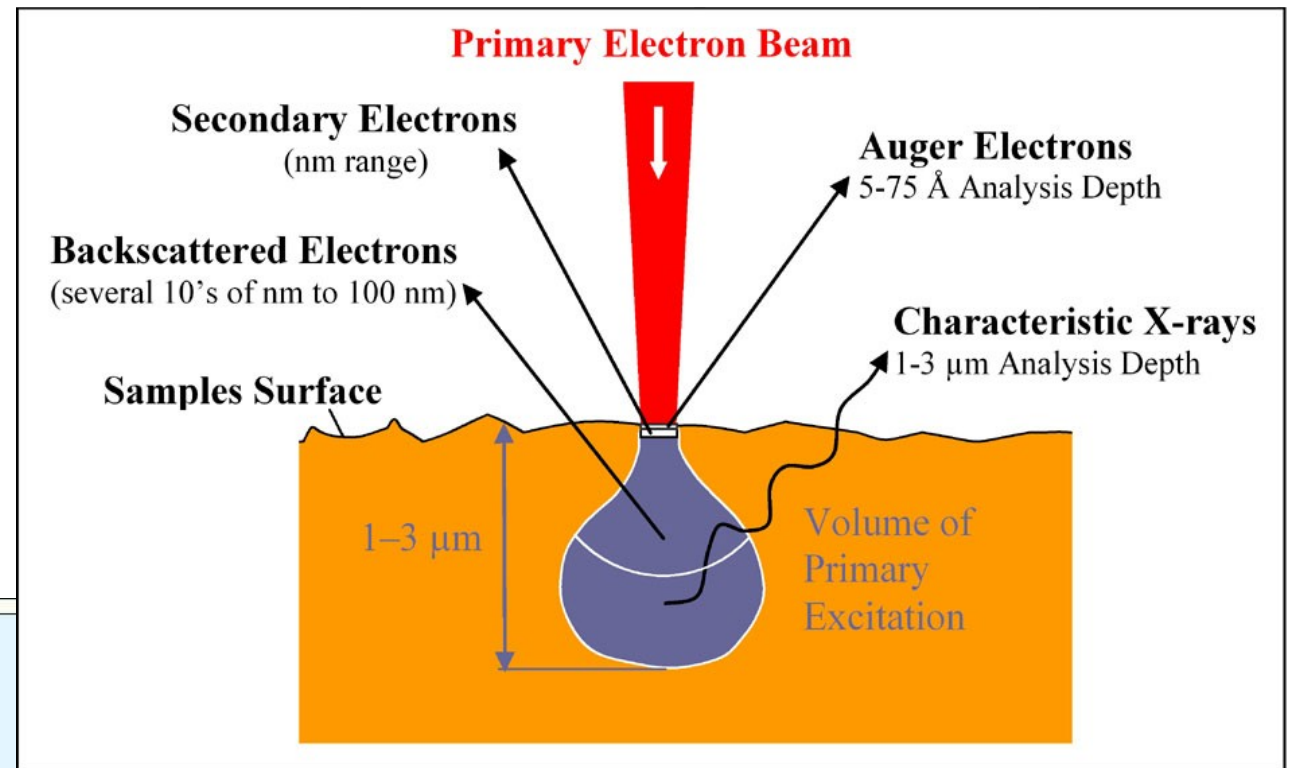
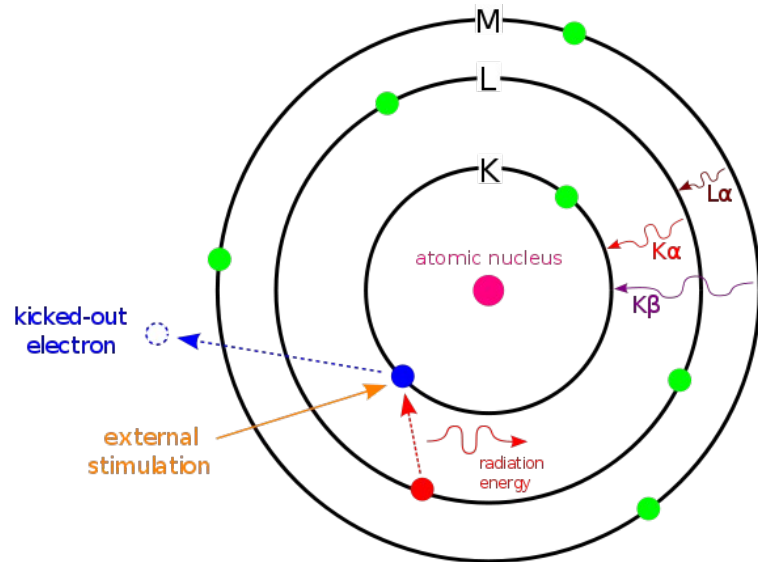


SE

$E_e \sim 50\text{eV}$



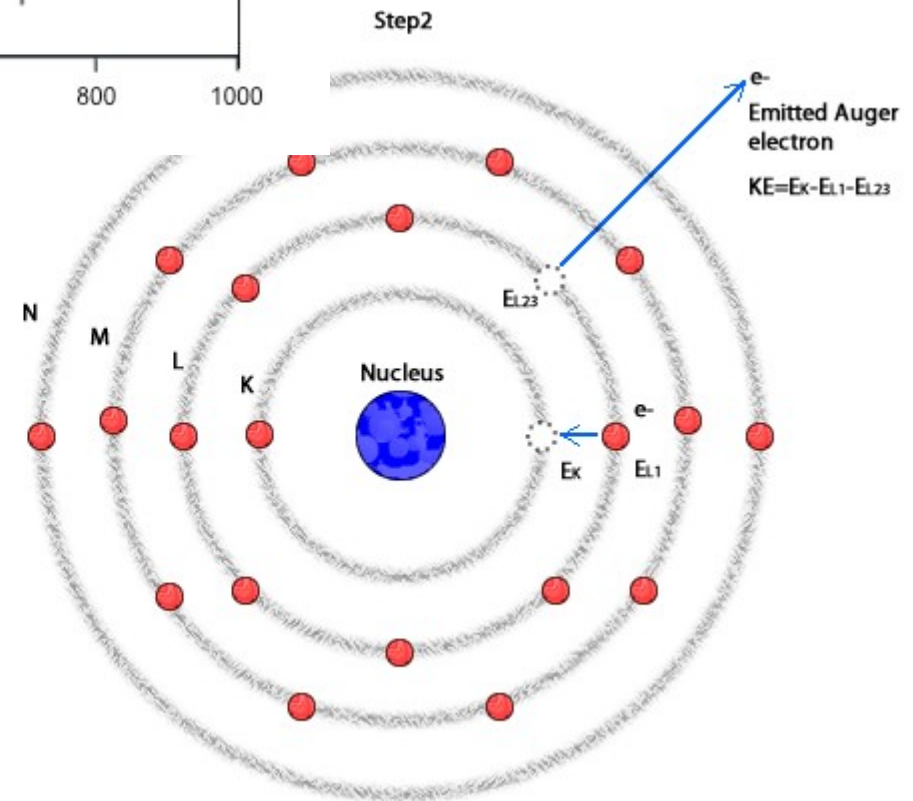
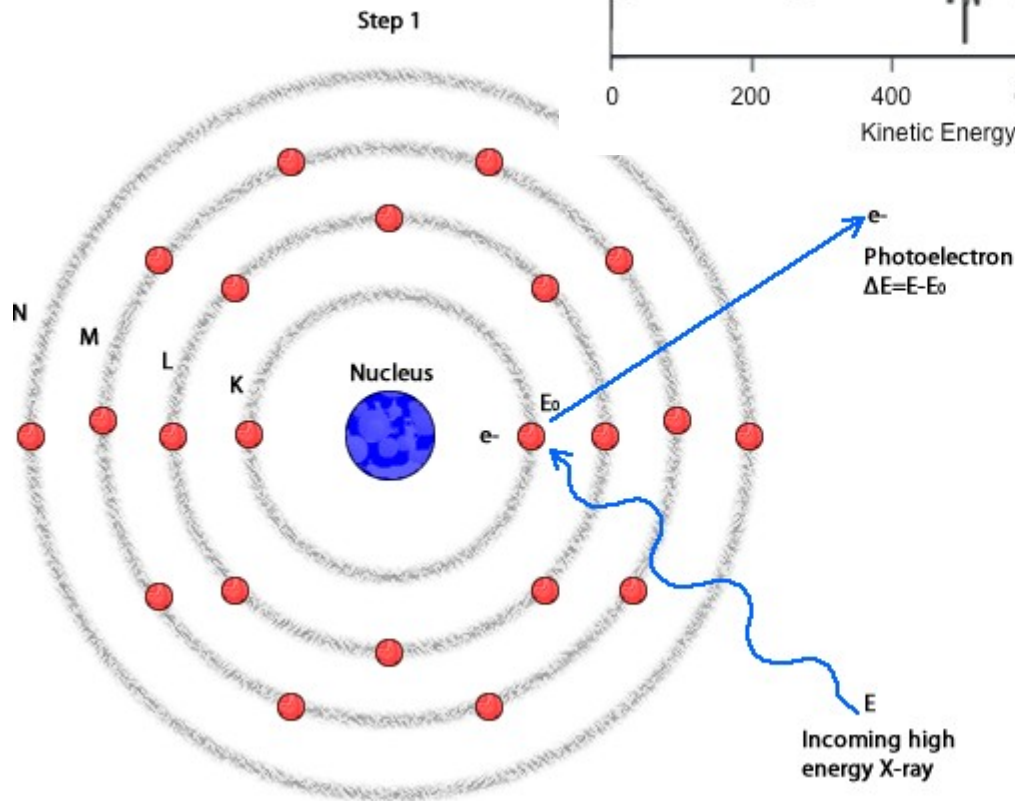
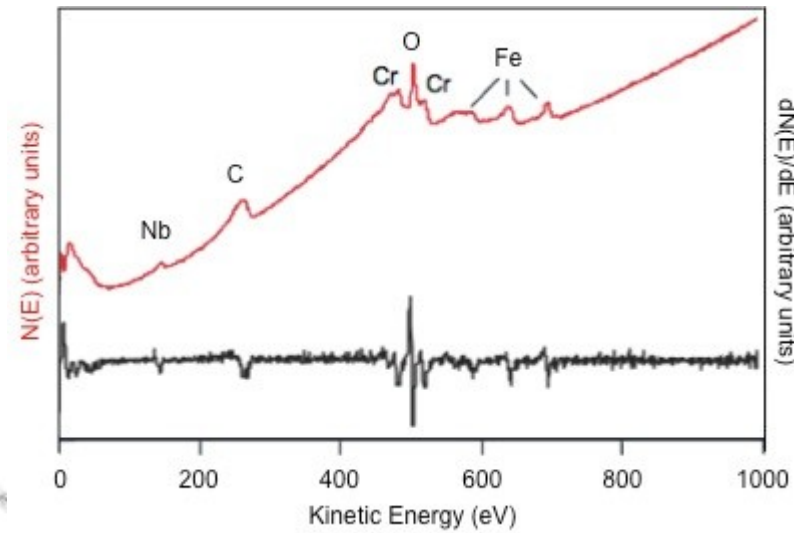
Atomová fyzika a elektronová struktura látek



EDX, EDAX,

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Augerovy elektrony



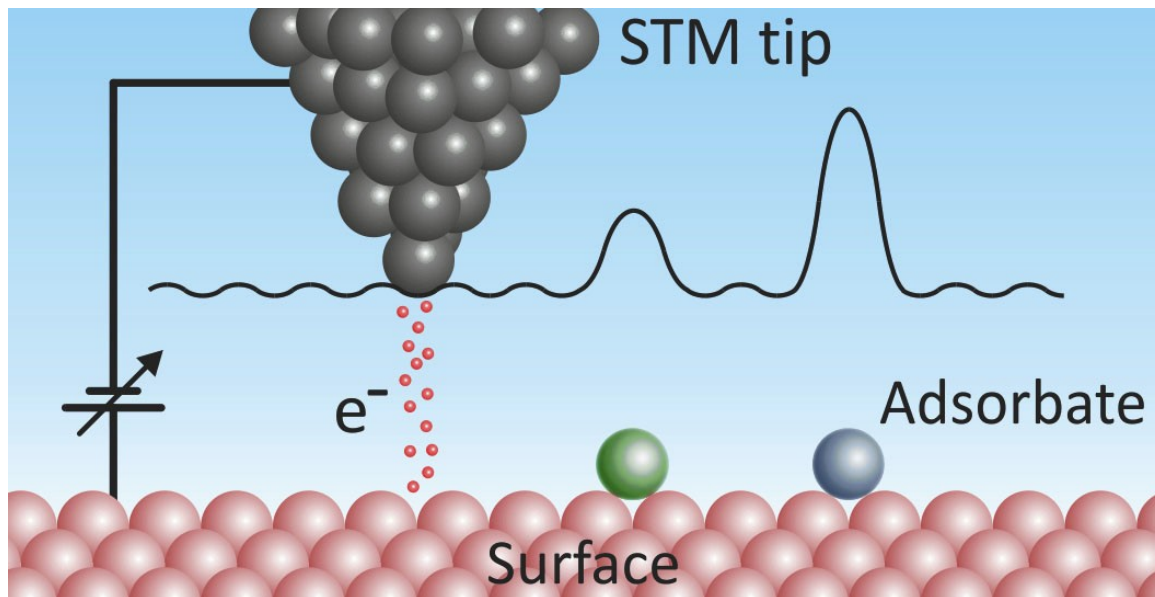
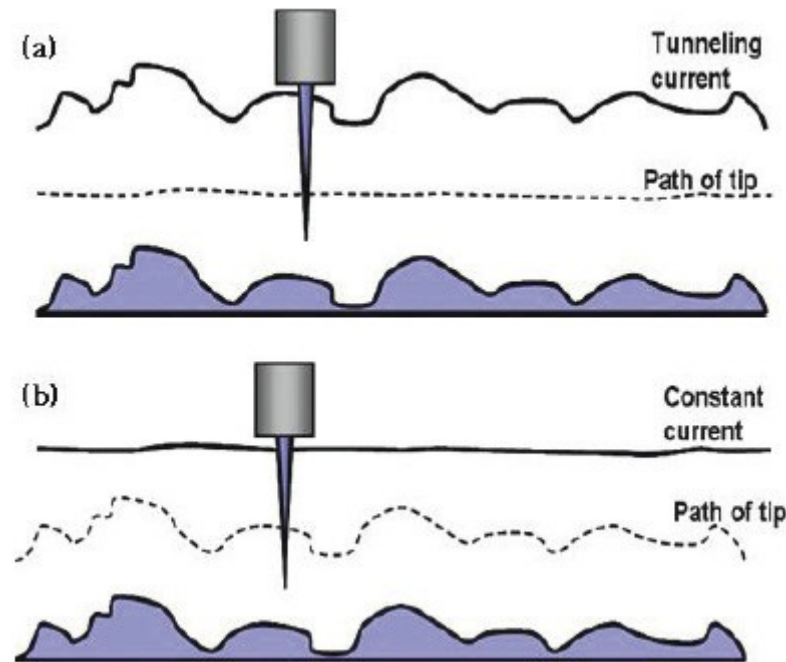
$$E_K = E_X - E_{11} - E_{123}$$

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Skannovací tunelovací mikroskop

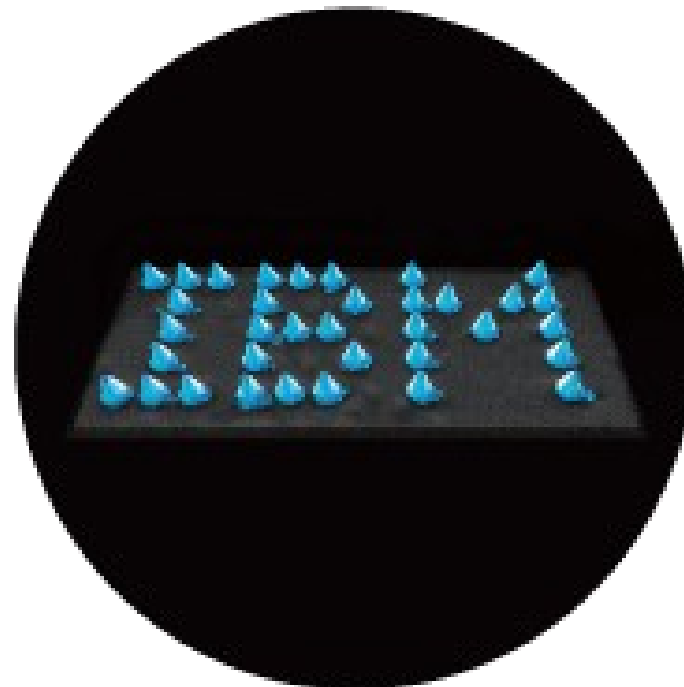
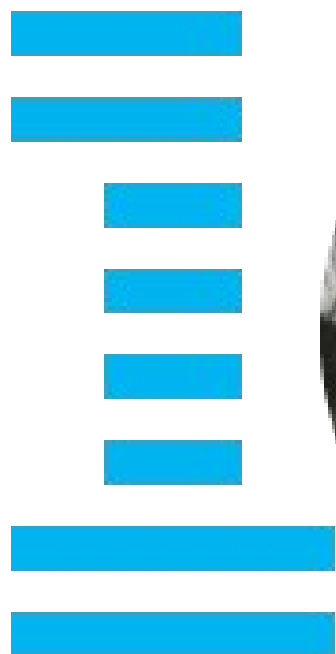


Heinrich Rohrer (1933-2013) Gerd Binnig (*1947)



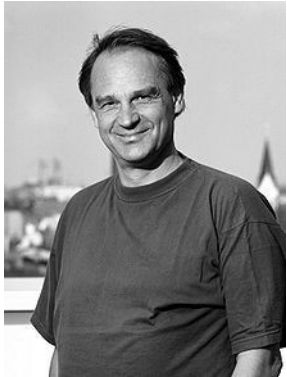
$$I(z) \sim e^{-\kappa z}$$

Atomová fyzika a elektronová struktura látek



Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Mikroskop atomových sil



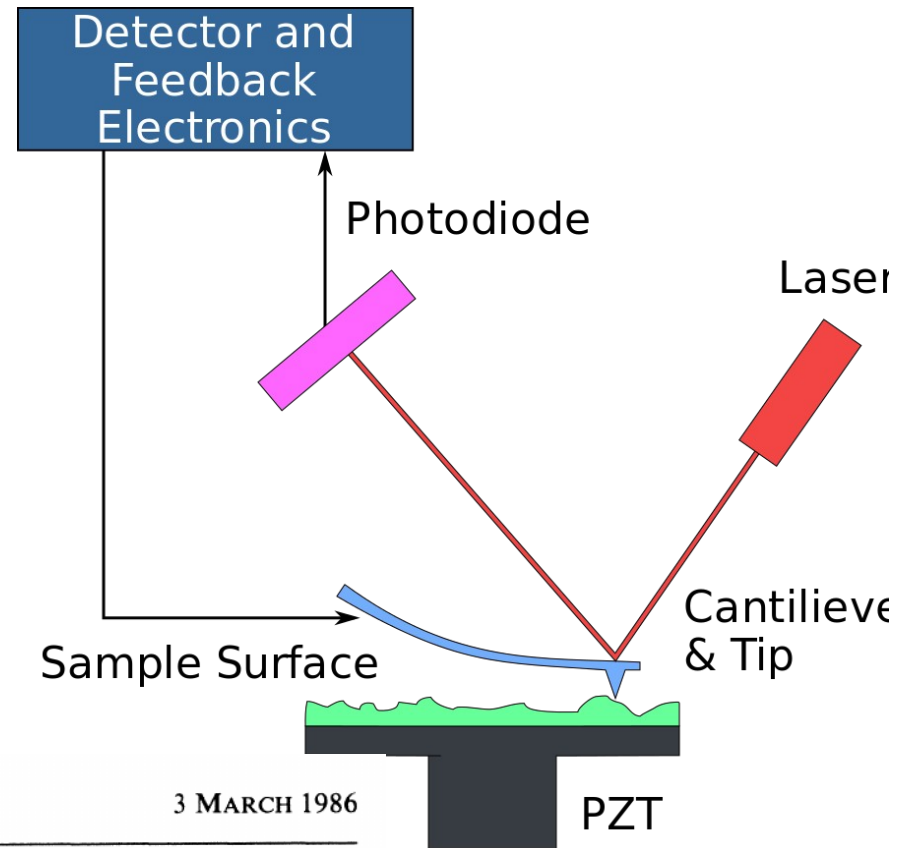
Gerd Binnig
(*1947)



Calvin Quate
(*1923)



Christof Gerber



VOLUME 56, NUMBER 9

PHYSICAL REVIEW LETTERS

3 MARCH 1986

Atomic Force Microscope

G. Binnig^(a) and C. F. Quate^(b)

Edward L. Ginzton Laboratory, Stanford University, Stanford, California 94305

and

Ch. Gerber^(c)

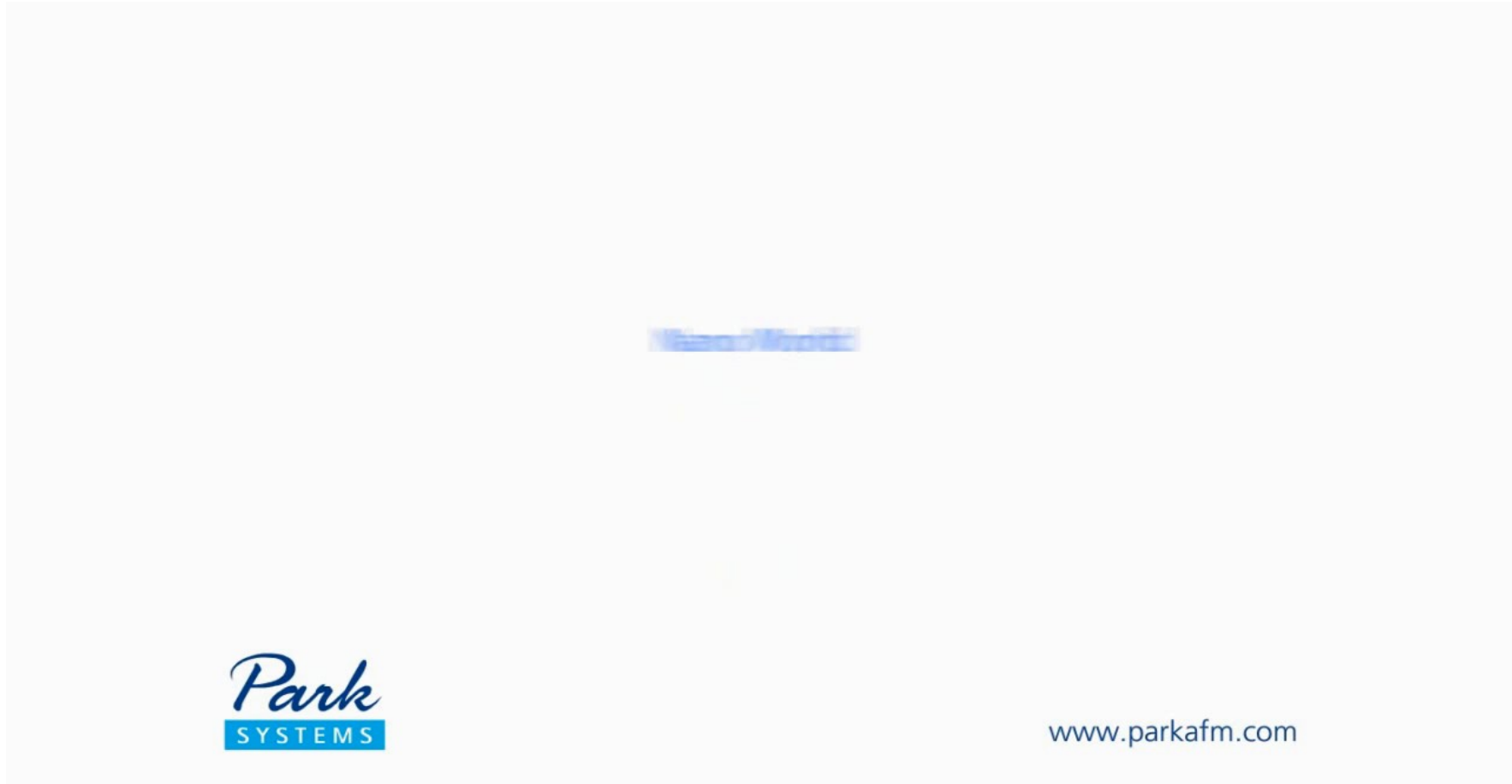
IBM San Jose Research Laboratory, San Jose, California 95193

(Received 5 December 1985)

The scanning tunneling microscope is proposed as a method to measure forces as small as 10^{-18} N. As one application for this concept, we introduce a new type of microscope capable of investigating surfaces of insulators on an atomic scale. The atomic force microscope is a combination of the principles of the scanning tunneling microscope and the stylus profilometer. It incorporates a probe that does not damage the surface. Our preliminary results *in air* demonstrate a lateral resolution of 30 Å and a vertical resolution less than 1 Å.

Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Mikroskop atomových sil

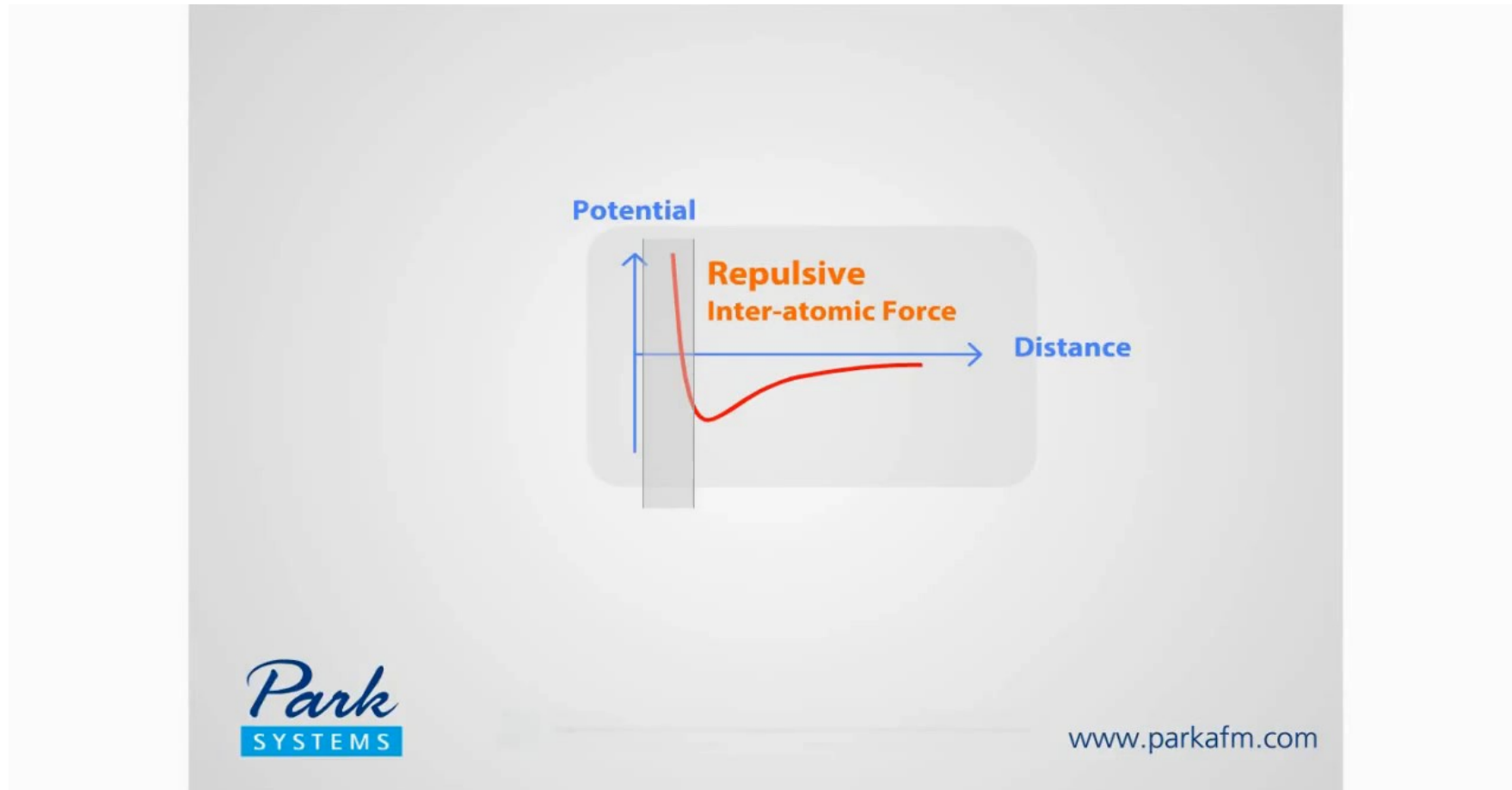


Park
SYSTEMS

www.parkafm.com

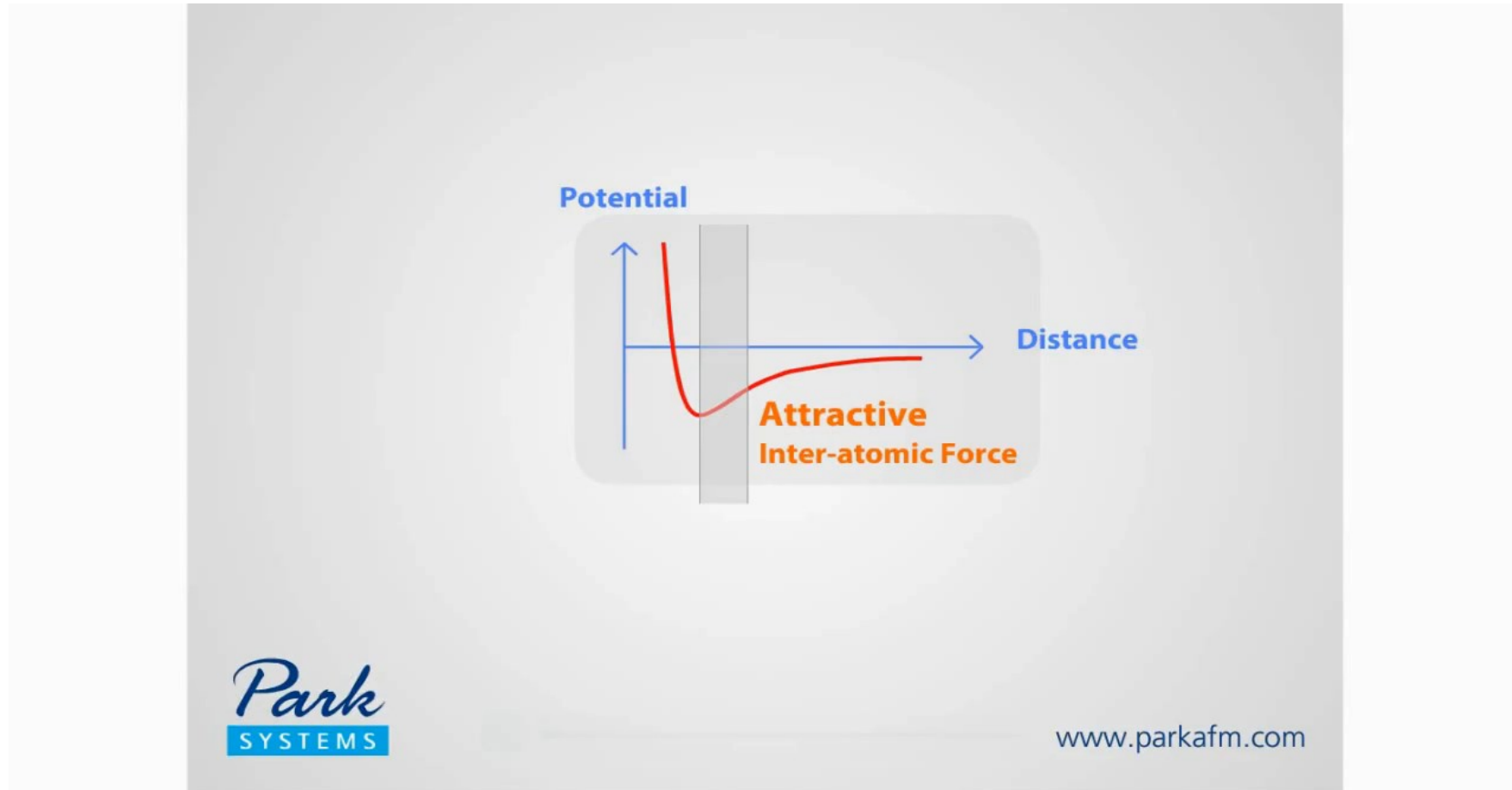
Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Mikroskop atomových sil



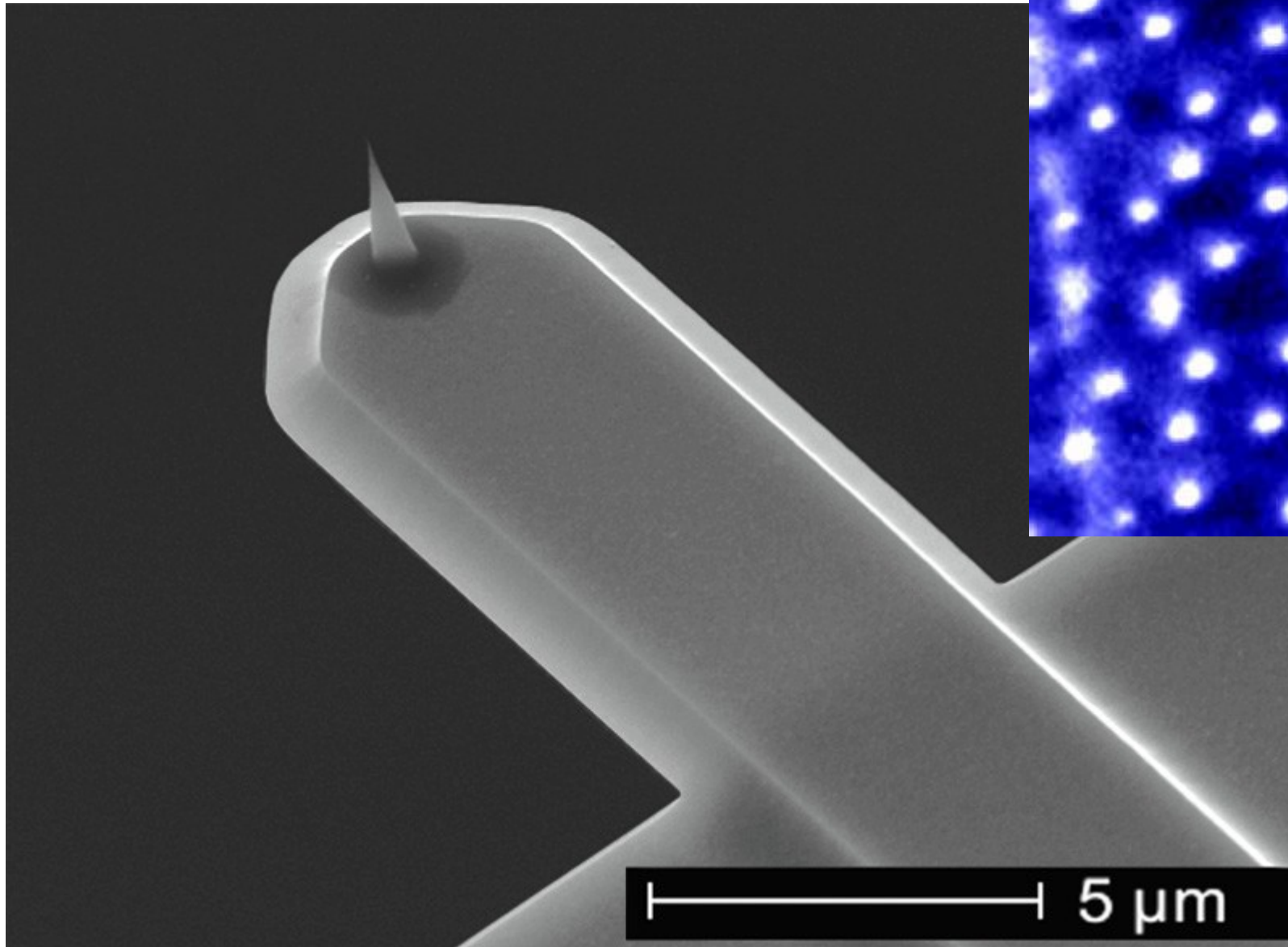
Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Mikroskop atomových sil



Atomová fyzika a elektronová struktura látek

Mikroskop atomových sil



Atomová fyzika a elektronová struktura látek

	TEM	SEM	STM	AFM	MFM
rozlišení	~ 1 nm	~ 10nm - 1 μ m	~ Å+	~ Å	



rychlé, můžeme pozorovat větší objekty, časový vývoj



pomalejší



vzorek v kapalině (AFM) - biologie



magnetický stav

rozdílné sondy → různé pohledy na tentýž objekt !!

difrakce (LEED, synchrotron,)



rozlišení > 0.1 Å

