

# SLO/UFPL - Úvod do fyziky pevných látek

Jan Soubusta, Ph.D.

Společná laboratoř optiky UP a Fyzikálního ústavu AV ČR

## Sylabus přednášky

1. Historický vývoj pohledu na strukturu pevné látky  
Vývoj znalostí o struktuře pevné látky od antiky, elementární částice, elektron, proton neutron, systém jader a valenčních elektronů. Mendělejevova periodická tabulka prvků. Významní fyzikové zapojení v této oblasti, nositelé Nobelovy ceny (Thomson, Rutherford, Einstein, Planck, de Broglie, Heisenberg, Born, Schrödinger).
2. Atomární elektronová struktura  
Bohrův model klasicky, tři kvantovací podmínky pro popis stability atomu vodíku. Bohrův poloměr pro kvantování polohy elektronu, Rydbergova konstanta pro kvantování energie. Coulombický potenciál atomu vodíku, vlnová funkce  $1s$  stavu, výpočet střední vzdálenosti elektronu od protonu v tomto stavu. Popis atomárních vlnových funkcí, kvantová čísla: hlavní, vedlejší, magnetické, spin. Pauliho princip. Obsazovací diagramy pro elektronové stavy atomů podle periodické tabulky.
3. Prostorové uspořádání krystalu  
Krystalový potenciál, popis elementární a primitivní buňky krystalu. Popis translační a bodové symetrie, komutátor hamiltoniánu s prvky symetrie. Translační vektory  $\vec{a}$  a jejich lineární kombinace, mřížkové translace  $\vec{T}$ , objem elementární buňky. Určování směrů a rovin v krystalu, Millerovy indexy, výpočet směrů pro označení substrátu křemíku.
4. Krystalografie  
Typické krystalové struktury kovů, solí a polovodičů. Popis atomární báze v elementární buňce. Typické výpočty geometrických parametrů, zaplnění prostoru v modelu tuhých koulí. Popis prvků symetrie krychle.
5. Grupa prvků bodové symetrie elementární buňky  
Základní definice grupy, prvky bodové grupy symetrie, vlastní a nevlastní rotace, identita, zrcadlení a inverze. Řád grupy daného krystalu nebo molekuly, popis pomocí multiplikativní tabulky. Třídy sdružených prvků grupy, tři vlastnosti prvků třídy. Tři typy grup prostorového uspořádání krystalů.
6. Reprezentace  
Reprezentace grupy pomocí čtvercových matice, dimenze reprezentace. Reducibilní a ireducibilní reprezentace, charaktery operací symetrie, rozklad na ireducibilní reprezentace. Třídy prvků symetrie, tabulka charakterů. Šest vět popisujících vlastnosti charakterů ireducibilních reprezentací. Millikenova domluva o značení neekvivalentních ireducibilních reprezentací.
7. Využití symetrie na kvantově-mechanické výpočty  
Komutace prvků symetrie s hamiltoniálem, úplný systém vlastních funkcí. Degenerace energetických hladin. Báze funkcí, které se transformují pomocí prvků grupy operací symetrie. Báze vytvořená z atomárních orbitalů např. pro molekulu  $H_2O$ , odpovídající reducibilní reprezentaci a rozpis na direktní součet ireducibilních reprezentací. Využití symetrie na výpočet kvantově-mechanických integrálů, převod direktního součinu vlnových funkcí a operátoru hledané veličiny na direktní součet.
8. Difrakce na krystalu  
Popis difrakce na krystalu s využitím tří různých částic: foton, neutron, elektron. Difrakční integrál, Fourierova transformace hustoty elektronů, zavedení vektorů  $\vec{b}$  a jejich lineární kombinace  $\vec{G}$ . Tři difrakční podmínky: Bragg, Brillouin, Laue a jejich vzájemná provázanost. Tři difrakční metody a jejich princip.
9. Reciproká mřížka, Brillouinovy zóny  
Popis vektoru  $\vec{G}$  kolmého na odpovídající rovinu (hkl) jako prostorové frekvence, výpočet vzdálenosti rovin v krystalu. Vzájemné vztahy mezi vektory  $\vec{a}$  a  $\vec{b}$ . Ewaldova konstrukce např. pro Laueho metodu difrakce. Nejbližší sousedi v reciprokém prostoru, zavedení Brillouinových zón a jejich symetrie. Brillouinovy zóny v 1D, 2D a typických kubických mřížkách ve 3D. Objem Brillouinovy zóny.
10. Báze atomů  
Fourierova analýza báze atomů. Souvislost amplitudy difrakce s Fourierovým obrazem hustoty elektronů a strukturním faktorem báze. Výběrová pravidla pro vymizení některých difrakčních maxim. Závislost intenzity

difrakce na teplotě a na indexu difrakce (hkl). Vypočet integrálu rozptylu na atomární vlnové funkci 1s orbitalu. Prášková metoda difrakce na krystalu india.

11. Výpočet elektronové struktury krystalu

Hamiltonián celé soustavy částic a jeho zjednodušení: valenční a vnitřní elektrony, Bornova-Oppenheimerova (adiabatická aproximace), aproximace středního pole (jedno-elektronová aproximace). Blochův tvar vlnové funkce pro elektron, jako vlastní stav v periodickém potenciálu. Vlnový vektor jako kvantové číslo Blochova elektronu. Vztah k řešení pro volný elektron a k atomárním orbitalům. Přepis jedno-elektronové Schrödingerovy rovnice pro periodickou část Blochovy vlnové funkce a její důsledky. Zakreslení energetické závislosti  $E(\vec{k})$  pro elektrony do první Brillouinovy zóny.

## Literatura

Literatura základní:

1. C. Kittel, *Úvod do fyziky pevných látek* - český překlad, ACADEMIA Praha, 1985.
2. C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, Wiley, 2004.
3. R.F. Pierret, *Advanced Semiconductor Fundamentals*, Prentice Hall, 2002.
4. M. Razeghi, *Fundamentals of Solid State Engineering*, Springer, 2009.
5. M. De Graef, M.E. McHenry, *Structure of Materials: An Introduction to Crystallography, Diffraction and Symmetry*, Cambridge University Press, 2007.
6. Popis symetrie a grupová teorie viz aktualizované přednášky vyučujícího.