FX001 Fyzikální vlastnosti materiálů – příklady do cvičení
Verze 4. ledna 2017

Ke stažení na www.physics.muni.cz/˜caha/vyuka.html.

1 Chemická vazba, elastické a tepelné vlastnosti

1.1 Van der Waalsova vazba v krystalech vzácných plynů

Určete rovnovážnou vzdálenost nejbližších sousedů, kohezní energii a objemový modul pružnosti v krystalech vzácných plynů. Meziatomový potenciál se dobře aproximuje Lennard-Jonesovým potenciálem ve tvaru

$$U(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^{6} \right].$$

Vzácné plyny krystalizují v kubické plošně centrované mřížce (fcc). Parametry potenciálu jsou uvedeny v následující tabulce:

prvek	ϵ (meV)	σ (Å)
Ne	3.12	2.74
Ar	10.4	3.40
Kr	14.0	3.65
Xe	19.9	3.98

1.2 *Madelungova konstanta lineárního řetízku[1]

Určete Madelungovu konstantu α jednorozměrného iontového krystalu. V lineárním řetízku se střídají kladně a záporně nabité ionty a vzdálenost sousedních iontů je R.

1.3 Kohezní energie iontového krystalu

Vypočtěte kohezní energii krystalického KCl ve struktuře NaCl, CsCl a ve struktuře ZnS. Určete, která krystalická struktura je pro KCl stabilní. Odpudivou interakci nejbližších sousedů předpokládejte ve tvaru

$$u_{\mathrm{odp}}(R_{ij}) = \lambda \mathrm{e}^{-R_{ij}/\rho},$$

kde $\rho = 0.326$ Å a $\lambda = 2.13 \times 10^3$ eV. Mezi všemi atomy pak dále působí elektrostatická interakce

$$u_{\mathrm{elst}}(R_{ij}) = \pm \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R_{ij}}.$$

Madelungova konstanta struktury NaCl je $\alpha_{\mathrm{NaCl}} = 1{,}747565$, CsCl je $\alpha_{\mathrm{CsCl}} = 1{,}762675$ a struktury ZnS je $\alpha_{\mathrm{ZnS}} = 1{,}6381$.

[1] Náročnější a doplňující úlohy nebo jejich části jsou označeny *. Tyto úlohy se obvykle neřeší na cvičeních

1.4 Kohezní energie a skupenská tepla wolframu

Odhadněte kohezní energii wolframu, jestliže znáte následující vlastnosti: teplota tání $t_t = 3380\,°C$, teplota varu $t_v = 5530\,°C$, skupenské teplo tání $Q_t = 35.2\,\mathrm{kJ/mol}$, skupenské teplo vypařování $Q_v = 799\,\mathrm{kJ/mol}$.

1.5 Tenká pseudomorfní vrstva InAs na GaAs (001)

Spočtěte mřížový parametr ve směru kolmo na povrch vrstvy InAs vrstvy deponované na monokrystalické podložce GaAs, jestliže jde o tzv. pseudomorfní vrstvu. Krystalová mříž pseudomorfní vrstvy je stlačena v obou směrech v rovině povrchu tak, aby mřížový parametr v rovině povrchu odpovídal mřížovému parametru substrátu. Jaký tlak působí na InAs vrstvu v rovinách kolmých na povrch a jaká je hustota elastické energie v takové pseudomorfní vrstvě?

Elasticita kontinua: Mřížový parametr GaAs je $a_{\mathrm{GaAs}} = 5.6533$ Å, InAs $a_{\mathrm{InAs}} = 6.0583$ Å, elastické konstanty InAs $C_{11} = 8{,}34 \times 10^{10}\,\mathrm{N/m^2}$, $C_{12} = 4{,}54 \times 10^{10}\,\mathrm{N/m^2}$, $C_{44} = 3{,}95 \times 10^{10}\,\mathrm{N/m^2}$.

1.6 Teplotní roztažnost anharmonického potenciálu

Určete střední vzdálenost mezi atomy v závislosti na teplotě je-li meziatomový potenciál aproximován v okolí minima Taylorovým rozvojem do třetího řádu:

$$U(x) = U_0 + cx^2 - gx^3,$$

kde $x = R - R_0$ je rozdíl meziatomové vzdálenosti od rovnovážné polohy. Pravděpodobnostní rozdělení meziatomových vzdáleností předpokládejte Boltzmannovo.

1.7 Tepelná kapacita volných elektronů

Pro trojrozměrný plyn volných elektronů najděte:

1. souvislost k_F a $\mathcal{E}_F$ a hustoty elektronů n (počet elektronů na jednotku délky, plochy resp. objemu)
2. energiovou hustotu stavů $g(E)$

Pozn.: Vzájemnou konzistentnost výsledků je možné ověřit vztahem $\int_0^{\mathcal{E}_F} g(E)\,\mathrm{d}E = n$.

Poté pomocí Betheho-Sommerfeldova rozvoje

$$\int_0^\infty H(E) f_{FD}(E)\,\mathrm{d}E = \int_0^\mu H(E)\,\mathrm{d}E + \frac{\pi^2}{6}(k_B T)^2 H'(\mu) + \mathcal{O}\left[\left(\frac{k_B T}{\mu}\right)^4\right],$$

kde $f_{FD}(E) = \frac{1}{1+\mathrm{e}^{(E-\mu)/kT}}$ a $H(E)$ je hladká funkce, určete teplotní závislost chemického potenciálu $\mu(T)$, střední hodnoty hustoty energie $u(T)$ a tepelnou kapacitu 3D elektronového plynu. Předpokládejte přitom, že v uvažovaném intervalu teplot je $T/T_F \ll 1$ a stačí tedy vzít pouze první člen Betheho-Sommerfeldova rozvoje.

1.8 Číselné odhady tepelné kapacity

S využitím předchozích výsledků spočtěte Fermiho mez k_F, Fermiho energii $\mathcal{E}_F$, Fermiho rychlost v_F, Fermiho teplotu T_F, střední energii elektronu $\langle E\rangle$ a hustotu energie u v elektronovém plynu s hustotou odpovídající stříbru ($n = 5.85 \cdot 10^{28}\,\mathrm{m^{-3}}$) při teplotě 0 K.

Určete tepelnou kapacitu elektronového plynu při pokojové teplotě a porovnejte s tabulkovou hodnotou pro stříbro $c_{pAg} = 235\,\mathrm{J.kg^{-1}.K^{-1}}$.

Experimentálně zjištěná tepelná kapacita kovů pro nízké teploty splňuje vztah

$$\frac{C_v}{V_{\mathrm{mol}}} = \gamma T.$$

Vypočtěte koeficient γ následujících kovů a srovnejte s tabulkovou hodnotou.

	a [Å]	γ [mJ/mol.K]
Cu	3,61	0,695
Ag	4,09	0,646
Au	4,08	0,729

Předpokládejte jeden vodivostní elektron na atom. Všechny tyto kovy mají strukturu kubickou plošně centrovanou (fcc). Pomůcka: $\left(\frac{\pi}{12}\right)^{2/3} \frac{k^2 mN}{\hbar^2} = 3.848 \times 10^{15}\,\mathrm{Jmol^{-1}K^{-1}m^{-2}}$.

1.9 Fononová tepelná kapacita 3D mřížky v Debyeově modelu

Uvažujme o jednoduché trojrozměrné kubické mřížce s jedním atomem v primitivní buňce, jejíž fononová disperzní relace odpovídá Debyově modelu

$$\omega = ck, \text{ pro } \omega < \omega_D$$

kde c je rychlost zvuku v materiálu. Najděte vztah mezi Debyeovou frekvencí ω_D a mřížovým parametrem. Odvoďte teplotní závislost specifického tepla při velmi nízkých teplotách a dokažte, že při vysokých teplotách skupenské teplo splňuje Dulongovo-Petitovo pravidlo.

Pomůcka:

$$\int_0^\infty \mathrm{d}x \frac{x^3}{\mathrm{e}^x - 1} = \frac{\pi^4}{15}$$

1.10 *Fononová tepelná kapacita jednoduché 1D, 2D mřížky

Uvažujme o jednoduché jednorozměrné resp. dvourozměrné mřížce s jedním atomem v primitivní buňce, pro jejíž transverzální kmity platí pohybové rovnice

$$m\ddot{u}_i = K(u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1}) \qquad \text{(1D)}$$

$$m\ddot{u}_{ij} = K(u_{i-1,j} + u_{i+1,j} + u_{i,j-1} + u_{i,j+1} - 4u_{ij}) \qquad \text{(2D)}$$

Najděte disperzní relace kmitů mřížky a teplotní závislost jejího specifického tepla při velmi nízkých teplotách.

Pomůcka:

$$\int_0^\infty \mathrm{d}x \frac{x}{\mathrm{e}^x - 1} = \frac{\pi^2}{6}, \quad \int_0^\infty \mathrm{d}x \frac{x^2}{\mathrm{e}^x - 1} = 2\zeta(3) \approx 2 \times 1.202\ldots$$

1.11 Tepelná vodivost elektronového plynu

Tok tepelné energie v materiálu, kde předpokládáme tepelný gradient ve směru osy z, je dán vztahem

$$j_E = \frac{1}{3} l \langle v \rangle \frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}z},$$

kde l je střední volná dráha, $\langle v \rangle$ střední driftová rychlost a u je hustota vnitřní energie. Gradient $\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}z}$ můžeme napsat ve tvaru

$$\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}z} = \frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}T}\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}z} = c_V \frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}z},$$

kde c_V je tepelná kapacita elektronového plynu. Dosaďte do předchozích vztahů vztahy získané pro elektronový plyn a odvoďte Wiedemannův-Franzův zákon

$$\frac{\lambda}{\sigma T} = \frac{\pi^2}{3}\left(\frac{k}{e}\right)^2 = 2{,}45 \times 10^{-8}\,\mathrm{W\Omega K^{-2}}.$$

Výsledek porovnejte s tabulkovými hodnotami pro reálné kovy.

kov	L (10^{-8}WΩ.deg^{-2})		kov	L (10^{-8}WΩ.deg^{-2})	
	při 0°C	při 100°C		při 0°C	při 100°C
Ag	2.31	2.37	Pb	2.47	2.56
Au	2.35	2.40	Pt	2.51	2.60
Cd	2.42	2.43	Sn	2.52	2.49
Cu	2.23	2.33	W	3.04	3.20
Mo	2.61	2.79	Zn	2.31	2.33

2 Elektrické vlastnosti pevných látek

2.1 Elektrická vodivost kovů

A. Jouleho teplo

V Drudeho modelu je pravděpodobnost toho, že doba mezi dvěma následujícími srážkami libovolného elektronu je v intervalu $(t, t + \mathrm{d}t)$, $\mathrm{e}^{-t/\tau}\mathrm{d}t/\tau$. Kus kovu se nachází v homogenním elektrostatickém poli $\boldsymbol{E}$, teplota kovu je konstantní. Vyberme libovolný elektron z elektronového plynu a předpokládejme, že tento elektron vykonal srážku v čase $t = 0$ a další srážku v čase t.

1. Dokažte, že střední energie předaná elektronem při druhé uvažované srážce je $(eEt)^2/2m$.
2. Dokažte, že střední energie předaná elektronem při libovolné srážce je $(eE\tau)^2/m$.
3. Nechť má kus kovu tvar válce s plochou podstavy S a výškou L a nechť je intenzita elektrického pole $\boldsymbol{E}$ rovnoběžná s výškou válce. Najděte tepelný výkon generovaný při průchodu proudu a ověřte, že platí $P = RI^2$.

B. Numerické výsledky

1. Vypočtěte hustotu volných elektronů v mědi, je-li její hustota $\rho_{\mathrm{Cu}} = 8960\,\mathrm{kg\,m^{-3}}$ a relativní atomová hmotnost 63.5.
2. Měděným vodičem s příčným průřezem $0.2\,\mathrm{cm}^2$ prochází proud 1 A. Jaká je střední driftová rychlost elektronů?
3. Specifická elektrická vodivost mědi je $\sigma = 6 \cdot 10^7\,\Omega^{-1}\,\mathrm{m}^{-1}$. Určete relaxační dobu elektronu.
4. Vypočtěte pohyblivost elektronů v sodíku, je–li jeho specifická vodivost $\sigma = 0.23 \cdot 10^8\,\Omega^{-1}\,\mathrm{m}^{-1}$ a koncentrace nositelů náboje $2.652 \cdot 10^{28}\,\mathrm{m}^{-3}$.
5. Určete střední volnou dráhu vodivostních elektronů v sodíku při pokojové teplotě.

2.2 Teplotní závislost měrného odporu kovů

Pro většinu nemagnetických kovů můžeme teplotní závislost měrného odporu popsat pomocí Mathiessenova pravidla

$$\rho(T) = \rho_0 + \rho_1(T),$$

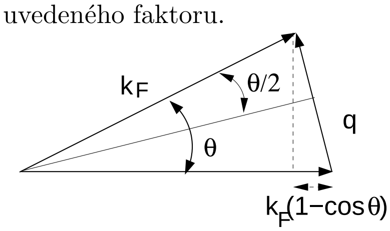
kde ρ_0 je teplotně nezávislý příspěvek rozptylu na příměsích a defektech krystalové mříže a $\rho_1(T)$ příspěvek rozptylu na tepelných kmitech mříže. Předpokládejte, že kmity mříže můžete popsat Debyeovým modelem ($\omega = cq$, kde c je rychlost zvuku, maximální frekvence fononů je $\omega_D = cq_D$).

Spočtěte teplotní závislost měrného odporu za předpokladu, že měrný odpor je přímo úměrný celkové koncentraci fononů n. Výpočet proveďte v limitě pro nízké ($kT \ll \hbar\omega_D$) a pro vysoké teploty ($kT \gg \hbar\omega_D$).

Předchozí výsledek neodpovídá experimentálně zjištěné závislosti pro nízké teploty. Oprava spočívá v započtení faktu, že fonony o nízké frekvenci mohou změnit směr pohybu elektronu jen o relativně malý úhel θ a k odporu přispějí faktorem řádu

$$(1 - \cos\theta) = 2\sin^2\theta/2 = 2\left(\frac{q}{2k_F}\right)^2,$$

kde k_F je Fermiho vlnový vektor vodivostních elektronů a q vlnový vektor fononů (viz obrázek). Zopakujte předchozí výpočet se započtením výše uvedeného faktoru.



2.3 Příměsový stav v polovodičích

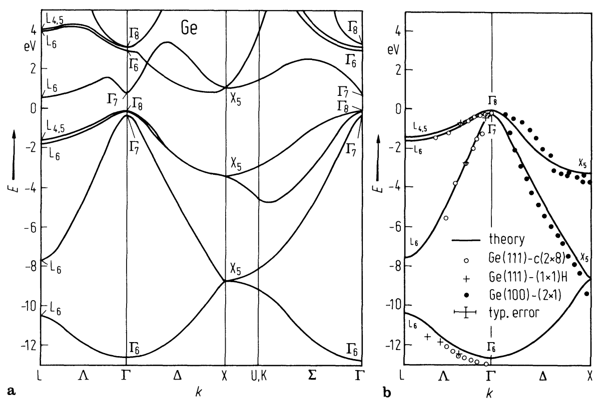
Polovodič InSb má zakázaný pás o šířce $E_g = 0.23\,\mathrm{eV}$, statickou permitivitu $\varepsilon = 18$ a efektivní hmotnost elektronů $m_{ef} = 0.15\, m_e$. Vypočtěte ionizační energii donoru, poloměr dráhy odpovídající základnímu stavu a minimální koncentraci donorů, při níž se začíná projevovat překrývání elektronových drah sousedních příměsových atomů (vzniká příměsový pás).

2.4 *Statistika nositelů náboje v polovodiči typu N

V polovodiči je 10^{13} donorů v cm^3, které mají ionizační energii $E_D = 1\,\mathrm{meV}$ a efektivní hmotnost $m_{ef} = 0.01\,m_e$. Žádné akceptorové atomy nejsou přítomny a polovodič je nedegenerovaný, tj. $E_g \gg k_B T$. Odhadněte koncentraci vodivostních elektronů při $T = 4\,\mathrm{K}$ a hodnotu Hallovy konstanty.

2.5 Intrinsický polovodič

Germanium má nepřímý zakázaný pás o šířce 0.67 eV. Ve vodivostním pásu je osm L minim ve tvaru rotačních elipsoidů s efektivními hmotnostmi $m_T = 1.6\,m_e$ a $m_L = 0.08\,m_e$. Maximum valenčního pásu se nachází v bodě Γ a vybíhají z něj dvakrát degenerovaný pás těžkých děr s izotropní efektivní hmotností $0.28\,m_e$ a dvakrát degenerovaný pás lehkých děr s izotropní efektivní hmotností $0.044 m_e$. Vypočtěte intrinsickou koncentraci nositelů náboje při teplotě 300 K.



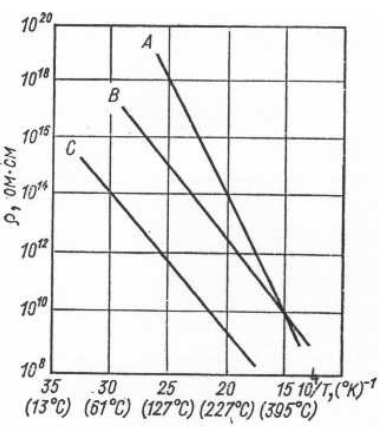
Pásová struktura germania podle článku Wachs, A. L., Miller, T., Hsieh, T. C., Shapiro, A. P., Chiang. T. C.: Phys. Rev. B 32 (1985) 2326

2.6 Aktivační energie vodivosti SiO_2

Měrná vodivost izolátorů závisí na teplotě podle Arrheniova vztahu:

$$\sigma = s\mathrm{e}^{-\epsilon/kT},$$

kde ϵ je aktivační energie. Určete aktivační energii vodivosti křemene podle dat z následujícího obrázku.



Závislost měrného odporu SiO_2 na převrácené hodnotě teploty. Legenda: na ose x je $10^4/T$ (K), na ose y je měrný odpor v Ωcm. A – křemenné sklo, B – křemen, vodivost kolmo na hlavní osu krystalu, C – křemen, vodivost podél hlavní osy krystalu.

2.7 Elektrická vodivost legovaného germania

Germaniový ingot vznikl roztavením 100 g germania a $3{,}22 \times 10^{-6}$ g antimonu. Spočtěte stejnosměrnou elektrickou vodivost ingotu (atomová hmotnost germania je 72,60, antimonu 121,76, hustota germania je $5{,}46\,\mathrm{g \cdot cm^{-3}}$, pohyblivost elektronů v germaniu je $3600\,\mathrm{cm^2/V \cdot s}$). Jak se změní stejnosměrná vodivost, jestliže do ingotu přidáme navíc k antimonu $0{,}78 \times 10^{-6}$ g galia? Atomová hmotnost galia je 69,72 a pohyblivost děr $1700\,\mathrm{cm^2/V \cdot s}$.

2.8 Difuzní potenciál PN přechodu

Křemíkový pn přechod o ploše $1\,\mathrm{cm}^2$ se skládá z n-oblasti s 10^{17} donorů/cm^3 p-oblasti s $2{\times}10^{17}$ akceptorů/cm^3. Předpokládejte plnou ionizaci dopantů. Určete difuzní potenciál na pn přechodu za pokojové teploty, teploty kapalného dusíku (77 K), 100 °C a 200 °C.

2.9 Šířka ochuzené vrstvy a kapacita strmého PN přechodu

Uvažujte strmý PN přechod o ploše $10^{-4}\,\mathrm{cm}^2$ v křemíku s n-oblastí s $5{\times}10^{17}$ donorů/cm^3 p-oblasti s $3{\times}10^{14}$ akceptorů-cm^3. Vypočtěte šířku ochuzené vrstvy v PN přechodu, maximální elektrické pole v ochuzené vrstvě a kapacitu bez přiloženého vnějšího elektrického napětí. Relativní permitivita křemíku je 11.7.

2.10 Polarizovatelnost atomu vodíku

a) Klasický výpočet
Uvažte klasický model popisující základní stav atomu vodíku v elektrickém poli kolmém na rovinu orbity. Ukažte, že v tomto modelu je polarizovatelnost rovna $\alpha = a^3$ (cgs) $= 4\pi\varepsilon_0 a^3$ (SI), kde a je poloměr neporušené orbity.
***b) Kvantový výpočet**
Uvažme základní stav atomu vodíku s elektronovou vlnovou funkcí $\psi_0(\boldsymbol{r}) \sim \exp(-r/a_0)$. Atom vodíku vložíme do homogenního elektrického pole ve směru z. Hledejte novou vlnovou funkci elektronu ve tvaru $\psi = \psi_0(1+\gamma z) = \psi_0 + \delta\psi$ a určete γ z minima energie. Ze známé hodnoty γ určete dipólový moment atomu vodíku ze vztahu

$$p = \int \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\,(-e)z(\psi_0\delta\psi^* + \psi_0^*\delta\psi)$$

a ukažte, že jeho polarizovatelnost je rovna $\alpha = 4a_0^3$ (cgs) $= 16\pi\varepsilon_0 a_0^3$ (SI).

2.11 Orientační polarizace

Uvažujme o dielektriku, jehož molekuly mají permanentní dipólový moment p, vložené do vnějšího homogenního elektrického pole. Najděte vztah pro pravděpodobnost, že daný dipól svírá úhel θ se směrem pole za dané teploty T. Z této pravděpodobnosti odvoďte vztah pro teplotní závislost polarizace dielektrika a jeho limitní tvar pro vysoké teploty (nebo slabá pole).

2.12 *Lineární feroelektrický řetízek

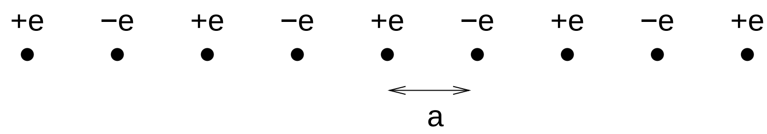
Předpokládejte lineární řetízek atomů o polarizovatelnosti α a vzdáleností sousedů a. Ukažte, že řetízek může být spontánně polarizován pokud $\alpha \geq 4\pi\varepsilon_0 a^3/(4\zeta(3))$, kde $\zeta(3) = \sum_{n=1}^{\infty} n^{-3} \approx 1,202\ldots$.

2.13 Měkký fononový mód

Uvažte lineární řetězec složený z iontů stejné hmotnosti, ale střídajícího se náboje $\pm e$. Meziatomový potenciál se skládá z krátkodosahové interakce se silovou konstantou C a z elektrostatické (dalekodosahové) interakce. Ukažte, že elektrostatickou interakci lze popsat silovou konstantou mezi n-tými nejbližšími sousedy

$$C_n = \frac{(-1)^n e^2}{2\pi\varepsilon_0 (na)^3}\ ,$$

kde a je vzdálenost nejbližších sousedů. Najděte disperzní relaci a nakreslete její graf pro vhodně volené parametry. Ukažte, že ω^2 je záporné (nestabilní mód) na hranici Brillouinovy zóny pro $\alpha = \frac{e^2}{2\pi\varepsilon_0 C a^3} > 0.9508$.



2.14 Křemenný oscilátor

Křemenný krystal v řezu typu AT má efektivní modul pružnosti ve smyku 29.47 GPa v daném směru. Určete rychlost zvuku c_s odpovídající danému kmitovému módu, je-li hustota křemene $\rho_s = 2643\,\mathrm{kg.m^{-3}}$. Jakou tloušťku má mít křemenný oscilátor pro frekvenci 5 MHz? Deponujeme-li na křemenný oscilátor o ploše A tenkou vrstvu o hmotnosti Δm změní se jeho vlastní frekvence podle Sauerbreyovy rovnice:

$$\Delta f = -\frac{2f_0^2\Delta m}{Ac_s\rho_s},$$

kde f_0 je základní frekvence krystalu. Jak se změní frekvence, je-li deponovaná vrstva o tloušťce 1 nm z hliníku (hustota $2700\,\mathrm{kg.m^{-3}}$) a zlata ($19300\,\mathrm{kg.m^{-3}}$)?

3 Optické vlastnosti pevných látek

Maxwellovy rovnice v látkovém prostředí

$$\mathrm{rot}\vec{E} = -\frac{\partial\vec{B}}{\partial t}, \quad \mathrm{div}\vec{B} = 0,$$

$$\mathrm{rot}\vec{H} = \frac{\partial\vec{D}}{\partial t} + \vec{j}_c + \vec{j}_{ext}, \quad \mathrm{div}\vec{D} = \rho_{ext},$$

kde $\vec{j}_c$ je proudová hustota volných nositelů v látce a $\vec{D} = \epsilon_0\vec{E} + \vec{P}$ a $\vec{H} = \frac{1}{\mu_0}(\vec{B} - \vec{M})$. Uvažujme následující materiálové vztahy vyjádřené pomocí odezvových funkcí

$$\vec{D}(\vec{r},t) = \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}^3\vec{r}' \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}t'\hat{\epsilon}(\vec{r},\vec{r}',t,t')\vec{E}(\vec{r}',t')$$

$$\vec{H}(\vec{r},t) = \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}^3\vec{r}' \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}t'\widehat{\left(\frac{1}{\mu}\right)}(\vec{r},\vec{r}',t,t')\vec{B}(\vec{r}',t')$$

$$\vec{j}_c(\vec{r},t) = \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}^3\vec{r}' \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}t'\hat{\sigma}(\vec{r},\vec{r}',t,t')\vec{E}(\vec{r}',t').$$

V dalších úvahách předpokládáme:

1. prostředí bez magnetické odezvy $\widehat{\left(\frac{1}{\mu}\right)} = \frac{1}{\mu_0}$,
2. homogenitu času $\hat{\epsilon}(\vec{r},\vec{r}',t,t') = \hat{\epsilon}(\vec{r},\vec{r}',t-t')$,
3. homogenitu prostředí $\hat{\epsilon}(\vec{r},\vec{r}',t-t') = \hat{\epsilon}(\vec{r}-\vec{r}',t-t')$
4. a izotropii prostředí $\hat{\epsilon}(\vec{r}-\vec{r}',t-t') = \epsilon(|\vec{r}-\vec{r}'|,t-t')$.

Stejné podmínky jako pro permitivitu předpokládáme i pro vodivost.

3.1 Materiálové vztahy v Laplaceově transformaci

Nalezněte vztah mezi $\vec{D}(\vec{k},\omega)$ (Laplaceova transformace $\vec{D}(\vec{r},t)$) a $\vec{E}(\vec{k},\omega)$ (Laplaceova transformace $\vec{E}(\vec{r},t)$). Jednodušší varianta: Mějme rovinnou vlnu:

$$\vec{E}(\vec{r},t) = \vec{E}_0\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)}, \quad \vec{D}(\vec{r},t) = \vec{D}_0\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)}.$$

Nalezněte vztah mezi $\vec{D}_0$ a $\vec{E}_0$.

3.2 Vlnový vektor a odezvová funkce

Uvažujte prostředí bez prostorové disperze $\epsilon(\vec{k},\omega) = \epsilon_0\epsilon_d(\omega)$ a $\sigma(\vec{k},\omega) = \sigma(\omega)$. Nalezněte vztah mezi vlnovým vektorem rovinné vlny a komplexní dielektrickou funkcí (druhou mocninou komplexního indexu lomu) definovanou vztahem

$$[n(\omega)]^2 = \epsilon(\omega) = \epsilon_d(\omega) + \mathrm{i}\frac{\sigma(\omega)}{\epsilon_0\omega}.$$

V obecném případě je vlnový vektor komplexní $\vec{k} = \vec{k}' + \mathrm{i}\vec{k}''$. Z výsledku příkladu vyplývá, že

$$|\vec{k}'|^2 - |\vec{k}''|^2 + 2\mathrm{i}\vec{k}' \cdot \vec{k}'' = \frac{\omega^2}{c^2}n^2(\omega).$$

V případě homogenní vlny mají reálný i imaginární části vlnového vektoru stejný směr a platí $|\vec{k}'| = \frac{\omega}{c}\Re\{n(\omega)\} = \frac{\omega}{c}N$ a $|\vec{k}''| = \frac{\omega}{c}\Im\{n(\omega)\} = \frac{\omega}{c}K$, kde N je index lomu a K index absorpce.

3.3 Poyntingův vektor a intenzita světla v prostředí

Stanovte Poyntingův vektor a intenzitu světla pro rovinnou elektromagnetickou vlnu, která má elektrickou složku lineárně polarizovanou (tzv. TE mód).

3.4 Elektromagnetická vlna v GaAs

Uvažujte homogenní rovinnou elektromagnetickou vlnu v GaAs s energií fotonu $E = 1.5\,\mathrm{eV}$ a $E = 2.0\,\mathrm{eV}$. Index lomu GaAs je $n = 3.66 + 0.88\,\mathrm{i}$ pro $E = 1.5\,\mathrm{eV}$ a komplexní dielektrická funkce je $\epsilon = 15.01 + 1.575\,\mathrm{i}$ pro $E = 2\,\mathrm{eV}$. Určete vlnovou délku, vzdálenost na které poklesne intenzita světla na 1/e a reálnou a imaginární část komplexní dielektrické funkce (pro $E = 1.5\,\mathrm{eV}$), případně indexu lomu (pro $E = 2\,\mathrm{eV}$).

Fresnelovy koeficienty

Okrajové podmínky elektromagnetických veličin na rozhraní dvou prostředí:

1. tečná složka $\vec{E}$ je spojitá na rozhraní,
2. tečná složka $\vec{H}$ je spojitá na rozhraní,
3. normálová složka $\vec{D}$ je spojitá na rozhraní
4. a normálová složka $\vec{B}$ je spojitá na rozhraní.

V reálném případě dopadá na rozhraní obecně polarizovaná vlna, kterou lze vyjádřit jako součet dvou vhodně vybraných lineárně polarizovaných vln. Vhodnou volbou je takzvaná s-polarizovaná vlna, jejíž vektor elektrické intenzity je rovnoběžný s rovinou rozhraní (obrázek 1), a p-polarizovaná složka, jejíž vektor elektrické intenzity leží v rovině dopadu (obrázek 2). Ještě zavedeme označení pro index lomu prvního prostředí n_1 a druhého n_2, veličiny popisující dopadající světlo budeme označovat indexem 0, odražené indexem R a lomený paprsek indexem T. Souřadné osy zvolíme tak, aby osa z byla kolmá na rozhraní, vlnový vektor dopadajícího záření ležel v rovině xz (rovina dopadu) a byl kolmý na osu y.

Předpokládejme dopadající záření s-polarizovanou (elektrická intenzita rovnoběžná s osou y, obrázek 1) rovinnou vlnu

$$\vec{E}_0(\vec{r}) = \vec{E}_0\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\vec{k}_0\cdot\vec{r}-\omega_0 t)}, \vec{k}_0 = (k_{0x}, 0, k_{0z}).$$

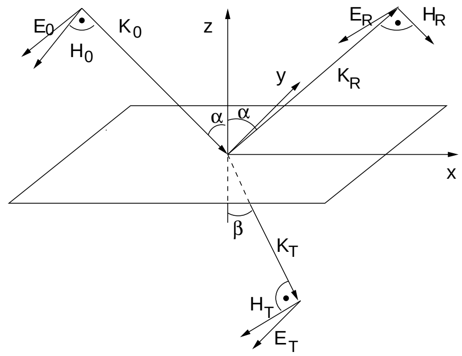
Odražené a lomené hledejme rovněž ve tvaru rovinné vlny

$$\vec{E}_R(\vec{r}) = \vec{E}_R\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\vec{k}_R\cdot\vec{r}-\omega_R t)}, \vec{k}_R = (k_{Rx}, k_{Ry}, k_{Rz}),$$

$$\vec{E}_T(\vec{r}) = \vec{E}_T\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\vec{k}_T\cdot\vec{r}-\omega_T t)}, \vec{k}_T = (k_{0x}, k_{Ty}, k_{0z}).$$

Z podmínky spojitosti tečné složky elektrické intenzity na rozhraní ($z = 0$) musí platit

$$E_{0y}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(k_{0x}x-\omega_0 t)} + E_{Ry}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(k_{Rx}x+k_{Ry}y-\omega_R t)} = E_{Ty}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(k_{Tx}x+k_{Ty}y-\omega_T t)}$$



Obrázek 1: Schématické znázornění směrů vektorů elektrického a magnetického pole při odrazu a lomu s-polarizovaného světla. Vektory elektrické intenzity jsou kolmé na roviny dopadu xz, vektory magnetické intenzity v ní leží.

pro všechna x, y, t. Tato podmínka lze splnit pouze pokud

$$\omega_0 = \omega_R = \omega_T, \quad k_{0x} = k_{Rx} = k_{Tx} \ \text{ a } \ k_{Ry} = k_{Ty} = 0.$$

Což znamená, že frekvence se při odrazu a lomu nemění a že se zachovává tečná složka vlnového vektoru. Pro odražený paprsek je to ekvivalentní zákonu odrazu – úhel dopadu se rovná úhlu odrazu. Pro lomený paprsek tato podmínka odpovídá Snellovu zákonu

$$n_1 \sin\alpha = n_2 \sin\beta.$$

Stejnou podmínku dostaneme i v případě obecné polarizace.

V s-polarizaci (obrázek 1) jsou okrajové podmínky pro tečnou složku elektrické intenzity triviální

$$E_0 + E_R = E_T.$$

Podmínka pro spojitost tečné složky magnetické intenzity dává

$$H_0 \cos\alpha - H_R \cos\alpha = H_T \cos\beta.$$

Magnetickou intenzitu můžeme vyjádřit pomocí elektrické intenzity za pomoci vztahu mezi elektrickou a magnetickou intenzitou $\omega\mu_0\vec{H} = \vec{k} \times \vec{E}$ nebo pro velikosti v případě neabsorbujícího prostředí $H = \frac{n}{c\mu_0}E$. Potom lze předchozí výraz transformovat do tvaru

$$E_0 n_1 \cos\alpha - E_R n_1 \cos\alpha = E_T n_2 \cos\beta.$$

Z těchto dvou rovnic se dají vyjádřit Fresnelovy koeficienty odrazivosti a propustnosti

$$r_s = \frac{E_R}{E_0} = \frac{n_1\cos\alpha - n_2\cos\beta}{n_1\cos\alpha + n_2\cos\beta},$$

$$t_s = \frac{E_T}{E_0} = \frac{2n_1\cos\alpha}{n_1\cos\alpha + n_2\cos\beta}.$$

Pro výpočet intenzity odraženého a lomeného paprsku je třeba ještě uvážit, že v případě reálného indexu lomu platí $I = \frac{n}{2c\mu_0}|E|^2$ a změnu směru Poyntingova vektoru:

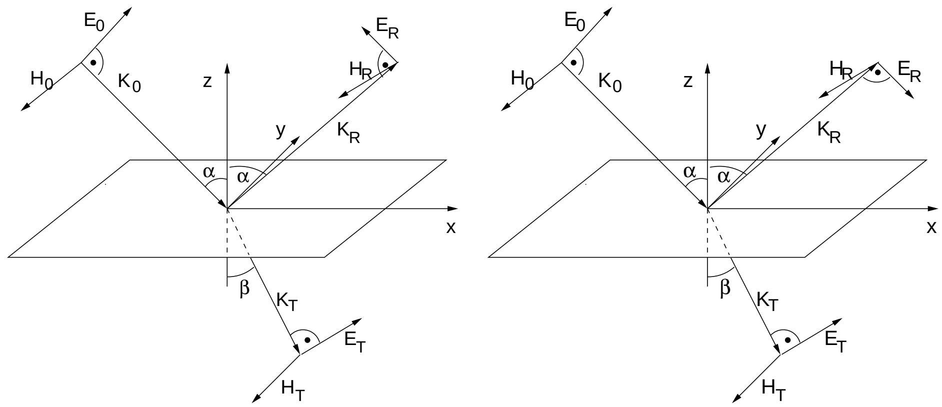
$$R_s = \frac{I_R}{I_0} = |r_s|^2 = \left|\frac{n_1\cos\alpha - n_2\cos\beta}{n_1\cos\alpha + n_2\cos\beta}\right|^2$$

$$T_s = \frac{I_T}{I_0} = \frac{n_2\cos\beta}{n_1\cos\alpha}|t_s|^2 = \frac{n_2\cos\beta}{n_1\cos\alpha}\left|\frac{2n_1\cos\alpha}{n_1\cos\alpha + n_2\cos\beta}\right|^2$$

V p-polarizaci (obrázek 2 vlevo) je postup obdobný. Okrajové podmínky pro tečnou složku magnetické intenzity jsou

$$H_0 + H_R = H_T,$$

$$E_0 n_1 + E_R n_1 = E_T n_2.$$



Obrázek 2: Schématické znázornění směrů vektorů elektrického a magnetického pole při odrazu a lomu p-polarizovaného světla. Vektory magnetické intenzity jsou kolmé na roviny dopadu xz, vektory elektrické intenzity v ní leží. Vlevo varianta, která je použita v tomto textu. Varianta vpravo se též často používá, liší se jen opačným směrem vektoru $\vec{E}_R$.

Podmínka pro spojitost tečné složky elektrické intenzity dává

$$E_0 \cos\alpha - E_R \cos\alpha = E_T \cos\beta.$$

Z těchto rovnic se dají vyjádřit Fresnelovy koeficienty odrazivosti a propustnosti[2]

$$r_p = \frac{E_R}{E_0} = \frac{n_2 \cos\alpha - n_1 \cos\beta}{n_2 \cos\alpha + n_1 \cos\beta},$$

$$t_p = \frac{E_T}{E_0} = \frac{2n_1 \cos\alpha}{n_2 \cos\alpha + n_1 \cos\beta}.$$

A pro intenzitu odraženého a lomeného paprsku platí

$$R_p = \frac{I_R}{I_0} = |r_p|^2 = \left| \frac{n_2 \cos\alpha - n_1 \cos\beta}{n_2 \cos\alpha + n_1 \cos\beta} \right|^2,$$

$$T_p = \frac{I_T}{I_0} = \frac{n_2 \cos\beta}{n_1 \cos\alpha} |t_p|^2 = \frac{n_2 \cos\beta}{n_1 \cos\alpha} \left| \frac{2n_1 \cos\alpha}{n_2 \cos\alpha + n_1 \cos\beta} \right|^2.$$

Komplexní indexy lomu. V případě obecně komplexních indexů lomu prostředí jsou Fresnelovy vztahy formálně stejné. Goniometrické funkce ve Snellově zákoně a Fresnelových vztazích je však třeba brát jako funkce komplexního argumentu. Pro tyto případy odkazujeme ne specializovanou literaturu (uvedeno v přednáškách).

3.5 Odrazivost a propustnost destičkového vzorku

Vypočtěte intenzitu odraženého I_R a prošlého I_T světla přes tenkou vrstvu při kolmém dopadu v těchto případech (index lomu okolí n_1, n_3, vrstvy n_2):

1. $n_1 = n_3$ reálné, n_2 reálné, násobné odrazy započteny, tlustý vzorek (tlustší než koherenční délka).
2. $n_1 = n_3$ reálné, $n_2 = N_2 + \mathrm{i}K_2$ komplexní, násobné odrazy nezapočteny.

3.6 Propustnost tlusté neabsorbující destičky

Spočtěte odrazivost a propustnost tlusté neabsorbující destičky o indexu lomu n. Počítejte obecně a pak číselně pro tyto materiálu v NIR oblasti:

	n
SiO_2	1,46
Si	3,42
Ge	4,00

[2] Pozorný čtenář si jistě všimne, že pro kolmý dopad platí $r_p = -r_s$. Rozdílné znaménko Fresnelových koeficientů je důsledek použité definice směrů vektorů elektrického pole. V s-polarizaci (obrázek 1) mají při kolmém dopadu vektory $\vec{E}_0$ a $\vec{E}_R$ stejný směr, v p-polarizaci (obrázek 2 vlevo) mají směr opačný. V dostupné literatuře se často objevují i jiné definice, a následně tedy i jiná znaménka Fresnelových amplitud. Například varianta v obrázku 2 vpravo, kdy vyjde Fresnelova amplituda r_p s opačným znaménkem.

3.7 Optické konstanty z propustnosti a odrazivosti na destičkovém vzorku

Na vzorek tvaru destičky o tloušťce d dopadá kolmo rovinná monochromatická vlna o vlnové délce λ. Poměr mezi intenzitou odražené a dopadající vlny je i_R, mezi intenzitou prošlé a dopadající vlny je i_T. Spočtěte index lomu N a index absorpce K vzorku, nejprve obecně a pak pro hodnoty $d = 1\,\mathrm{mm}$, $\lambda = 550\,\mathrm{nm}$, $i_R = 0{,}3$ a $i_T = 0{,}01$. Násobné odrazy zanedbejte.

3.8 Frekvenční závislost vodivosti vázaných elektronů v Lorentzově modelu

Výchylka elektronů je v Lorentzově modelu popsán rovnicí

$$\frac{\mathrm{d}^2x}{\mathrm{d}t^2} + \frac{1}{\tau}\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} + \omega_0^2 x = \frac{F}{m} = \frac{1}{m}\Re\left[-eE_0\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\right].$$

Najděte frekvenční závislost dielektrické funkce a komplexní vodivosti. Najděte frekvenci LO módu (reálná část permitivity je nulová) pro malé tlumení $\tau \gg 1/\omega_0$.

3.9 LST vztah pro GaAs

Disperzní závislost permitivity GaAs v IR oblasti lze vyjádřit v Lorentzově modelu jako

$$\varepsilon = \varepsilon_\infty + \frac{F}{\nu_{\mathrm{TO}}^2 - \nu^2 - \mathrm{i}\nu\gamma},$$

kde $\varepsilon_\infty = 10.9$, $\nu_{\mathrm{TO}} = 269{,}2\,\mathrm{cm}^{-1}$, $\gamma = 3{,}3\,\mathrm{cm}^{-1}$ a $F = 1{,}45 \times 10^5\,\mathrm{cm}^{-2}$. Určete ν_{LO} a ε_0.

3.10 Pennův model

Dielektrická funkce polovodičů splňuje Pennův vztah

$$\varepsilon_\infty = 1 + \frac{\omega_P^2}{\omega_g^2}$$

kde $\omega_P = \frac{Ne^2}{\varepsilon_0 m}$ je plazmová frekvence valenčních elektronů (obvykle připadají 4 valenční elektrony na jeden atom) a ω_g je Pennův gap. Pro malé energie lze frekvenční závislost aproximovat vztahem

$$\varepsilon(\omega) = 1 + \frac{\omega_P^2}{\omega_g^2 - \omega^2}.$$

1. Určete index lomu diamantu v IR oblasti pro vlnové délky $3, 4, 5, 8, 10\,\mu\mathrm{m}$, znáte-li mřížový parametr $a_0 = 3.567\,\mathrm{Å}$ a $\epsilon_\infty = 5.6668$.
2. Porovnejte index lomu a disperzi Si a Ge v oblasti 4 až $8\,\mu$m. Parametry Pennova modelu pro Si a Ge jsou udány v tabulce:

	ε_∞	E_P (eV)	E_g (eV)
Si	11.70	16.6	5.07
Ge	16.00	15.6	4.04

3.11 *Zobecněný vztah LST

Předpokládejme, že dielektrická funkce závisí na frekvenci podle vztahu

$$\varepsilon(\omega) = A + \sum_j \frac{B_j}{\omega^2 - \omega_j^2}\ .$$

Dokažte, že LST vztah má v tomto případě tvar

$$\frac{\varepsilon(0)}{\varepsilon(\infty)} = \prod_j \left(\frac{\omega_j^0}{\omega_j}\right)^2,$$

kde ω_j^0 jsou kořeny rovnice $\varepsilon(\omega) = 0$. Jaký fyzikální smysl mají frekvence ω_j a ω_j^0?

3.12 Frekvenční závislost vodivosti volných elektronů v kovu v Drudeho modelu

V Drudeho modelu je pohyb elektronů popsán rovnicí

$$\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}t} + \frac{v}{\tau} = \frac{F}{m} = \frac{1}{m}\Re\left[-eE\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\right].$$

Najděte frekvenční závislost vodivosti.

3.13 Optická odezva zlata v IR a VIS

Optická odezva zlata v IR a VIS oblasti se dá popsat Drudeho formulí

$$\varepsilon(E) = \varepsilon_\infty - \frac{E_P^2}{E(E+\mathrm{i}\Gamma)} \qquad [\mathrm{eV}],$$

kde $\varepsilon_\infty = 3$, $E_P^2 = 57.2\,\mathrm{eV}^2$ a $\Gamma = 0.0602\,\mathrm{eV}$. Spočtěte reálnou část vodivosti, index lomu a hloubku průniku pro energie fotonu $\hbar\omega = 0.001,\ 0.01,\ 0.1,\ 1,\ 2$ a $3\,\mathrm{eV}$.

3.14 IR odrazivost n-dopovaného křemíku

IR odrazivost n-dopovaného křemíku byla nafitována modelem

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_\infty - \frac{F}{\nu(\nu+\mathrm{i}\gamma)} \qquad [\mathrm{cm}^{-1}],$$

přičemž byly získány hodnoty parametrů $\varepsilon_\infty = 11.62$, $F = 1.35\times 10^7\,\mathrm{cm}^{-2}$ a $\gamma = 361\,\mathrm{cm}^{-1}$. Určete statický měrný odpor $\rho(0)$, index lomu pro frekvence nad plazmovou frekvencí a koncentraci dopantů za předpokladu efektivní hmotnosti elektronů $m^* = 0.26\,m_e$.

3.15 Efektivní hmotnost a plazmová hrana v polovodiči InAs

Dielektrickou funkci legovaného polovodiče můžeme popsat přibližně vztahem

$$\epsilon(\omega) \approx \epsilon_\infty - \frac{\omega_P^2}{\omega^2},$$

kde ω_P je plazmová frekvence. Na obrázku je naměřená závislost kolmé odrazivosti n-dopovaného polovodiče InAs na vlnové délce v infračervené oblasti pro dvě koncentrace elektronů.

Pro frekvence nad plazmovou hranou přibližně platí $\epsilon(\omega > \omega_P) \approx \epsilon_\infty$. Odhadněte ϵ_∞ z hodnoty odrazivosti nad plazmovou hranou.

Pro jakou frekvenci je kolmá odrazivost podle výše uvedené dielektrické funkce nulová? Odhadněte efektivní hmotnost elektronů v InAs z polohy minima odrazivosti.

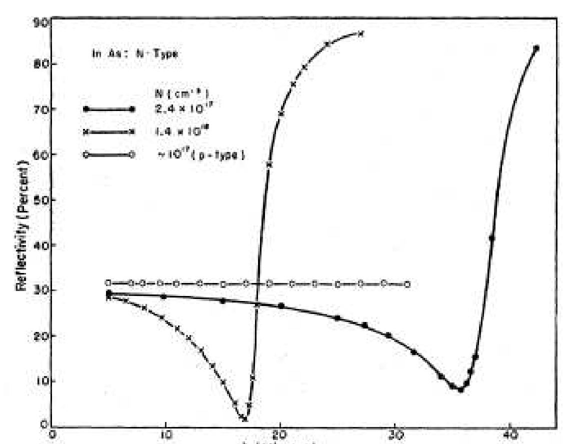


FIG. 13. Reflectivity *vs* wavelength for two *n*-type indium arsenide samples as well as a *p*-type sample of a sufficiently small hole concentration such that $\chi_c \sim 0$ for the wavelengths used.

Obrázek: Závislost odrazivosti n-dopovaného InAs na vlnové délce v μm v IR oblasti pro koncentraci elektronů $2{,}4 \cdot 10^{17}\,\mathrm{cm}^{-3}$ a $1{,}4 \cdot 10^{18}\,\mathrm{cm}^{-3}$. Třetí křivka odpovídá velmi slabě legovanému InAs. Podle W. G. Spitzer, H. Y. Fan, Phys. Rev. **106**, 882 (1957).

3.16 Frekvence multifononových absorpcí

Ověřte, zda třífonové absorpční frekvence daných materiálů splňují odmocninovou závislost na hmotnosti atomů

	$3\nu_{\mathrm{LO}}$ (cm^{-1})
NaCl	795
KCl	615
AgCl	597
KBr	489
CsBr	342
CsI	270

	m (at.u.)
Na	23.0
K	39.1
Ag	107.9
Cs	132.9
Cl	35.5
Br	79.9
I	126.9

3.17 Optické konstanty z kolmé reflektivity a fázového úhlu

Ze změřené spektrální závislosti odrazivosti $R(\omega)$ v dostatečně širokém oboru frekvencí můžeme určit spektrální závislost komplexního indexu lomu s využitím Kramersových-Kronigových relací. Platí

$$r(\omega) = \rho(\omega)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi(\omega)} = \frac{n(\omega) + \mathrm{i}k(\omega) - 1}{n(\omega) + \mathrm{i}k(\omega) + 1},$$

$$R(\omega) = |r(\omega)|^2, \qquad \rho(\omega) = \sqrt{R(\omega)},$$

a

$$\phi(\omega_0) = -\frac{\omega_0}{\pi}\int_0^{\infty} \frac{\ln R(\omega')}{\omega'^2 - \omega_0^2}\mathrm{d}\omega'.$$

Vyjádřete reálnou $n(\omega)$ a imaginární složku $k(\omega)$ indexu lomu pomocí $R(\omega)$ a $\phi(\omega)$.

3.18 Interference na tenké vrstvě

Určete odrazivost neabsorbující tenké vrstvy. Substrát má index lomu n_3, vrstva má index lomu n_2 a tloušťku d. Vyjádřete také pro zvláštní hodnoty antireflexní vrstvy $n_2 = \sqrt{n_3}$ a $d = \lambda/4\sqrt{n_3}$. Navrhněte postup určení indexů lomu a tloušťky vrstvy z naměřené odrazivosti.

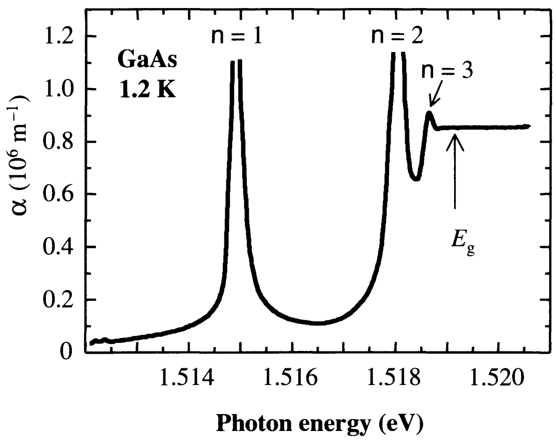
3.19 *Polarizace totálně odraženého světla

Na rozhraní sklo ($n_s = 1.5$)/vzduch dopadá dopadá pod úhlem $\theta = 50\,°$ lineárně polarizované světlo. Vektor polarizace svírá úhel $\alpha = 45\,°$ s rovinou dopadu. Určete polarizaci totálně odražené vlny.

3.20 Exciton v GaAs

Na obrázku je změřené absorpční spektrum GaAs za nízké teploty 1,2 K. Určete energii excitonu.

Efektivní hmotnost elektronů je $m_e^* = 0.067 m_e$ a děr $m_h^* = 0.2 m_e$. Odhadněte relativní permitivitu GaAs.



Podle G. W. Fehrenbach, W. Schäfer, R. G. Ulbrich, *J. Luminescence* **30**, 154 (1985).

3.21 Sumační pravidlo optické vodivosti v kovu

Spektrálně závislou elektrickou vodivost kovu můžeme napsat jako $\sigma(\omega) = \sigma_1(\omega) + i\sigma_2(\omega)$. Ukažte s využitím Kramersových-Kronigových relací, že

$$\lim_{\omega\to\infty} \omega\sigma_2(\omega) = \frac{2}{\pi}\int_0^\infty \sigma_1(\omega')\mathrm{d}\omega'.$$

Dosaďte do tohoto vztahu Drudeho model absorpce na volných elektronech a ukažte, že platí

$$\int_0^\infty \sigma_1(\omega')\mathrm{d}\omega' = \frac{\pi N e^2}{2m},$$

kde N je koncentrace volných elektronů.

3.22 Sumační pravidlo dielektrické funkce pro mřížovou absorbci

Mějme optickou odezvu popsanou dielektrickou funkcí ve tvaru součtu N Lorentzových oscilátorů

$$\epsilon(\omega) = 1 + \sum_{j=1}^{N} \frac{F_j}{\omega_j^2 - \omega^2 - i\gamma_j\omega}.$$

Ukažte pomocí Kramersových-Kronigových relací pro reálnou část $\epsilon_1(\omega_0)$ v limitě $\omega_0 \to \infty$, že platí následující sumační pravidlo:

$$\sum_{j=1}^{N} F_j = \frac{2}{\pi}\int_0^\infty \omega\epsilon_2(\omega)\mathrm{d}\omega.$$

4 Magnetické vlastnosti pevných látek

4.1 Larmorova precese elektronu

Spočtěte magnetický moment elektronu ($g = 2$). Jaká je frekvence Larmorovy precese v poli $B = 0.3\,\mathrm{T}$? Jak se liší energie elektronu se spinem ve směru a proti směru magnetického pole?

4.2 Demagnetizační pole

Kulový objekt tvořený (a) vodou nebo (b) $MnSO_4.4H_2O$ je vložen do magnetického pole $0.5\,\mathrm{T}$. Určete jak se liší magnetické intenzita H a indukce B vně a uvnitř vzorku v obou případech. Magnetické susceptibility jsou pro vodu $\chi = -90 \times 10^{-6}$ a $MnSO_4.4H_2O$ $\chi = 2640 \times 10^{-6}$.

4.3 Diamagnetická susceptibilita atomového vodíku

Vlnová funkce atomu vodíku v základním stavu (1s) je $\psi = (\pi a_0^3)^{-1/2} \exp(-r/a_0)$, kde $a_0 = 0.529 \times 10^{-10}$ m. Nábojová hustota je $\rho(x, y, z) = -e|\psi|^2$. Ukažte, že pro tento stav platí $\langle r^2 \rangle = 3a_0^2$, a spočtěte molární diamagnetickou susceptibilitu atomového vodíku ($-2.98 \times 10^{-11}\,\mathrm{m}^3/\mathrm{mol}$).

4.4 Paramagnetismus systému se spinem S=1/2

Najděte magnetizaci jako funkci magnetického pole a teploty pro systém se spinem S=1/2, magnetickým momentem μ a koncentrací n. Ukažte, že v limitě pro vysoké teploty je výsledek $M \approx \frac{n\mu^2}{kT} B$.

4.5 *Tepelná kapacita dvouhladinového systému

Předpokládejte systém se dvěma hladinami, jejichž energiový rozdíl je $k_B\Delta$. Ukažte, že tepelná kapacita systému je

$$C = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right) = k_B \frac{(\Delta/T)^2 \exp(\Delta/T)}{(1 + \exp(\Delta/T))^2}.$$

Ukažte, že pro teplotu $T \gg \Delta$ je $C \approx k_B(\Delta/T)^2$.

4.6 Paramagnetismus systému se spinem S=1

Najděte magnetizaci jako funkci magnetického pole a teploty pro systém se spinem S=1, magnetickým momentem μ a koncentrací n. Ukažte, že v limitě pro vysoké teploty je výsledek $M \approx \frac{2n\mu^2}{3kT} B$.

4.7 Hundova pravidla

Najděte základní stav iontů Ho^{3+} ($4f^{10}$), Er^{3+} ($4f^{11}$), Tm^{3+} ($4f^{12}$) a Lu^{3+} ($4f^{14}$).

4.8 Paramagnetická susceptibilita chloridu železnatého

V chloridu železnatém $FeCl_2$ má iont železa Fe^{2+} stav $^5D_4$ ($L = 2, S = 2, J = 4$). Určete Landého faktor. Vypočtěte konstantu C v Curieho zákoně $\chi = C/T$ a magnetickou susceptibilitu pro pokojovou teplotu. Hustota materiálu je $2{,}98\,\mathrm{g}\cdot\mathrm{cm}^{-3}$ a molekulová hmotnost je 127. Porovnejte s tabulkovou hodnotou měrné susceptibility $\chi = 1460 \cdot 10^{-9}\,\mathrm{m}^3 \cdot \mathrm{kg}^{-1}$. Výpočet zopakujte, má-li kvůli orbitální interakci železo vázanou orbitální část a namísto stavu $^5D_4$ má stav s $L = 0$ tedy $^5S_2$ ($L = 0, S = 2, J = 2$).

4.9 Pauliho spinová susceptibilita

Spinovou susceptibilitu volných elektronů při teplotě 0 K lze řešit pomocí předpokladu

$$N^+ = \frac{1}{2}N(1 + \zeta), \qquad N^- = \frac{1}{2}N(1 - \zeta),$$

kde N^+ a N^- je koncentrace elektronů se spinem nahoru a spinem dolů. Ukažte, že v magnetickém poli B je celková energie elektronů se spinem nahoru

$$E^+ = \frac{3}{10}N\epsilon_F(1 + \zeta)^{5/3} - \frac{1}{2}N\mu B(1 + \zeta),$$

kde ϵ_F je Fermiho energie v nulovém magnetickém poli. Najděte podobný vztah pro energii elektronů se spinem dolů. Minimalizujte celkovou energii vzhledem k ζ v aproximaci $\zeta \ll 1$ a najděte susceptibilitu.

Vypočtěte susceptibilitu kovového sodíku. Koncentrace volných elektronů sodíku je $n = 2{,}65 \times 10^{22}\,\mathrm{cm}^{-3}$ a Fermiho energie je $\epsilon_F = 3{,}23\,\mathrm{eV}$. Bohrův magneton je $\mu_B = 9{,}2741 \times 10^{-24}\,\mathrm{JT}^{-1}$ a permeabilita vakua je $\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7}\,\mathrm{Hm}^{-1}$. Porovnejte s tabulkovou hodnotou susceptibility sodíku $\chi = 8.26 \times 10^{-6}$.

4.10 Feromagnetismus volných elektronů

Aproximujte efekt výměnné interakce mezi vodivostními elektrony interakcí s energií $-V < 0$ mezi elektrony se stejným spinem a energií 0 mezi elektrony s opačným spinem. S pomocí předchozího problému ukažte, že energie elektronů se spinem nahoru je

$$E^{+} = \frac{3}{10} N \epsilon_F (1+\zeta)^{5/3} - \frac{1}{2} N \mu B (1+\zeta) - \frac{1}{8} V N^2 (1+\zeta)^2.$$

Najděte vztah pro elektrony se spinem dolů. Minimalizujte celkovou energii vzhledem k $\zeta \ll 1$. Najděte celkovou magnetizaci a ukažte, že feromagnetický stav se může objevit pro $V > \frac{4\epsilon_F}{3N}$

4.11 Feromagnetismus ve Weissově teorii středního pole

Najděte Curieho teplotu a magnetickou susceptibilitu nad T_C ve Weissově modelu středního pole pro feromagnet. V teorii středního pole se předpokládá, že lokální pole působící na každý atom se dá vyjádřit jako $B_{\mathrm{lok}} = B_{\mathrm{ext}} + \lambda M$, kde B_{ext} je vnější pole a M magnetizace.

Pomůcka: aproximativní rozvoj hyperbolické kotangenty je $\mathrm{cotgh}(x) = \frac{1}{x} + \frac{x}{3} + O(x^3)$.

4.12 Spontánní magnetizace v teorii středního pole

Najděte spontánní magnetizaci jako funkci teploty pod T_C v blízkosti T_C ve Weissově modelu středního pole pro feromagnet.

Pomůcka: aproximativní rozvoj hyperbolické kotangenty je $\mathrm{cotgh}(x) = \frac{1}{x} + \frac{x}{3} - \frac{x^3}{45} + O(x^5)$.

4.13 Spontánní magnetizace feromagnetu za velmi nízkých teplot

Ukažte, že za velmi nízkých teplot předpovídá Weissova teorie středního pole spontánní magnetizaci, která se liší od magnetizace za nulové teploty o člen, který závisí exponenciálně na $-1/T$.

4.14 *Magnon v prosté kubické mřížce

Odvoďte disperzní relaci magnonu v prosté kubické mřížce (spin S, počet nejbližších sousedů $z = 6$.)

$$\hbar\omega = 2JS \left[z - \sum_{\delta} \cos(\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{\delta}) \right],$$

kde $\boldsymbol{\delta}$ jsou vektory směřující k nejbližším sousedům.

4.15 Měrné teplo magnonového plynu za nízkých teplot

Spočtěte měrné teplo magnonového plynu za předpokladu, že disperzní relace magnonů je popsána vztahem

$$\omega \sim k^2.$$

Magnony jsou bosony a ukažte, že pro nízké teploty platí $c_v \sim T^{3/2}$.

Pomůcka:

$$\int_0^\infty \mathrm{d}x \frac{x^{3/2}}{\mathrm{e}^x - 1} = \frac{3\sqrt{\pi}}{4} \zeta(5/2) \approx \frac{3\sqrt{\pi}}{4} \times 1.342$$

4.16 Vliv magnonů na magnetizaci feromagnetu za nízkých teplot

Předpokládejme, že celková remanentní magnetizace je snížena o hodnotu úměrnou koncentraci magnonů. Spočtěte teplotní závislost koncentrace magnonů za nízkých teplot se stejnými předpokladz jako v předchozím příkladu.

4.17 Hallův jev pro dva typy nositelů

Předpokládejte, že koncentrace vodivostních elektronů a děr v polovodiči jsou n a p, relaxační doby τ_e a τ_h a efektivní hmotnosti m_e a m_h. Ukažte, že Hallův koeficient je

$$R_H = \frac{1}{e}\frac{p - nb^2}{(p+nb)^2}\ ,$$

kde $b = \mu_e/\mu_h$ je poměr pohyblivostí. Při výpočtu zanedbejte členy s B^2.

4.18 Kvantové oscilace v kovu

Kov tvořený jedním tzpem atomů má tetragonální krystalovou mříž s parametry $a = 0.3275\,\mathrm{nm}$ a $c = 0.3452\,\mathrm{nm}$. V magnetickém poli orientovaném podél c osy byly pozorovány kvantové oscilace s periodami $\Delta(1/B) = 3.526 \times 10^{-5}\,\mathrm{T}^{-1}$ a $\Delta(1/B) = 7.590 \times 10^{-4}\,\mathrm{T}^{-1}$. Při orientaci magnetického pole podél a nebo b osy žádné kvantové oscilace pozorovány nebyly. Odhadněte tvar Fermiho plochy, jde o monovalentní nebo divalentní kov?

4.19 Cyklotronová rezonance v kovu

Velmi čistý kovový vzorek při teplotě 1 K je ozářen mikrovlnným zářením o frekvenci 72 GHz. Maxima absorbované energie byla pozorována s periodou 0.95 T. Určete cyklotronovou efektivní hmotnost.

4.20 Cyklotronová rezonance v polovodiči

Nominálně nedopovaný vzorek polovodiče je ozářen zářením s energií nad gapem. Cyklotronová absorpce byla měřena při teplotě 1.5 K a frekvenci 300 GHz. Cyklotronové rezonance byly pozorovány při 1.1 T a 5.8 T. Určete efektivní hmotnost elektronů a děr.

5 Supravodiče a grafen

5.1 Supravodivost – vnik magnetického pole do tenké supravodivé vrstvy

Vnik magnetického pole do supravodiče může být popsán vztahem odvozený z Londonových rovnic

$$\lambda^2 \nabla^2 \boldsymbol{B} = \boldsymbol{B},$$

kde λ je hloubka vniku. Ukažte, že magnetické pole v tenké supravodivé vrstvě o tloušťce d orientované kolmo ke směru magnetického pole a ose z je dáno vztahem

$$B(z) = B_a \frac{\cosh z/\lambda}{\cosh d/2\lambda},$$

kde B_a je pole vně supravodivé destičky a střed destičky je v místě $z = 0$.

5.2 Sumační pravidlo optické vodivosti v supravodiči

Vodivost supravodiče v normálním stavu popíšeme jako $\sigma^N(\omega)$ a po zchlazení do supravodivého stavu jako $\sigma^S(\omega)$. Pro velmi vysoké frekvence (jako má rtg záření) je však optická odezva nezávislá na stavu supravodiče a platí

$$\sigma_2^N(\omega) = \sigma_2^S(\omega)$$

a podle příkladu 3.21 také

$$\int_0^\infty \sigma_1^N(\omega')\mathrm{d}\omega' = \int_0^\infty \sigma_1^S(\omega')\mathrm{d}\omega'.$$

V supravodivém stavu je stejnosměrná vodivost nekonečná a popíšeme ji jako delta funkci pro $\omega = 0$. Aby byla splněna výše uvedená integrální rovnice je vodivost supravodiče $\sigma_1^S(\omega)$ nulová pro frekvence mezi $0 < \omega < \omega_g$, tzv. supravodivá mezera. Předpokládejte, že vodivost nad ω_g není ovlivněna stavem supravodiče a tedy $\sigma_1^S(\omega) \approx \sigma_1^N(\omega)$ pro $\omega > \omega_g$. Ukažte, že příspěvek delta funkce v nulové frekvenci dá příspěvek $\sigma_2^S(\omega) \approx \sigma_1^N(0)\frac{\omega_g}{\omega}$.

5.3 Fermiho rychlost povrchového stavu v topologickém izolátoru

Stejně jako elektronové stavy v grafenu mají lineární disperzi i povrchové stavy v topologických izolátorech. Typickým příkladem je Bi_2Se_3, jehož naměřená disperze fotoelektronovou spektroskopií je na obrázku – čáry naznačují průběh disperze povrchových stavů. Určete Fermiho rychlost povrchových stavů.