

Úvod do fyziky pevných látek a nanostruktur

Přehled probrané látky 2021/22

1. Krystalová struktura

Krystalická látka, ideální krystal, mřížka, báze, translační vektory, elementární a primitivní buňka, konstrukce primitivní buňky. Operace a prvky symetrie, bodové grupy, příklady. Prostorové grupy, klasifikace mřížek, krystalové soustavy. Indexy krystalových rovin a směrů, mezirovinné vzdálenosti. Příklady krystalové struktury prvků.

2. Vazby v krystalech

Podstata sil v krystalech, typy odpudivých a přitažlivých sil, dosah sil. Mezimolekulární potenciály. Typy vazeb v krystalech, porovnání dosahu a síly vazby. Charakteristiky jednotlivých typů vazeb, základní teoretické úvahy a jednoduché výpočty celkových energií krystalu, zejména pro vazbu inertních plynů a iontovou vazbu krystalů solí. Atomové poloměry.

3. Difrakce na krystalu a reciproká mřížka

Možnosti určování struktury krystalů a možnosti interakcí krystalů s vlnami a částicemi. Braggův zákon, interferenční maxima a minima. Reciproká mřížka. Experimentální určení struktury krystalů, základní difrakční metody, difraktogramy a přiřazení struktury. Brillouinova zóna a její konstrukce, příklady zón pro různé krystalové soustavy. Alternativní definice Brillouinovy zóny – Ewaldova konstrukce.

4. Pevné látky z pohledu kvantové mechaniky

Stav, vlnová funkce, její interpretace, Schrödingerova rovnice. Vybrané základní problémy kvantové mechaniky – základní kvantové rysy výsledků: volná částice, částice v jednorozměrné a trojrozměrné potenciálové jámě nekonečné hloubky, jáma konečné hloubky, lineární a izotropní 3D harmonický oscilátor, Schrödingerova teorie atomu vodíku. Schrödingerova rovnice pro pevnou látku a aproximace jejího řešení: Bornova-Oppenheimerova aproximace, jednoelektronová aproximace (středního pole).

5. Kovy – model volného elektronu

Klasický model vodivosti elektronů, připomenutí základů kinetické teorie plynů. Kvantově-mechanický model volných elektronů v kovech – energie elektronových stavů v jednom rozměru, Fermiho-Diracovo rozdělení. Zobecnění – 3D model, vlnový vektor, rovinné vlny, Fermiho koule, hustota stavů. Úspěchy a selhání modelu elektronového plynu.

6. Pásová struktura pevných látek

Idea energetických pásů – od atomu k mnohaelektronovým systémům. Periodický potenciál a stacionární Schrödingerova rovnice pro elektron. Blochův teorém. Náznak řešení Schrödingerovy rovnice pro elektron v periodickém potenciálu. Pásové energetické spektrum, základní pojmy. Příklady pásové struktury pro izolanty, polovodiče a kovy, hustota stavů. Příklady metod výpočtů pásové struktury – Kronigův-Penneyův model, metoda těsné vazby, metoda funkcionálu hustoty.

7. Elektronické vlastnosti pevných látek

Vodivost kovů, experimentální odpor kovů, konstrukce Fermiho ploch. Možnosti experimentálního měření pásové struktury. Typická konduktivita a rezistivita polovodičů a izolantů, pásová struktura polovodičů, přímý a nepřímý polovodič, principy vodivosti u polovodičů, příměsová vodivost.

8. Optické vlastnosti pevných látek

Přístupy k popisu optických vlastností, připomenutá Maxwellových rovnic, materiálové vztahy a dělení látek pomocí nich. Telegrafní rovnice, monochromatická vlna, vztah elektrického a magnetického pole, optické konstanty a komplexní veličiny. Reflexe na kovech – model elektronového kovu, řešení pohybu elektronu v jednom směru, plazmová frekvence, úplný odraz, plazmon, shrnutí optických vlastností kovů. Reflexe na mřížce izolantu, interakce mřížkové vibrace (fonon) a elektromagnetického záření (foton), polariton, shrnutí optických vlastností izolantů. Excitace elektronu a optická absorpce, pravděpodobnost přechodu při vertikální excitaci elektronu, představa mezipásových přechodů, sdružená hustota stavů. Vliv excitonu na absorpci, vodíkový model excitonu, Mottův-Wannierův a Frenkelův exciton, příklady.

9. Fonony – kmity mřížky

Popis dynamiky mřížky, rozvoj potenciálu kolem minima, harmonický potenciál, silové konstanty, normální módy, fonon. Kmity mřížky stejných atomů, 1D mřížka, rychlost zvuku, šíření vlnoplochy a rychlost toku energie, příklady disperzních vztahů, podélné a příčné módy pro homogenní 1D řetězky. Kmity mřížky různých atomů, akustický a optický mód. Hustota vibračních módů, periodické okrajové podmínky pro kmity mřížky. Příklady kmitů 3D mřížek – disperzní závislosti. Fonony a jejich interpretace. Tepelná kapacita a vnitřní energie, Einsteinův a Debyův model, anharmonické efekty.

10. Magnetické vlastnosti pevných látek

Původ magnetismu – magnetický dipólový moment, magnetizace, magnetický dipólový moment částice. Odezva látky na vnější magnetické pole – klasifikace látek podle chování v mg. poli, diamagnetické, paramagnetické, feromagnetické, antiferomagnetické a ferimagnetické látky, hystereze, Curieho teplota, měkké a tvrdé feromagnetické látky, příklady permanentních magnetů.

11. Nanostruktury

Trocha nano-historie, definice a vlastnosti materiálů, příprava, stabilita a vlastnosti grafenu a jeho derivátů, 2D binární sloučeniny prvků III.-V. skupiny a IV. skupiny, dichalkogenidy přechodných kovů, karbidy a nitridy přechodných kovů. Elektronická struktura 1D systémů, uhlíkové nanotrubičky a jejich vlastnosti. Elektronická struktura 0D systémů, kovové nanočástice. Zobrazovací techniky pro nanostruktury.

12. Poruchy v krystalech a mechanické vlastnosti

Poruchy v krystalech – bodové poruchy v kovalentních, iontových a 2D krystalech, čárové a rovinné poruchy. Mechanické vlastnosti – napětí, relativní prodloužení, tenzor malé deformace, Hookův zákon, Youngův modul pružnosti, křivka deformace, Poissonovo číslo, modul pružnosti ve smyku, elastické konstanty, příklady mechanických vlastností materiálů.

13. Povrchy, adsorpce a rozhraní

Rekonstrukce a relaxace povrchu, krystalografie povrchu, ionizační potenciál, povrchová energie. Smáčivost, adsorpce na površích, fyzisorpce a chemisorpce. PN přechod, stav rovnováhy a přiložené napětí, heterostruktury.