

Elektronová mikroskopie: SEM/EDX

(rozšíření k přednášce SEM)

(ukázka bezprostřední souvislosti mezi EDX a strukturou atomů)

Miroslav Šlouf

Oddělení morfologie polymerů

Ústav makromolekulární chemie AV ČR, v.v.i.

- | | | | |
|-----|--|--|--|
| [1] | SEM/EDX: Schrödingerova rovnice pro elektron v kostce. | | |
| [2] | SEM/EDX: Schr. rovnice pro elektrony v atomu a EDX-přechody. | | |
| [3] | SEM/EDX: zadání domácích úkolů. | | |

Mikroskopické příklady a výpočty. Domácí úkoly = DÚ.

1

[SEM/EDX] Elektron v kubickém krystalu.

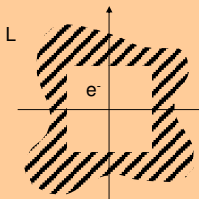
Schrödingerova rovnice #1: jednoduchý model - elektron uzavřený v krychli.

Realita:

- elektron se nachází v kubickém monokrystalu kovu o hraně L

Model:

- elektron se pohybuje v krychli hraně L
- uvnitř krychle se pohybuje zcela volně $\Rightarrow E_p = V = 0$
- vně krychle se vůbec nemůže dostat $\Rightarrow E_p = V = +\infty$



Co chceme udělat?

- Kompletně popsat tento jednoduchý modelový systém.
- Tj. zjistit, kde se elektron nachází a jakou při tom má energii.

Jak to můžeme udělat?

- Sestavíme a vyřešíme Schrödingerovu rovnici $H\Psi = E\Psi$, čímž získáme:
- vlastní funkce Ψ : $|\Psi|^2 \approx$ pravděpodobnost výskytu elektronu v daném místě
- vlastní hodnoty E: udávají přímo možné energie elnu v daném systému a stavu

Kde vzít řešení a co si z něj zapamatovat?

- řešení: [www stránky přednášek](#), odkaz [elektron v kostce]
- co si pamatovat: 1) obecný postup sestavení a řešení Schr. rovnice
2) eln může mít jen určité energie - energie je kvantovaná

2

[SEM/EDX] Elektron v atomu.

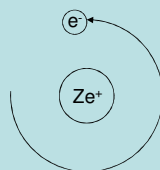
Schrödingerova rovnice #2: složitější model - elektronové hladiny a přechody v EDX.

Realita:

- elektron se nachází v okolí atomového jádra s nábojem Z

Model:

- *nehybné jádro* atomu s nábojem Ze^+
- kolem něj se pohybuje *jediný elektron* s nábojem e^-
- (při řešení zavedeme ještě řadu dalších zjednodušení)



Co chceme udělat?

- Kompletně popsat tento jednoduchý modelový systém.
- Tj. zjistit, kde se elektron nachází a jakou při tom má energii.

Jak to můžeme udělat?

- Sestavíme a vyřešíme Schrödingerovu rovnici $H\Psi = E\Psi$, čímž získáme:
- vlastní funkce Ψ = zde: atomové orbitály (místa, kde se elektron může nacházet)
- vlastní hodnoty E = zde: energie atomových orbitalů (energie elektronu v daných AO)

Kde vzít řešení a co si z něj zapamatovat?

- řešení: viz [www stránky přednášek](#), odkaz [elektron v atomu]
- co si pamatovat: 1) energie elnu v jednoelektronovém atomu: $E(n) = -\text{konst} \cdot Z^2/n^2$
2) výsledky EDX experimentů přímo souvisí se strukturou atomů

3

[SEM/EDX] domácí úkoly.

DÚ #1

Doplňkové otázky k odvození Schrödingerovy rovnice.

- Energie elektronu v krychli je kvantovaná:
 - jaký to má matematický důvod?
 - jaký to má fyzikální důsledek?
- Při odvozování Sch. rovnice pro elektron v atomu jsme použili řadu aproximací.
 - sepište seznam všech aproximací.
 - která z aproximací nám z matematického hlediska nejvíc ulehčila život?

DÚ #2

Doplňkové otázky k energiím EDX přechodů.

- Vypočítejte energie přechodů $K\alpha$ a $L\alpha$ pro měď.
 - v prvním přiblížení použijte základní vztah: $E(n) = -\text{konst} \cdot Z^2/n^2$
 - ve druhém přiblížení použijte Moseleyho zákony: (místo Z použijte Z_{ef})
 - porovnejte vypočtené hodnoty s tabelovanými (tabulka z [www.edax.com](#))

4