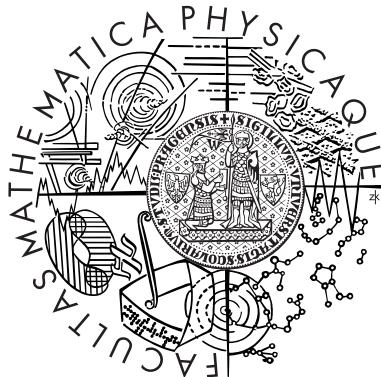


Univerzita Karlova v Praze  
Matematicko-fyzikální fakulta

## DIPLOMOVÁ PRÁCE



Martin Veis

# Magneto-optická spektroskopie tenkých vrstev perovskitů s kolosální<sup>1</sup> magnetorezistencí

Fyzikální ústav UK

**Vedoucí diplomové práce:**  
Prof. Ing. Štefan Višňovský, DrSc.

**Konzultanti:**  
Doc. Mgr. Miroslav Nývlt, Dr.  
RNDr. Jiří Franta

**Studijní program:** Fyzika, Kvantová a nelineární optika



*Mým rodičům a Liborovi*



PER ASPERA AD ASTRA.

(TRNITOU CESTOU KE HVĚZDÁM)

*Staré Římské přísloví*



# Poděkování

Rád bych poděkoval vedoucímu mé diplomové práce Prof. Ing. Štefanu Višňovskému, DrSc. za péči, kterou mi během celého studia věnoval. Děkuji mu za to, že mě zasvětil do problematiky magnetooptických jevů a nechal mě pracovat na zajímavých témaitech, jimiž se zabývá. Děkuji mu i za čas, který mi věnoval při diskusích o otázkách experimentálních či teoretických. Bez jeho pomoci by tato práce nikdy nevznikla.

Velké díky též patří mým konzultantům Doc. Mgr. Miroslavu Nývltovi, Dr. a RNDr. Jiřímu Frantovi za poskytnutí mnoha cenných rad a pomoc při experimentálních měřeních. Prvnímu z nich pak i za četné rady a připomínky týkající se této práce.

Za spolupráci při studiu vrstev  $La_{2/3}Sr_{1/3}MnO_3$  děkuji Prof. A. M. Haghiri-Gosnet, Prof. J. P. Renardovi a M. Koubovi, PhD. z Institut d'Electronique Fondamental, Université Paris Sud, Orsay. Za přípravu těchto vrstev pak děkuji Prof. B. Merceyovi z laboratoře CRISMAT - ISMRA, CNRS v Caen.

Rád bych také poděkoval Mgr. J. Mistríkovi, PhD. ze Shizuoka University v Hamamatsu za mnohé diskuse týkající se studia mnou měřených vrstev a za poskytnutí elipsometrických dat. Tato data mi velmi pomohla při analýze naměřených spekter.

Za pomoc při experimentálních měřeních děkuji svým kolegů V. Kolinskému a E. Liškové. Všichni vytvořili příjemnou pracovní atmosféru, která usnadnila sepsání této práce.

Za četné rady týkající se typografického systému L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X, v němž je tato práce napsána, děkuji kolegovi M. Bertovi.

Svým rodičům a bratrovi děkuji za podporu, kterou mi poskytovali nejen během mého studia.

V neposlední řadě bych chtěl poděkovat své přítelkyni Evičce, která mi byla vždy oporou.

Prohlašuji, že jsem svou diplomovou práci napsal samostatně a výhradně s použitím citovaných pramenů. Souhlasím se zapůjčováním práce.

V Praze dne 20.4. 2005

Martin Veis



# Obsah

<b>1</b>	<b>Úvod</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Polarizace světla</b>	<b>6</b>
2.1	Základní pojmy . . . . .	6
2.1.1	Lineárně a kruhově polarizované světlo . . . . .	8
2.2	Popis polarizovaného světla . . . . .	8
2.2.1	Jonesův formalismus . . . . .	8
2.2.2	Komplexní parametr polarizace . . . . .	11
2.2.3	Průchod polarizovaného světla optickými prvky . . . . .	12
2.2.4	Definice magnetooptických parametrů . . . . .	14
<b>3</b>	<b>Optické interakce a vlastnosti pevných látek</b>	<b>16</b>
3.1	Materiálové veličiny a jejich vzájemné vztahy . . . . .	16
3.2	Tenzor permitivity . . . . .	19
3.3	Mikroskopický popis optické interakce s magnetovaným prostředím . . . . .	26
3.3.1	Lorentzův model . . . . .	26
3.3.2	Drudeho model . . . . .	28
3.3.3	Polokvantový model . . . . .	29
<b>4</b>	<b>Elektromagnetické vlny v anizotropních nehomogenních prostředích</b>	<b>36</b>
4.1	Elektromagnetická pole v bi-periodických a homogenních prostředích . . . . .	37
4.1.1	Maxwellovy rovnice . . . . .	37
4.1.2	Polarizační stav dopadající vlny . . . . .	38
4.1.3	Pole v bi-periodické anizotropní mřížce . . . . .	40
4.1.4	Pole v homogenním anizotropním prostředí . . . . .	45
4.1.5	Pole v homogenním izotropním prostředí . . . . .	46
4.2	Maticová formulace řešení . . . . .	47
4.2.1	Charakteristická pole v bi-periodické mřížce . . . . .	47
4.2.2	Charakteristická pole v homogenním anizotropním prostředí . . . . .	47
4.2.3	Charakteristická pole v homogenním izotropním prostředí . . . . .	47

4.3	Podmínky spojitosti na rozhraních . . . . .	50
4.4	Dopadající, odražená a prošlá vlna . . . . .	51
4.5	Anizotropní bi-periodické multivrstvy . . . . .	53
4.6	Jednoduchá vrstva na nemagnetickém substrátu . . . . .	53
4.6.1	Polární Kerrův jev při kolmém dopadu . . . . .	54
4.6.2	Longitudinální Kerrův jev . . . . .	55
<b>5</b>	<b>Experimentální metody měření Kerrova jevu</b>	<b>57</b>
5.1	Základní principy experimentálních metod . . . . .	57
5.2	Metoda modulace azimutu . . . . .	59
5.2.1	Modulační cela . . . . .	59
5.2.2	Synchronní detekce . . . . .	60
5.2.3	Kompenzační cela a zpětnovazební smyčka . . . . .	61
5.3	Magnetooptický spektrometr . . . . .	63
5.4	Kalibrační procedura . . . . .	67
<b>6</b>	<b>Studované vzorky</b>	<b>69</b>
6.1	Struktura $La_{2/3}Sr_{1/3}MnO_3$ a jeho základní fyzikální vlastnosti . . . . .	69
6.1.1	Krystalografická struktura . . . . .	69
6.1.2	Elektronová struktura . . . . .	70
6.1.3	Výměnné interakce . . . . .	71
6.1.4	Efekty změny parametrů . . . . .	72
6.2	Pulzní laserová depozice . . . . .	72
6.3	Parametry studovaných vzorků . . . . .	75
<b>7</b>	<b>Experimentální výsledky a jejich diskuse</b>	<b>76</b>
7.1	Polární magnetizace . . . . .	76
7.2	Longitudinální magnetizace . . . . .	90
7.3	Vliv postdepozitních podmínek na spektra Kerrova jevu . . . . .	94
<b>8</b>	<b>Závěr</b>	<b>96</b>

**Název práce:** Magneto-optická spektroskopie tenkých vrstev perovskitů s kolosální magnetorezistencí

**Autor:** Martin Veis

**Katedra (ústav):** Fyzikální ústav Univerzity Karlovy

**Vedoucí diplomové práce:** Prof. Ing. Štefan Višňovský, DrSc.

**e-mail vedoucího:** visnov@karlov.mff.cuni.cz

**Abstrakt:** Magnetooptická spektra perovskitů s železitými kationty v oblasti od 2 do 6 eV se vyznačují bohatou strukturou a ostrými liniemi. Jejich elektrický odpor je vysoký. To je způsobeno existencí jediného typu kationtu s pěti elektronami na hladinách 3d, který se nalézá v centru kyslíkového oktaedru se sníženou symetrií. Náhrada železitých iontů ionty Mn s různou valencí mění radikálně elektrický odpor i krystalografickou symetrii a nutně musí nalézt odraz i v optických vlastnostech. Ty nebyly zatím na tenkých vrstvách připravených pulzní laserovou depozicí systematicky studovány. Diplomová práce je věnována magnetooptické spektroskopii tenkých vrstev v oblasti 1 až 5 eV v závislosti na tloušťce v mezích od 20 do 60 nm s cílem přispět novými poznatkami o elektronové struktuře těchto vrstev.

**Klíčová slova:** Kerrův magnetooptický jev,  $La_{2/3}Sr_{1/3}MnO_3$ , Pulzní laserová depozice

**Title:** Magneto - optical spectroscopy of perovskites thin films with colossal magnetoresistence

**Author:** Martin Veis

**Department:** Institute of Physics, Charles University

**Supervisor:** Prof. Ing. Štefan Višňovský, DrSc.

**Supervisor's e-mail address:** visnov@karlov.mff.cuni.cz

**Abstract:** Magneto-optical spectra of perovskites with ferric cations in region from 2 to 6 eV show rich structure and sharp lines. Their electric resistance is high. This is produced by only one type of cation with five 3d electrons, which is situated in the center of oxygen octahedron with lower symmetry. The substitution of ferric cations by manganese ions with mixed valence changes radically electric resistance, crystallography structure and optical properties. These properties haven't been study yet. Diploma thesis is focused on magneto - optic spectroscopy of thin films in region from 1 to 5 eV with dependence of thickness in region from 20 to 60 nm to explore electronic structure of these films.

**Keywords:** Magnetooptical Kerr effect,  $La_{2/3}Sr_{1/3}MnO_3$ , Pulsed laser deposition



# Seznam použitých symbolů

<b><math>E</math></b>	vektor intenzity elektrického pole
<b><math>D</math></b>	vektor elektrické indukce
<b><math>H</math></b>	vektor intenzity magnetického pole
<b><math>B</math></b>	vektor magnetické indukce
<b><math>M</math></b>	vektor magnetizace
$\delta$	fázový rozdíl
$c$	rychlosť světla ve vakuu = $2.998 \times 10^8$ m/s
$e$	základ přirozených logaritmů
$i$	imaginární jednotka
$\epsilon$	úhel elipticity polarizačního stavu
$\theta$	azimut elipsy polarizace
$e$	elipticita
$\epsilon_K$	Kerrova elipticita
$\theta_K$	Kerrova rotace
$\lambda$	vlnová délka světla ve vakuu
$\varepsilon_0$	permitivita vakuu = $\frac{10^7}{4\pi c^2}$ F/m
$\mu_0$	permeabilita vakuu = $4\pi \times 10^{-7}$ H/m
$\chi$	komplexní parametr polarizace
$\omega$	kruhová frekvence elektromagnetické vlny
$\gamma$	vlnový vektor rovinné elektromagnetické vlny
$\varepsilon$	tenzor permitivity
$K_{ijk}$	složky lineárního magnetooptického tenzoru
$G_{ijkl}$	složky kvadratického magnetooptického tenzoru
<b><math>J</math></b>	Jonesův vektor
<b><math>J_X, J_Y</math></b>	bázové vektory kartézských polarizací
<b><math>J_L, J_R</math></b>	bázové vektory kruhových polarizací
<b><math>T</math></b>	Jonesova matice optického prvku
<b><math>S</math></b>	Jonesova matice reflexe
$\nabla$	diferenciální operátor "nabla"
$\Re$	reálná část
$\Im$	imaginární část
$\dagger$	Hermitovské sdružení
<b><math>F_{a \rightarrow b}</math></b>	matice přechodu ze souřadné soustavy $a$ do soustavy $b$
$N$	komplexní index lomu
$\hat{\varepsilon}$	komplexní permitivita

$\sigma$	vodivost
$n$	reálný index lomu
$k$	extinční koeficient (index absorbce)
$\alpha_A$	absorbční koeficient
$\delta_p$	penetrační hloubka
$R$	reflektivita
$r$	reflexní koeficient
$\omega_c$	cyklotronová frekvence
$\Gamma$	útlumový člen
$\chi$	tenzor dielektrické susceptibility
$H$	Hamiltonián kvantového systému
$D^{(n)}$	Yehova dynamická matice n-té vrstvy
$P^{(n)}$	propagační matice pro n-tou vrstvu
$M$	matice struktury
$C$	citlivost měřící aparatury
$I$	intenzita světla (tok energie)

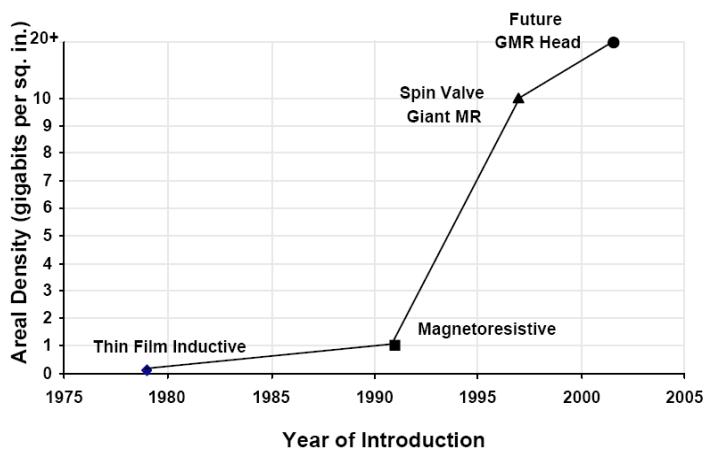
# Kapitola 1

## Úvod

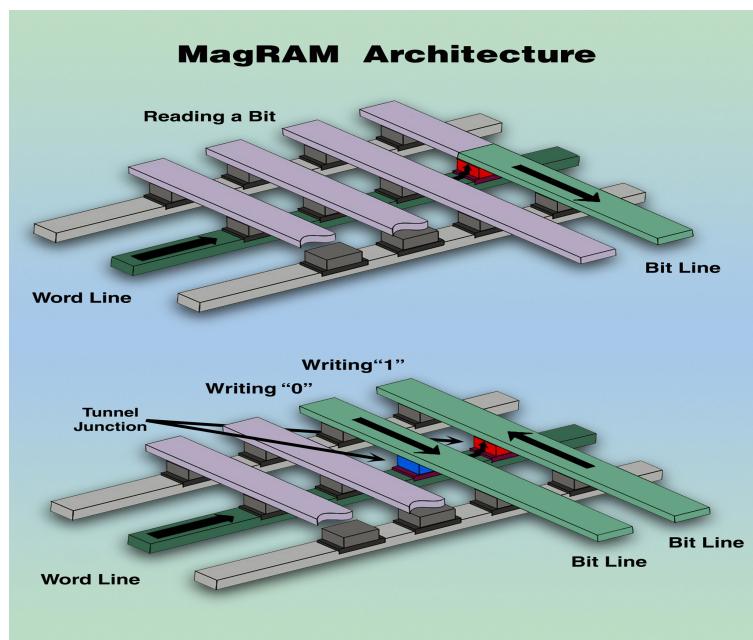
Objev vysokoteplotní supravodivosti ve sloučeninách mědi v minulém desetiletí znovu oživil vysoký zájem o magnetické oxidy. Od poloviny devadesátých let se hlavní výzkum soustředil na nové nízkodimenzionální magnetické oxidy jako jsou sloučeniny  $CuGeO_3$  [1], dvojdimenzionální magnety typu  $CaV_4O_9$  [2] a sloučeniny typů  $(Sr,Ca)_{14}Cu_{25}O_{41}$  [3]. Převážná část dnešního výzkumu se však zaměřuje na oxidy mangantu se smíšenou valencí, které vykazují přechody kov-nevodič doprovázené efektem kolosální magnetorezistence (CMR)[4, 5, 6, 7]. Tento efekt způsobuje velké změny elektrického odporu v závislosti na externím magnetickém poli.

Tyto oxidy mají bohaté fyzikální vlastnosti spjaté s elektron-fononovými a elektron-elektronovými interakcemi. Jejich strukturní, magnetické a transportní vlastnosti jsou spolu složitě svázány. Kromě toho efekty CMR a jevy spojené s metalickou fází s plně spinově polarizovaným vodivostním pásem jsou velice slibné pro potenciální aplikace. Díky větší efektivitě by zařízení založená na efektu CMR mohla nahradit v současné době užívané součástky využívající efektu obří magnetorezistence (GMR)[8]. Jedná se o senzory magnetického pole - například čtecí hlavy pevných disků a magnetických páskových médií, které umožňují snímat o řád vyšší hustotu záznamu než senzory založené na anizotropní magnetorezistivitě (viz obr. 1.1). Jiný obor aplikací, kde by se součástky založené na materiálech se CMR mohly uplatnit, jsou magnetické paměti MRAM (schéma takovéto paměti je znázorněno na obr. 1.2). Jejich nespornou výhodou je to, že nevyžadují stálé napájení a na rozdíl od pamětí typu FLASH je lze rychle a mnohonásobně přepisovat, a to bez použití vysokého napětí. Pro takovéto aplikace je však nutné zvládnout technologii a umět vyrobit velmi kvalitní vrstvy s přesně definovanými vlastnostmi a vynikajícím povrchem.

Historicky se perovskity se smíšenou valencí  $La_{1-x}M_xMnO_3$  ( $M = Ca, Sr, Ba$ ) začaly studovat v padesátých letech. A to jak experimentálně [11, 12], tak teoreticky [13, 14]. Experimenty byly prováděny na polykrystalických vzorcích a ukázaly antiferomagnetické



Obrázek 1.1: Vývoj hustoty záznamu v průběhu posledních desetiletí [9]



Obrázek 1.2: Schematické znázornění koncepce MRAM [10]

nevodivé chování sloučenin pro nízké koncentrace dopovádání  $x$  a feromagnetické kovové vlastnosti pro koncentrace  $x \approx \frac{1}{3}$ . Toto chování bylo již před tím vysvětleno teorií dvojité výměny [13, 14]. Od roku 1993 je převážná část zájmu soustředěna na oxidy se smíšenou valencí, a to především na manganity  $RE_{1-x}M_xMnO_3$  (RE = prvek vzácných zemin, M = Ca, Sr, Ba, Pb) s perovskitovou strukturou. Experimenty byly prováděny na polykrystalických vzorcích, monokrystalech a tenkých filmech. Fyzikální vlastnosti manganitů vykazujících CMR byly podrobně popsány např. v publikacích [15, 16].

Magnetooptických experimentů na sloučeninách  $La_{1-x}Sr_xMnO_3$  bylo provedeno poměrně málo. Polární Kerrův jev byl studován a diskutován Yamaguchim *a kol.* na monokrystalech [17], Popmou *a kol.* [18] na polykrystalických vzorcích a Fumagallim *a kol.* [19] a Choem *a kol.* [20] na tlustých vrstvách. Longitudinální spektra byla pouze publikována [21] a dosud nebyla diskutována.

Prvenství v oblasti magnetooptiky patří M. Faradayovi, který v roce 1845 pozoroval natočení směru kmitů lineárně polarizovaného světla při jeho průchodu sklem ve směru vnějšího magnetického pole. Podobný efekt, ale mnohem slabší a při odrazu na kovovém feromagnetickém zrcadle magnetovaném kolmo k povrchu pozoroval J. R. Kerr roku 1876. Tento jev dodnes nese jméno po svém objeviteli a je základem experimentální techniky, kterou jsme použili ke studiu našich vzorků.

Magnetooptická spektroskopie je jednou z experimentálních technik, kterou lze použít ke studiu elektronové struktury feromagnetik. Spektra Kerrova magnetooptického jevu v sobě zahrnují informaci o spinové polarizaci elektronů a o štěpení vzbuzených stavů. Magnetooptické experimenty nám poskytují výsledky, které lze korelovat nejen s optickými, ale také s magnetickými experimenty.

## Cíle diplomové práce

Cílem předkládané diplomové práce je experimentální určení magnetooptických vlastností tenkých vrstev perovskitů  $La_{2/3}Sr_{1/3}MnO_3$  na substrátu  $SrTiO_3$  a vypracování modelu optické interakce pro studované vzorky, na jehož základě lze navrhnout fyzikální interpretaci experimentálních výsledků.

## Experimentální metody

Při studiu vlastností vzorků bylo použito polární a longitudinální magnetooptické spektroskopie v intervalu energií fotonů 1.2 až 4.5 eV

## Teoretické metody

---

K interpretaci naměřených spekter bylo použito modelu optické interakce elektromagnetické vlny v anizotropním prostředí při polární a longitudinální magnetizaci [22]. Tento model vychází z obecnějšího formalismu difrakce elektromagnetické vlny na anizotropních bi-periodických dvojdimenzionálních mřížkách [23]. Na jeho základě jsme mohli analyzovat a ověřit hodnověrnost publikovaných magnetooptických spekter a spekter magneto-optických konstant objemového  $La_{2/3}Sr_{1/3}MnO_3$ . Všechny výpočty byly prováděny programem vytvořeným v programovacím jazyce MATLAB.

## Témata jednotlivých kapitol

Předkládaná diplomová práce je rozdělena do osmi kapitol.

V úvodu byla nastíněna problematika a motivace výzkumu, jehož součástí jsou i měření prováděná v naší laboratoři s výsledky uvedenými v této práci.

Vzhledem k tomu, že Kerrova magnetooptická spektroskopie je založena na měření změny polarizačního stavu vystupující vlny vůči vstupující, zabývá se kapitola 2. popisem polarizovaného světla pomocí Jonesova formalismu a komplexního parametru polarizace. Soustředili jsme se především na popis v kartézské a v kruhové bázi polarizací. Je uveden postup, jak vyjádřit vliv optických prvků na změnu polarizačního stavu procházející vlny. Tato kapitola má stěžejní význam, neboť na základě zde shrnutých výsledků provádíme analýzu funkce magnetooptického spektrometru. Pomocí výsledků z této kapitoly také počítáme magnetooptické parametry modelované struktury z reflexních koeficientů, které získáme z elektromagnetického modelu.

V kapitole 3. jsou uvedeny nejzákladnější a nejdůležitější vztahy mezi fyzikálními veličinami, které popisují materiál z hlediska optické interakce. Pozornost je věnována tvaru tenzoru permitivity a lineárního magnetooptického tenzoru v krystalech různých symetrií a pro původně izotropní prostředí vložené do magnetického pole s význačnou orientací vektoru magnetizace. Dále jsou zde uvedeny tři základní mikroskopické modely popisující optickou interakci s látkou vloženou do magnetického pole. Tyto modely nám umožnily kvalitativně interpretovat naměřená spektra Kerrova jevu.

Kapitola 4. pojednává o šíření elektromagnetické vlny v anizotropním prostředí. Z obecného formalismu difrakce elektromagnetické vlny na anizotropní bi-periodické 2D mřížce jsme přešli k Yehově formalismu popisujícímu šíření elektromagnetických vln v homogenních anizotropních prostředích. Na základě těchto modelů můžeme při znalosti prvků tenzoru permitivity materiálu spočítat spektra Kerrova polárního a longitudinálního jevu. Nebo naopak při znalosti diagonálních prvků tenzoru permitivity materiálu a spektra Kerrova jevu můžeme spočítat nediagonální prvky tenzoru permitivity (magnetooptické konstanty).

V kapitole 5. jsme se věnovali objasnění základních principů použité měřící apar-

tury pro spektroskopickou magnetooptickou elipsometrii, která byla použita ke stanovení spekter polárního a longitudinálního Kerrova jevu u studovaných vzorků.

Kapitola 6. je věnována popisu měřených vzorků a je zde uveden stručný přehled jejich základních fyzikálních vlastností.

V kapitole 7. jsou uvedeny a diskutovány naměřené i vypočítané výsledky, získané na tenkých vrstvách  $La_{2/3}Sr_{1/3}MnO_3$  na substrátu  $SrTiO_3$ . Tyto výsledky jsou porovnány s výsledky uváděnými v jiných publikacích.

Na závěr je třeba zdůraznit, že při měření a interpretaci naměřených spekter je nutné důsledně dodržovat zvolenou znaménkovou konvenci magnetooptických parametrů a tenzorových prvků popisujících vlastnosti materiálů, které tvoří zkoumaný systém. Ze zkušenosti je totiž známé, že záměna byť pouze jednoho znaménka vede k nesmyslným výsledkům a tím pádem i k nesprávné interpretaci experimentu. Z praktických důvodů volíme konvenci použitou v [24].

# Kapitola 2

## Polarizace světla

Protože je magnetooptická spektroskopie experimentální metodou založenou na měření změny polarizačního stavu světelné vlny způsobené odrazem na magnetovaném vzorku, je vhodné si nejprve objasnit základní pojmy a metody popisu polarizovaného světla.

Polarizace je obecnou vlastností všech příčných vln. K úplnému popisu světla jako elektromagnetického vlnění je zapotřebí čtyř vektorových veličin: intenzity elektrického pole  $\mathbf{E}$ , elektrické indukce  $\mathbf{D}$ , intenzity magnetického pole  $\mathbf{H}$  a magnetické indukce  $\mathbf{B}$ . Při interakci elektromagnetické vlny s látkou se uplatňuje převážně elektrická složka vlny, volíme proto popis polarizačního stavu vlny pomocí vektoru intenzity elektrického pole  $\mathbf{E}$ . Pokud popíšeme polarizaci pomocí vektoru  $\mathbf{E}$ , můžeme zbylé tři veličiny spočítat z Maxwellových rovnic a materiálových vztahů. V této kapitole pak dále budeme uvažovat čistě monochromatické světlo v bezztrátovém prostředí.

### 2.1 Základní pojmy

Pro monochromatické světlo je časová závislost vektoru intenzity elektrického pole čistě sinusoidální. V libovolném pevném bodě prostoru si můžeme harmonickou elektromagnetickou vlnu rozložit do tří lineárně nezávislých harmonických kmitů podél tří vzájemně ortogonálních směrů  $x, y$  a  $z$

$$\mathbf{E} = E_x \hat{\mathbf{x}} + E_y \hat{\mathbf{y}} + E_z \hat{\mathbf{z}}, \quad (2.1)$$

přičemž

$$E_i = E_{0i} \cos(\omega t - \gamma r + \delta_i), \quad i = x, y, z. \quad (2.2)$$

Z těchto rovnic plyne [25], že koncový bod vektoru  $\mathbf{E}$  opisuje elipsu. Uvažujme nyní elektromagnetickou vlnu šířící se ve směru osy  $z$ . Za těchto předpokladů přejde soustava

rovníc na

$$\begin{aligned} E_x &= E_{0x} \cos(\vartheta + \delta_x) , \\ E_y &= E_{0y} \cos(\vartheta + \delta_y) , \end{aligned} \quad (2.3)$$

kde jsme zavedli označení  $\vartheta = \omega t - \gamma r$ .

Pomocí součtových vzorců můžeme vztahy (2.3) přepsat do tvaru

$$\begin{aligned} \frac{E_x}{E_{0x}} &= \cos \delta_x \cos \vartheta - \sin \delta_x \sin \vartheta , \\ \frac{E_y}{E_{0y}} &= \cos \delta_y \cos \vartheta - \sin \delta_y \sin \vartheta . \end{aligned} \quad (2.4)$$

Po úpravě

$$\begin{aligned} \frac{E_x}{E_{0x}} \sin \delta_y - \frac{E_y}{E_{0y}} \sin \delta_x &= (\sin \delta_y \cos \delta_x - \sin \delta_x \cos \delta_y) \cos \vartheta = -\sin \delta \cos \vartheta , \\ \frac{E_x}{E_{0x}} \cos \delta_y - \frac{E_y}{E_{0y}} \cos \delta_x &= (\cos \delta_y \sin \delta_x - \cos \delta_x \sin \delta_y) \sin \vartheta = \sin \delta \sin \vartheta , \end{aligned} \quad (2.5)$$

kde jsme definovali

$$\delta = \delta_x - \delta_y . \quad (2.6)$$

Rovnice (2.5) umocníme na druhou a sečteme

$$\left( \frac{E_x}{E_{0x}} \right)^2 - 2 \frac{E_x E_y}{E_{0x} E_{0y}} \cos \delta + \left( \frac{E_y}{E_{0y}} \right)^2 = \sin^2 \delta . \quad (2.7)$$

Výsledná rovnice (2.7) je rovnicí elipsy. Úplně polarizované světlo je tedy obecně elipticky polarizované, zavádí se tzv. elipsa polarizace (obr. 2-1)

Parametry, které popisují elipsu polarizace definujeme při pohledu proti směru vlny jako:

- azimut  $\theta$  - úhel mezi hlavní osou elipsy a kladným směrem osy  $x$ . Orientaci osy  $x$  volíme proti směru pohybu hodinových ručiček.
- elipticita  $e$  - poměr délek vedlejší a hlavní poloosy elipsy

$$e = \frac{b}{a} , \quad (2.8)$$

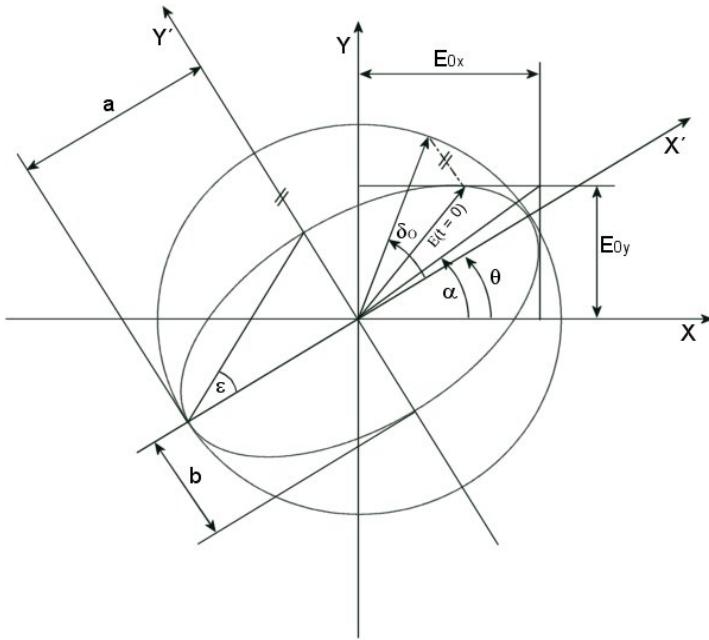
$-1 \leq e \leq 1$ , zavádí se také úhel ellipticity  $\epsilon$

$$e = \tan \epsilon , \quad (2.9)$$

$$-\frac{1}{4}\pi \leq \epsilon \leq \frac{1}{4}\pi$$

- Amplituda vlny  $A = \sqrt{a^2 + b^2}$
- absolutní fáze  $\delta_0$  - úhel mezi počáteční hodnotou vektoru  $\mathbf{E}$  v čase  $t = 0$  a hlavní osou elipsy.

Pro charakterizaci polarizačního stavu nám stačí znát azimut a elipticitu.



Obrázek 2.1: Elipsa polarizace.

### 2.1.1 Lineárně a kruhově polarizované světlo

Lineární a kruhově polarizované světlo je speciálním případem obecně polarizovaného světla. Tyto případy nastávají, je-li elipticitu rovna  $\pm 1$  pro kruhově polarizované světlo, resp. rovna 0 pro lineárně polarizované světlo.

## 2.2 Popis polarizovaného světla

K určení polarizačního stavu světla nám stačí znalost pouze dvou parametrů, je tedy výhodné popisovat polarizační stav v komplexní rovině. Ačkoliv existuje mnoho způsobů popisu polarizovaného světla, z nichž každý má své výhody i nevýhody, my se v této práci zaměříme na dva: popis pomocí Jonesových vektorů a komplexního parametru polarizace. Jejich výhody i nevýhody si ukážeme v následujících odstavcích. V dalších odstavcích se budeme omezovat na popis koherentního světla.

### 2.2.1 Jonesův formalismus

Předpokládejme úplně polarizovanou vlnu šířící se ve směru osy  $z$  popsanou rovnicemi (2.3). Výsledný vektor elektrické intenzity můžeme napsat ve tvaru

$$\mathbf{E}(z, t) = [E_{0x} \cos(\omega t - \gamma_z z + \delta_x)] \hat{\mathbf{x}} + [E_{0y} \cos(\omega t - \gamma_z z + \delta_y)] \hat{\mathbf{y}}, \quad (2.10)$$

kde  $E_{0x}$ ,  $E_{0y}$  jsou amplitudy harmonických kmitů ve směru osy  $\hat{x}$ , resp.  $\hat{y}$  a  $\delta_x$ ,  $\delta_y$  jsou jejich fáze.  $\hat{x}$ ,  $\hat{y}$  jsou jednotkové vektory ve směru kartézských os.

Výsledný vektor intenzity elektrického pole  $\mathbf{E}(z, t)$  daný rovnicí (2.10) si můžeme napsat jako sloupový vektor

$$\mathbf{E}(z, t) = \begin{bmatrix} E_{0x} \cos(\omega t - \gamma_z z + \delta_x) \\ E_{0y} \cos(\omega t - \gamma_z z + \delta_y) \end{bmatrix}. \quad (2.11)$$

Nyní využijeme komplexní symboliky a (2.11) přepíšeme do tvaru

$$\mathbf{E}(z, t) = \Re[\mathbf{E}(z)e^{i\omega t}], \quad (2.12)$$

kde

$$\mathbf{E}(z) = e^{-\gamma_z z} \mathbf{E}_{xy} \quad (2.13)$$

a

$$\mathbf{E}_{xy} = \begin{bmatrix} E_{0x} e^{i\delta_x} \\ E_{0y} e^{i\delta_y} \end{bmatrix}. \quad (2.14)$$

Vektor (2.14) se nazývá Jonesovým vektorem polarizované vlny. Intenzita elektromagnetické vlny  $I$  se s pomocí Jonesových vektorů dá zapsat jako

$$I = |E_x|^2 + |E_y|^2 = \mathbf{E}_{xy}^\dagger \mathbf{E}_{xy}, \quad (2.15)$$

kde  $\dagger$  značí hermitovské sdružení. Definujeme-li tzv. úhel polarizace  $\alpha$  vztahem

$$\tan \alpha = \frac{E_{0y}}{E_{0x}}, \quad (2.16)$$

pak s pomocí (2.16) a (2.6) můžeme Jonesův vektor (2.14) přepsat do tvaru

$$\mathbf{J}_{XY} = \begin{bmatrix} \cos \alpha \\ \sin \alpha e^{i\delta} \end{bmatrix}. \quad (2.17)$$

Vektor (2.17) se nazývá normovaným Jonesovým vektorem a platí

$$\mathbf{J}_{XY}^\dagger \mathbf{J}_{XY} = 1. \quad (2.18)$$

Souřadnice Jonesova vektoru vyjadřujeme vždy vůči nějaké bázi. V našem případě použijeme dvě báze ortonormálních vektorů:

- bázi lineárních polarizací ve směru kartézských os

$$\mathbf{J}_X = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \mathbf{J}_Y = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (2.19)$$

- bázi kruhových polarizací

$$\mathbf{J}_L = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ -i \end{bmatrix}, \mathbf{J}_R = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ i \end{bmatrix} \quad (2.20)$$

K transformaci mezi těmito vektory lze použít matic přechodu  $\mathbf{F}_{XY \rightarrow LR}$  a  $\mathbf{F}_{LR \rightarrow XY}$ . Přechod z báze lineárních polarizací do báze polarizací kruhových je dán vztahem

$$[\mathbf{J}_L, \mathbf{J}_R] = [\mathbf{J}_X, \mathbf{J}_Y] \mathbf{F}_{XY \rightarrow LR}. \quad (2.21)$$

Potom platí

$$\mathbf{F}_{XY \rightarrow LR} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -i & i \end{bmatrix}. \quad (2.22)$$

Opačně

$$\mathbf{F}_{LR \rightarrow XY} = \mathbf{F}_{XY \rightarrow LR}^{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & i \\ 1 & -i \end{bmatrix}. \quad (2.23)$$

V kartézské bázi můžeme vyjádřit obecně elipticky polarizovanou vlnu. Vyjdeme z Jonesova vektoru pro elipsu s úhlem ellipticity  $\epsilon$ ,  $\theta = 0$ ,  $\delta = 0$  [25] a aplikujeme na něj matici rotace o obecný úhel  $\theta$

$$\begin{bmatrix} \mathbf{J}_X \\ \mathbf{J}_Y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos \epsilon \\ i \sin \epsilon \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \theta \cos \epsilon - i \sin \theta \sin \epsilon \\ \sin \theta \cos \epsilon + i \cos \theta \sin \epsilon \end{bmatrix}. \quad (2.24)$$

Narozdíl od vektoru (2.17), který je určen tzv. vnitřními parametry polarizační elipsy  $\alpha$  a  $\delta$ , je vektor (2.24) určen tzv. vnějšími parametry polarizační elipsy. Mezi těmito dvojicemi parametrů se dají najít vztahy [26]

$$\tan 2\theta = \tan 2\alpha \cos \delta, \quad (2.25)$$

$$\sin 2\epsilon = \sin 2\alpha \sin \delta. \quad (2.26)$$

Vyjádření obecně elipticky polarizovaného světla v bázi kruhových polarizací získáme vynásobením (2.24) maticí přechodu  $\mathbf{F}_{XY \rightarrow LR}$  (2.22)

$$\begin{bmatrix} J_L \\ J_R \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -i & i \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos \theta \cos \epsilon - i \sin \theta \sin \epsilon \\ \sin \theta \cos \epsilon + i \cos \theta \sin \epsilon \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} (\cos \epsilon - \sin \epsilon)e^{i\theta} \\ (\cos \epsilon + \sin \epsilon)e^{-i\theta} \end{bmatrix}. \quad (2.27)$$

Jonesův vektor tedy zcela popisuje stav polarizace vlny. Udává všechny parametry polarizační elipsy. V magnetooptické spektroskopii nás zajímá pouze polarizační stav světla, který je plně popsán normovaným Jonesovým vektorem (2.17).

## 2.2.2 Komplexní parametr polarizace

Obecný Jonesův vektor (2.14) nese informaci o amplitudě vlny, její absolutní fázi, azimuatu a úhlu ellipticity. Pokud se zajímáme pouze o polarizační stav vlny, tedy pouze o azimut  $\theta$  a úhel ellipticity  $\epsilon$ , je vhodné zavést komplexní parametr polarizace  $\chi$ . Ten se zavádí jako podíl první a druhé složky Jonesova vektoru v dané bázi:

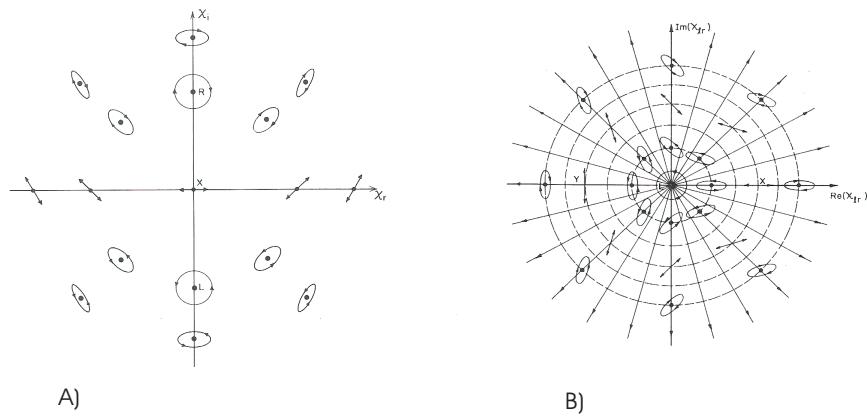
- kartézská báze

$$\chi_{XY} = \frac{J_Y}{J_X} = \frac{\sin \theta \cos \epsilon + i \sin \theta \cos \epsilon}{\cos \theta \cos \epsilon - i \sin \theta \sin \epsilon} = \frac{\tan \theta + i \tan \epsilon}{1 - i \tan \theta \tan \epsilon} \quad (2.28)$$

- báze kruhových polarizací

$$\chi_{LR} = \frac{J_R}{J_L} = \frac{(\cos \epsilon + i \sin \epsilon)e^{-i\theta}}{(\cos \epsilon - i \sin \epsilon)e^{i\theta}} = \frac{1 + i \tan \epsilon}{1 - i \tan \epsilon} e^{-2i\theta} = \tan\left(\frac{\pi}{4} + \epsilon\right) e^{-2i\theta} \quad (2.29)$$

Rovnice (2.28) a (2.29) ukazují, jak je obecně ellipticky polarizovaný stav světla s azimutem  $\theta$  a úhlem ellipticity  $\epsilon$  reprezentován jedním komplexním číslem. Protože každé komplexní číslo můžeme zobrazit v komplexní rovině, připadá každému bodu komplexní roviny určitý stav polarizace. Pro kartézskou a kruhově polarizovanou bázi je toto znázorněno na obr. 2.2



Obrázek 2.2: Znázornění polarizačních stavů v komplexní rovině v kartézské (A) a kruhové (B) bázi

Pomocí komplexního parametru polarizace můžeme jednoduše vyjádřit azimut  $\theta$  a úhel ellipticity  $\epsilon$ . Ze vztahu (2.28) dostaneme

$$\tan 2\theta = \frac{2\Re(\chi_{XY})}{1 - |\chi_{XY}|^2}, \quad (2.30)$$

$$\sin 2\epsilon = \frac{2\Im(\chi_{XY})}{1 + |\chi_{XY}|^2}, \quad (2.31)$$

pro kartézskou bázi. Velikost komplexního parametru polarizace v kruhové bázi  $|\chi_{LR}|$  je vyjádřena ze vztahu (2.29)

$$|\chi_{LR}| = \frac{1 + \tan \epsilon}{1 - \tan \epsilon}, \quad (2.32)$$

a jeho argument je

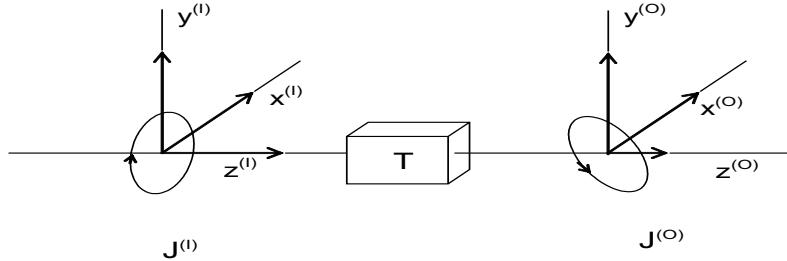
$$\arg(\chi_{LR}) = -2\theta. \quad (2.33)$$

Úpravou vztahů (2.32) a (2.33) dostaneme

$$\tan \epsilon = \frac{|\chi_{LR}| - 1}{|\chi_{LR}| + 1}, \quad (2.34)$$

$$\theta = -\frac{1}{2} \arg(\chi_{LR}). \quad (2.35)$$

### 2.2.3 Průchod polarizovaného světla optickými prvky



Obrázek 2.3: Transformace polarizace při průchodu světla polarizačním prvkem.

Průchod polarizovaného světla některými optickými prvky má za následek změnu polarizačního stavu vstupující vlny. V této části kapitoly bude naší snahou co nejjednodušejí takovýto jev popsat. Průchod polarizovaného světla jednoduchým optickým polarizačním systémem je znázorněn na obr. 2.3.

Vstupující vlna je popsána Jonesovým vektorem  $\mathbf{J}_I$  a je spjata s primární pravotočivou souřadnou soustavou  $(x, y, z)$ . Vystupující vlna je pak popsána Jonesovým vektorem  $\mathbf{J}_0$  a je spjata se sekundární souřadnou soustavou  $(x', y', z')$ . Souřadné systémy volíme tak, aby osy  $z$  a  $z'$  byly rovnoběžné s vlnovými vektory  $\gamma$  a  $\gamma'$ . Vztah mezi oběma polarizacemi pak můžeme vyjádřit transformací

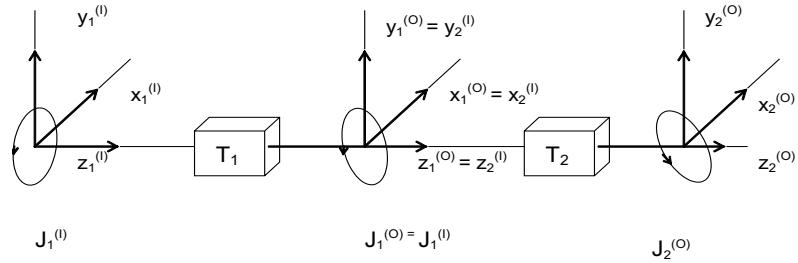
$$\mathbf{J}_0 = \mathbf{T} \mathbf{J}_I, \quad (2.36)$$

kde matici  $\mathbf{T}$  nazýváme Jonesovou maticí optického prvku.

Uvažujeme nyní případ dvou optických prvků zobrazený na obr. 2.4.

Za předpokladu, že  $\mathbf{J}_2^O = \mathbf{J}_2^I$  lze transformaci polarizací napsat

$$\mathbf{J}_2^O = \mathbf{T}_2 \mathbf{J}_1^O = \mathbf{T}_2 \mathbf{T}_1 \mathbf{J}_1^I. \quad (2.37)$$



Obrázek 2.4: Transformace polarizace při průchodu světla dvěma polarizačními prvky.

Matici soustavy dvou optických prvků pak můžeme napsat jako

$$\mathbf{T} = \mathbf{T}_2 \mathbf{T}_1 . \quad (2.38)$$

Analogicky za stejných předpokladů lze napsat matici soustavy  $N$  prvků

$$\mathbf{T} = \mathbf{T}_n \mathbf{T}_{n-1} \dots \mathbf{T}_1 . \quad (2.39)$$

Známe-li Jonesovu matici  $\mathbf{T}$  v bázi lineárních ortogonálních polarizací, můžeme přejít do báze kruhových polarizací působením matice přechodu

$$\mathbf{T}_{LR} = \mathbf{F}_{XY \rightarrow LR}^{-1} \mathbf{T}_{XY} \mathbf{F}_{XY \rightarrow LR} . \quad (2.40)$$

Jonesovy matice základních optických prvků v bázi lineárních polarizací jsou:

- Lineární polarizátor svírající s osou  $\hat{x}$  úhel  $\varphi$

$$\mathbf{T} = \begin{bmatrix} \cos^2 \varphi & \cos \varphi \sin \varphi \\ \cos \varphi \sin \varphi & \sin^2 \varphi \end{bmatrix} \quad (2.41)$$

- Fázová destička (lineární retardér)

$$\mathbf{T} = \begin{bmatrix} e^{i\frac{\delta}{2}} & 0 \\ 0 & e^{-i\frac{\delta}{2}} \end{bmatrix} \quad (2.42)$$

- Stočení směru kmitů polarizovaného světla o úhel  $\xi$

$$\mathbf{T} = \begin{bmatrix} \cos \xi & -\sin \xi \\ \sin \xi & \cos \xi \end{bmatrix} \quad (2.43)$$

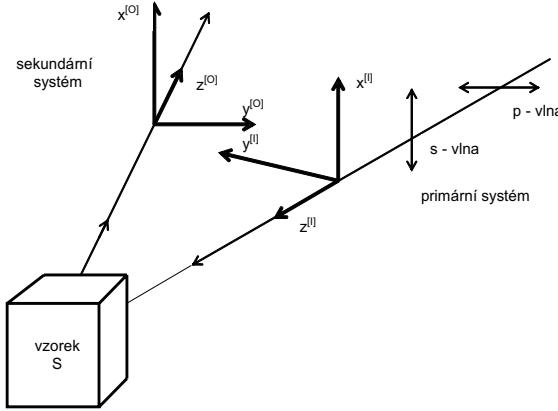
Komplexní parametr prošlé vlny můžeme vyjádřit pomocí prvků Jonesovy matice  $\mathbf{T}$  vztahem

$$\chi^T = \frac{T_{21} + T_{22}\chi^I}{T_{11} + T_{12}\chi^I} , \quad (2.44)$$

kde  $T_{21}, T_{22}, T_{11}, T_{12}$  jsou prvky Jonesovy matice a  $\chi^I$  je komplexní parametr polarizace vstupující vlny.

### 2.2.4 Definice magnetooptických parametrů

Uvažujme nyní situaci znázorněnou na obr. 2.5. Na vzorek dopadá lineárně polarizované světlo pod úhlem  $\varphi$ .



Obrázek 2.5: Volba souřadných systémů dopadající a odražené elektromagnetické vlny při popisu magnetooptických vlastností vzorku S.

Pokud je vzorek umístěn v magnetickém poli, lineárně polarizované světlo se po odrazu stává elipticky polarizovaným. Takovýto odraz můžeme popsat Jonesovou maticí reflexe. V bázi lineárních polarizací  $s$  a  $p$  má tato matice tvar [24]

$$\mathbf{S}^{sp} = \begin{bmatrix} r_{ss} & r_{sp} \\ r_{ps} & r_{pp} \end{bmatrix}. \quad (2.45)$$

Prvky  $\mathbf{S}^{sp}$   $r_{ss}$ ,  $r_{pp}$  jsou Fresnellovovy reflexní koeficienty pro dané polarizace.

Nyní si můžeme definovat [24] magnetooptické parametry: Kerrovu rotaci  $\theta_K$  a Kerrovu ellipticitu  $\epsilon_K$  vztahy:

- dopadající s - vlna:

$$\theta_K - i\epsilon_K \stackrel{\text{def}}{\approx} -\frac{r_{ps}}{r_{ss}} \quad (2.46)$$

- dopadající p - vlna:

$$\theta_K - i\epsilon_K \stackrel{\text{def}}{\approx} \frac{r_{sp}}{r_{pp}} \quad (2.47)$$

Pokud světlo dopadá na polárně magnetovaný vzorek v kolmém směru, systém má cylindrickou symetrii. Reflexní matice musí být proto invariantní vůči natočení primárního i sekundárního souřadného systému ve stejném směru o stejný úhel  $\theta$  kolem osy  $z$  resp.  $z'$ . Musí být tedy splněno

$$\mathbf{R}(\theta)\mathbf{S}^{XY}\mathbf{R}(\theta) = \mathbf{S}^{XY}, \quad (2.48)$$

kde  $\mathbf{R}(\theta)$  je matici rotace. Pokud  $\mathbf{S}^{XY}$  vyhovuje podmínce (2.48) splňují její prvky relace

$$r_{ss} = -r_{pp} , \quad (2.49)$$

$$r_{sp} = r_{ps} , \quad (2.50)$$

a reflexní matice  $\mathbf{S}^{XY}$  má tvar

$$\mathbf{S}^{XY} = \begin{bmatrix} r_{ss} & r_{ps} \\ r_{ps} & -r_{ss} \end{bmatrix} . \quad (2.51)$$

Z těchto vztahů a definic (2.46) a (2.47) je patrné, že nemá smysl definovat  $s$  a  $p$  dopadající polarizaci, neboť všechny lineární polarizace dopadající kolmo na vzorek jsou si ekvivalentní. Pomocí vztahu (2.40) můžeme přejít do báze kruhových polarizací. Jonesova reflexní matice má potom tvar

$$\mathbf{S}^{LR} = \begin{bmatrix} 0 & r_{ss} + ir_{ps} \\ r_{ss} - ir_{ps} & 0 \end{bmatrix} . \quad (2.52)$$

Zavedeme označení

$$r^+ = r_{ss} + ir_{ps} , \quad (2.53)$$

$$r^- = r_{ss} - ir_{ps} . \quad (2.54)$$

Z definice magnetooptických parametrů můžeme vyjádřit komplexní Kerrův jev v polární geometrii při kolmém dopadu pomocí  $r^+$  a  $r^-$

$$\theta_K - i\epsilon_K = \frac{r_{ps}}{r_{ss}} = i \frac{r^+ - r^-}{r^+ + r^-} . \quad (2.55)$$

S pomocí vztahu (2.44) můžeme vyjádřit komplexní parametr polarizace odražené vlny

$$\chi_{LR}^O = \frac{r^-}{r^+} (\chi_{LR}^I)^{-1} . \quad (2.56)$$

Definujeme-li [24]

$$\chi_{LR}^K = \frac{r^-}{r^+} , \quad (2.57)$$

jako magnetooptický parametr polarizace, lze potom jednoduše napsat

$$\chi_{LR}^O = \frac{\chi_{LR}^K}{\chi_{LR}^I} . \quad (2.58)$$

$\chi_{LR}^K$  ve skutečnosti není nic jiného než komplexní parametr polarizace odražené vlny, když dopadající vlna je lineárně polarizovaná ve směru osy  $x$ . Pokud platí  $\chi_{LR}^I = 1$  (lineárně polarizované světlo ve směru osy  $x$ ) s pomocí (2.34) a (2.36) odvodíme vztahy pro výpočet Kerrové rotace a ellipticity

$$\theta_K = \frac{1}{2} \arg(\chi_{LR}^K) , \quad (2.59)$$

$$\tan \epsilon_K = \frac{|\chi_{LR}^K| - 1}{|\chi_{LR}^K| + 1} . \quad (2.60)$$

# Kapitola 3

## Optické interakce a vlastnosti pevných látek

Předmětem této kapitoly je zavedení fyzikálních veličin potřebných k popisu optických vlastností pevných látek. Až tyto veličiny zavedeme, odvodíme si základní vztahy, které mezi nimi platí. Polohy maxim a minim magnetooptických spekter nejsou přímo svázány s elektronovými přechody v látce. Informaci o těchto jevech však nesou složky tenzoru permitivity, resp. elektrické susceptibility, které se dají ze spekter Kerrova jevu vypočítat. V závěru této kapitoly se proto budeme zabývat mikroskopickými modely, pomocí nichž lze popsat interakce elektromagnetické vlny s pevnou látkou, a tím interpretovat spektra složek tenzorů permitivity, resp. susceptibility.

### 3.1 Materiálové veličiny a jejich vzájemné vztahy

Uvažujeme obecně absorbující izotropní homogenní materiál. Vyjdeme ze soustavy Maxwellových rovnic

$$\nabla \times \mathbf{E} + \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = 0 , \quad (3.1)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} - \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} - \sigma \mathbf{E} = 0 , \quad (3.2)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = 0 , \quad (3.3)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 . \quad (3.4)$$

Působením vektorového operátoru rotace na rovnici (3.1), použitím vektorové identity

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{E}) = \nabla(\nabla \cdot \mathbf{E}) - \nabla^2 \mathbf{E} \quad (3.5)$$

a úpravami získáme rovnici

$$\nabla^2 \mathbf{E} - \mu_0 \epsilon \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} - \sigma \mu_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = 0 , \quad (3.6)$$

kde v souladu se zkušeností předpokládáme, že v oblasti optických frekvencí je permeabilita prostředí rovna permeabilitě vakua, tudíž  $\mu_r = 1$ . Vodivost  $\sigma$  v rovnici (3.6) se nazývá optická vodivost. Je tomu proto, že tato vodivost je spojena s absorbcí fotonů v látce po dopadu elektromagnetické vlny. Po dosazení předpokládaného řešení ve tvaru rovinné vlny

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 \exp[i(\omega t - \boldsymbol{\gamma} \cdot \mathbf{r})] \quad (3.7)$$

do rovnice (3.6) dostáváme vlastní hodnoty

$$\gamma^2 = \mu_0 \omega^2 (\varepsilon - i \frac{\sigma}{\omega}) . \quad (3.8)$$

Člen v závorce se označuje jako komplexní permitivita [27], [26]

$$\hat{\varepsilon} = \varepsilon_1 - i\varepsilon_2 = \varepsilon - i \frac{\sigma}{\omega} . \quad (3.9)$$

Vlnový vektor  $\boldsymbol{\gamma}$  uvažujeme komplexní (vlna musí být disipativní)

Nyní zavedeme komplexní index lomu vztahem

$$N^2 = (n - ik) = \hat{\varepsilon} , \quad (3.10)$$

kde  $n$  je reálný index lomu a  $k$  je extinční koeficient (některými autory [26] označován jako index absorbce). S pomocí definice komplexního indexu lomu a rovnice (3.8) získáme

$$\gamma^2 = \left( \frac{\omega}{c} \right)^2 N^2 = (n - ik)^2 \left( \frac{\omega}{c} \right)^2 = \omega^2 \mu_0 \hat{\varepsilon} . \quad (3.11)$$

Porovnáním vyplýne

$$\left( \varepsilon - i \frac{\sigma}{\omega} \right) = \varepsilon_0 (n - ik)^2 \quad (3.12)$$

a

$$N^2 = \mu_0 c^2 \left( \varepsilon - i \frac{\sigma}{\omega} \right) . \quad (3.13)$$

Dosadíme-li do výrazu pro rovinnou vlnu komplexní vlnový vektor vyjádřený pomocí komplexního indexu lomu, můžeme rovnici (3.7) přepsat do tvaru

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 \exp \left[ - \left( \frac{\omega}{c} \mathbf{k} \cdot \mathbf{r} \right) \right] \exp \left[ i \left( \frac{\omega}{c} \omega t - \mathbf{n} \cdot \mathbf{r} \right) \right] . \quad (3.14)$$

První člen rovnice (3.14) popisuje útlum amplitudy s postupným pronikáním do prostředí s absorbcí. Definujeme proto absorbční koeficient  $\alpha$  jako [27]

$$\alpha_A = - \frac{1}{I} \frac{dI}{dr} . \quad (3.15)$$

Vyhádřením získáme

$$\alpha_A = 2 \frac{\omega k}{c} = \frac{4\pi k}{\lambda} . \quad (3.16)$$

Zde  $\lambda$  je vlnová délka elektromagnetické vlny ve vakuu. Můžeme si také definovat penetrační hloubku, jako vzdálenost, ve které klesne amplituda dopadajícího záření na  $\frac{1}{e}$ . Z (3.14) potom jednoduše plyne

$$\delta_p = \frac{4\pi k}{\lambda} . \quad (3.17)$$

Druhý člen rovnice (3.14) popisuje šíření světelné vlny s fázovou rychlostí  $\frac{v}{c}$  v prostředí s reálným indexem lomu  $n$ . Při odvození vzájemných vztahů mezi složkami komplexního indexu lomu, permitivitou a vodivostí vyjdeme z rovnic (3.9) a (3.10).

Tedy

$$N^2 = (n - ik)^2 = n^2 - 2ink - k^2 = \varepsilon - i\frac{\sigma}{\omega} . \quad (3.18)$$

Potom nutně platí

$$n^2 - k^2 = \varepsilon = \varepsilon_1 \quad (3.19)$$

a

$$2nk = \frac{\sigma}{\omega} = \varepsilon_2 . \quad (3.20)$$

Odtud lze snadno odvodit vztahy

$$n^2 = \frac{1}{2} \left( \sqrt{\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2} + \varepsilon_1 \right) , \quad k^2 = \frac{1}{2} \left( \sqrt{\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2} - \varepsilon_1 \right) . \quad (3.21)$$

z rovnic (3.19) a (3.20) je zjevné, že  $\varepsilon_1$  a  $\varepsilon_2$  stejně jako  $n$  a  $k$  nejsou navzájem nezávislé veličiny, ale jsou svázány tzv. Kramers-Kronigovými disperzními relacemi [27],[28]

$$\varepsilon_1(\omega) - 1 = \frac{2}{\pi} P \int_0^\infty \frac{\omega' \varepsilon_2(\omega')}{(\omega')^2 - \omega^2} d\omega' , \quad (3.22)$$

$$\varepsilon_2(\omega) = -\frac{2\omega}{\pi} P \int_0^\infty \frac{[\varepsilon_1(\omega') - 1]}{(\omega')^2 - \omega^2} d\omega' , \quad (3.23)$$

kde  $P$  značí integrál ve smyslu hlavní hodnoty. Pro  $n$  a  $k$  se dají odvodit analogické vztahy.

Existuje mnoho způsobů jak získat optické konstanty  $\varepsilon_1$  a  $\varepsilon_2$  materiálu. Jedním z nejjednodušších a nejrozšířenějších je měření reflektivity vzorku při kolmém dopadu za použití disperzních relací. Z tohoto důvodu jsou důležité rovnice svazující optické konstanty s reflektivitou materiálu. Ta je při kolmém dopadu dána vztahem

$$R(\omega) = \hat{r}(\omega) \hat{r}^*(\omega) , \quad (3.24)$$

kde

$$\hat{r}(\omega) = \frac{n - 1 + ik}{n + 1 + ik} = \rho(\omega) e^{i\theta(\omega)} \quad (3.25)$$

je amplitudový reflexní koeficient. Reflektivitu potom můžeme vyjádřit jako

$$R(\omega) = \rho^2(\omega) . \quad (3.26)$$

Fáze  $\theta(\omega)$  a reflektivita  $R(\omega)$  jsou opět svázány Kramers-Kronigovými relacemi [27]

$$\ln R(\omega) = \frac{2}{\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\theta(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega' , \quad (3.27)$$

$$\theta(\omega) = -\frac{1}{2\pi} P \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\ln \rho(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega' . \quad (3.28)$$

S pomocí uvedených rovnic je pak možno ze změřeného spektra reflektivity stanovit optické konstanty. Tento postup je detailněji popsán v [27].

## 3.2 Tenzor permitivity

Doposud jsme se při výpočtech a úvahách omezovali na čistě izotropní prostředí. Pokud ale začneme brát v úvahu prostředí anizotropní, nabývá skalární permitivity (i jiné materiálové veličiny uvedené výše) tenzorového charakteru. Výše odvozené vztahy potom platí pro jednotlivé složky tenzorů. Pro naše potřeby budeme materiál popisovat pomocí tenzoru permitivity. Uvažujme případ libovolného prostředí vloženého do magnetického pole charakterizovaného vektorem magnetizace  $\mathbf{M}$ . Za předpokladu, že je vliv magnetizace na tvar tenzoru permitivity malý [29, 30], můžeme napsat v kartézské reprezentaci jeho rozvoj do polynomu a omezit se pouze na několik prvních členů

$$\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ij}^{(0)} + \left[ \frac{\partial \varepsilon_{ij}}{\partial M_k} \right]_{\mathbf{M}=0} M_k + \frac{1}{2} \left[ \frac{\partial^2 \varepsilon_{ij}}{\partial M_k \partial M_l} \right]_{\mathbf{M}=0} M_k M_l + \dots = \varepsilon_{ij}^{(0)} + K_{ijk} M_k + G_{ijkl} M_k M_l , \quad (3.29)$$

kde  $\varepsilon_{ij}^{(0)} = \varepsilon_{ji}^{(0)}$  značí složky tenzoru permitivity bez přítomnosti magnetického pole,  $M_k$ ,  $M_l$  složky vektoru magnetizace a  $K_{ijk}$  resp.  $G_{ijkl}$  složky lineárního resp. kvadratického magnetooptického tenzoru. Uvážíme-li Onsagerův princip mikroskopické reverzibility [31] požadující současnou reverzaci času i vnějšího magnetického pole, platí

$$\varepsilon_{ij}(\mathbf{M}) = \varepsilon_{ji}(-\mathbf{M}) . \quad (3.30)$$

Ze vztahu (3.30) vyplývá pro tenzor permitivity lineární v  $M_k$

$$\varepsilon_{ij}^{(1)} = K_{ijk} M_k = -K_{jik} M_k = -\varepsilon_{ji}^{(1)} \quad (3.31)$$

a

$$K_{iik} = 0 , \quad K_{ijk} = -K_{jik} . \quad (3.32)$$

Pro složky tenzoru kvadratického získáme

$$\varepsilon_{ij}^{(2)} = G_{ijkl} M_k M_l = G_{ijkl} (-M_k) (-M_l) = \varepsilon_{ji}^{(2)} , \quad (3.33)$$

z čehož obdobně vyplývají relace

$$G_{ijkl} = G_{jikl} = G_{ijkl} = G_{jilk} . \quad (3.34)$$

Obecný vztah pro  $\varepsilon_{ij}^{(1)}$  tedy je

$$\begin{bmatrix} \varepsilon_{11}^{(1)} \\ \varepsilon_{22}^{(1)} \\ \varepsilon_{33}^{(1)} \\ \varepsilon_{23}^{(1)} \\ \varepsilon_{31}^{(1)} \\ \varepsilon_{12}^{(1)} \\ \varepsilon_{32}^{(1)} \\ \varepsilon_{13}^{(1)} \\ \varepsilon_{21}^{(1)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} K_{111} & K_{112} & K_{113} \\ K_{221} & K_{222} & K_{223} \\ K_{331} & K_{332} & K_{333} \\ K_{231} & K_{232} & K_{233} \\ K_{311} & K_{312} & K_{313} \\ K_{121} & K_{122} & K_{123} \\ K_{321} & K_{322} & K_{323} \\ K_{131} & K_{132} & K_{133} \\ K_{211} & K_{212} & K_{213} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} M_1 \\ M_2 \\ M_3 \end{bmatrix} . \quad (3.35)$$

Obdobně pro  $\varepsilon_{ij}^{(2)}$

$$\begin{bmatrix} \varepsilon_{11}^{(2)} \\ \varepsilon_{22}^{(2)} \\ \varepsilon_{33}^{(2)} \\ \varepsilon_{23}^{(2)} \\ \varepsilon_{31}^{(2)} \\ \varepsilon_{12}^{(2)} \\ \varepsilon_{32}^{(2)} \\ \varepsilon_{13}^{(2)} \\ \varepsilon_{21}^{(2)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} G_{1111} & G_{1122} & G_{1133} & G_{1123} & G_{1131} & G_{1112} & G_{1132} & G_{1113} & G_{1121} \\ G_{2211} & G_{2222} & G_{2233} & G_{2223} & G_{2231} & G_{2212} & G_{2232} & G_{2213} & G_{2221} \\ G_{3311} & G_{3322} & G_{3333} & G_{3323} & G_{3331} & G_{3312} & G_{3332} & G_{3313} & G_{3321} \\ G_{2311} & G_{2322} & G_{2333} & G_{2323} & G_{2331} & G_{2312} & G_{2332} & G_{2313} & G_{2321} \\ G_{3111} & G_{3122} & G_{3133} & G_{3123} & G_{3131} & G_{3112} & G_{3132} & G_{3113} & G_{3121} \\ G_{1211} & G_{1222} & G_{1233} & G_{1223} & G_{1231} & G_{1212} & G_{1232} & G_{1213} & G_{1221} \\ G_{3211} & G_{3222} & G_{3233} & G_{3223} & G_{3231} & G_{3212} & G_{3232} & G_{3213} & G_{3221} \\ G_{1311} & G_{1322} & G_{1333} & G_{1323} & G_{1331} & G_{1312} & G_{1332} & G_{1313} & G_{1321} \\ G_{2111} & G_{2122} & G_{2133} & G_{2123} & G_{2131} & G_{2112} & G_{2132} & G_{2113} & G_{2121} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} M_1^2 \\ M_2^2 \\ M_3^2 \\ M_2 M_3 \\ M_3 M_1 \\ M_1 M_2 \\ M_3 M_2 \\ M_1 M_3 \\ M_2 M_1 \end{bmatrix} . \quad (3.36)$$

Pomocí vztahů (3.31) - (3.34) se však rovnice (3.35) a (3.36) značně zjednoduší

$$\begin{bmatrix} \varepsilon_{23}^{(1)} \\ \varepsilon_{12}^{(1)} \\ \varepsilon_{12}^{(1)} \\ \varepsilon_{32}^{(1)} \\ \varepsilon_{13}^{(1)} \\ \varepsilon_{21}^{(1)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} K_{231} & K_{232} & K_{233} \\ K_{311} & K_{312} & K_{313} \\ K_{121} & K_{122} & K_{123} \\ -K_{231} & -K_{232} & -K_{233} \\ -K_{311} & -K_{312} & -K_{313} \\ -K_{121} & -K_{122} & -K_{123} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} M_1 \\ M_2 \\ M_3 \end{bmatrix} \quad (3.37)$$

a

$$\begin{bmatrix} \varepsilon_{11}^{(2)} \\ \varepsilon_{22}^{(2)} \\ \varepsilon_{33}^{(2)} \\ \varepsilon_{23}^{(2)} \\ \varepsilon_{31}^{(2)} \\ \varepsilon_{12}^{(2)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} G_{1111} & G_{1122} & G_{1133} & 2G_{1123} & 2G_{1131} & 2G_{1112} \\ G_{2211} & G_{2222} & G_{2233} & 2G_{2223} & 2G_{2231} & 2G_{2212} \\ G_{3311} & G_{3322} & G_{3333} & 2G_{3323} & 2G_{3331} & 2G_{3312} \\ G_{2311} & G_{2322} & G_{2333} & 2G_{2323} & 2G_{2331} & 2G_{2312} \\ G_{2311} & G_{2322} & G_{2333} & 2G_{2323} & 2G_{2331} & 2G_{2312} \\ G_{2311} & G_{2322} & G_{2333} & 2G_{2323} & 2G_{2331} & 2G_{2312} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} M_1^2 \\ M_2^2 \\ M_3^2 \\ M_2 M_3 \\ M_3 M_1 \\ M_1 M_2 \end{bmatrix}. \quad (3.38)$$

V případě krystalu vloženého do magnetického pole vlastní a nevlastní rotace transformují složky tenzoru permitivity a magnetooptických tenzorů podle [32]

$$\varepsilon'_{ij} = a_{im} a_{jn} \varepsilon_{mn}, \quad (3.39)$$

$$K'_{ijk} = a_{im} a_{jn} a_{ko} K_{mno}, \quad (3.40)$$

$$G'_{ijkl} = a_{im} a_{jn} a_{ko} a_{lp} G_{mnop}. \quad (3.41)$$

Při popisu symetrie fyzikálních vlastností krystalů hrají důležitou roli tři obecné principy: Neumannův, Voightův a Curieův [33]

- Neumannův princip: Každá fyzikální vlastnost má symetrii stejnou nebo vyšší, než je symetrie bodové grupy krystalu.
- Voightův princip: Tenzor žádné fyzikální vlastnosti se nesmí měnit při jakémkoliv operaci grupy symetrie krystalu.
- Curieův princip: Krystal změní svoji bodovou symetrii pod vlivem vnějšího působení tak, že zachová pouze ty prvky symetrie, které jsou společné s prvky symetrie tohoto působení.

Tvar tenzoru permitivity v nemagnetických krystalech s uvážením předchozích fyzikálních principů vyplývá z rovnice (3.39). Volíme-li hlavní osu rotace rovnoběžnou s kartézskou osou  $\hat{z}$ , jsou tenzory permitivity pro různé krystalografické systémy následující [30]

- Triklinický systém:

$$\begin{bmatrix} \varepsilon_{11}^{(0)} & \varepsilon_{12}^{(0)} & \varepsilon_{31}^{(0)} \\ \varepsilon_{12}^{(0)} & \varepsilon_{22}^{(0)} & \varepsilon_{23}^{(0)} \\ \varepsilon_{31}^{(0)} & \varepsilon_{23}^{(0)} & \varepsilon_{33}^{(0)} \end{bmatrix}$$

- Monoklinický systém:

$$\begin{bmatrix} \varepsilon_{11}^{(0)} & \varepsilon_{12}^{(0)} & 0 \\ \varepsilon_{12}^{(0)} & \varepsilon_{22}^{(0)} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{33}^{(0)} \end{bmatrix}$$

- Ortorombický systém:

$$\begin{bmatrix} \varepsilon_{11}^{(0)} & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{22}^{(0)} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{33}^{(0)} \end{bmatrix}$$

- Tetragonální, trigonální a hexagonální systém:

$$\begin{bmatrix} \varepsilon_{11}^{(0)} & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{11}^{(0)} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{33}^{(0)} \end{bmatrix}$$

- Kubický systém:

$$\begin{bmatrix} \varepsilon_{11}^{(0)} & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_{11}^{(0)} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{11}^{(0)} \end{bmatrix}$$

Vzhledem k tomu, že se v této práci zabýváme Kerrovým magnetooptickým jevem, který je lineární v magnetizaci  $\mathbf{M}$ , omezíme se v následujícím výkladu pouze na vlastnosti lineárního magnetooptického tenzoru  $\mathbf{K}$  v různých krystalových systémech. Kvadratický tenzor je popsán např. v [32]. Tvar tenzoru  $\mathbf{K}$  získáme z rovnice (3.40) užitím příslušné operace symetrie bodové grupy krystalu. Auld a Wilson [34] při odvození tenzoru  $\mathbf{K}$  pro kubické krystaly ukázali, že pro tyto krystaly jsou lineární magnetooptické jevy izotropní. Pro jednotlivé krystalografické třídy jsou tvary tenzoru  $\mathbf{K}$  následující

- třída 1 =  $C_1$  a  $\bar{1} = C_i$  triklinického systému: Tenzor  $\mathbf{K}$  nabývá obecného tvaru jako v rovnici (3.37)
- třída 2 =  $C_2$ ,  $m = C_{1h}$  a  $2/m = C_{2h}$  monoklinického systému: Užitím operace rotace o úhel  $\pi$  okolo dvojčetné osy reprezentované maticí

$$C_{2z} = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad (3.42)$$

kde maticové elementy jsou koeficienty  $a_{im}$ ,  $a_{jn}$ ,  $a_{ko}$  v rovnici (3.40) dostaneme

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} K_{231} & K_{232} & 0 \\ K_{311} & K_{312} & 0 \\ 0 & 0 & K_{123} \\ -K_{231} & -K_{232} & 0 \\ -K_{311} & -K_{312} & 0 \\ 0 & 0 & -K_{123} \end{bmatrix}. \quad (3.43)$$

- Třídy  $222 = D_2$ ,  $mm2 = C_{2v}$  a  $mmm = D_{2h}$  ortorombického systému:

Příslušné matice operací symetrie jsou

$$C_{2x} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \quad (3.44)$$

a

$$C_{2y} = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}. \quad (3.45)$$

Podle předchozího postupu opět dostáváme tvar tenzoru  $\mathbf{K}$

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} K_{231} & 0 & 0 \\ 0 & K_{312} & 0 \\ 0 & 0 & K_{123} \\ -K_{231} & 0 & 0 \\ 0 & -K_{312} & 0 \\ 0 & 0 & -K_{123} \end{bmatrix}. \quad (3.46)$$

- Třídy  $4 = C_4$ ,  $\bar{4} = S_4$  a  $4/m = C_{4h}$  tetragonálního systému, třídy  $3 = C_3$  a  $\bar{3} = C_{3i}$  trigonálního systému a třídy  $6 = C_6$ ,  $\bar{6} = C_{3h}$  a  $6/m = C_{6h}$  hexagonálního systému:

Použití matice rotace o úhel  $\pm\varphi$  ( $\varphi = \frac{\pi}{2}, \frac{2\pi}{3}$  a  $\frac{\pi}{3}$ )

$$\mathbf{R} = \begin{bmatrix} \cos \varphi & -\sin \varphi & 0 \\ \pm \sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (3.47)$$

vede k

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} K_{231} & K_{232} & 0 \\ K_{311} & K_{312} & 0 \\ 0 & 0 & K_{123} \\ -K_{231} & -K_{232} & 0 \\ -K_{232} & -K_{231} & 0 \\ 0 & 0 & -K_{123} \end{bmatrix}. \quad (3.48)$$

- Třídy  $422 = D_4$ ,  $4mm = C_{4v}$ ,  $\bar{4}2m = D_{2d}$  a  $4/mmm = D_{4h}$  tetragonálního systému, třídy  $32 = D_3$ ,  $3m = C_{3v}$  a  $\bar{3}m = D_{3d}$  trigonálního systému a třídy  $D22 = D_6$ ,  $6mm = C_{6v}$ ,  $\bar{6}2m = D_{3h}$  a  $6/mmm = D_{6h}$  hexagonálního systému:

Operace rotace o úhel  $\pi$  okolo sekundární osy (dvojčetná osa kolmá na hlavní osu rotace) reprezentovaná maticí

$$C_{2x} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \quad (3.49)$$

zjednoduší výsledek (3.48) na

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} K_{231} & 0 & 0 \\ 0 & K_{312} & 0 \\ 0 & 0 & K_{123} \\ -K_{231} & 0 & 0 \\ 0 & -K_{231} & 0 \\ 0 & 0 & -K_{123} \end{bmatrix}. \quad (3.50)$$

- Všechny třídy kubického systému:

sečtením operace rotace

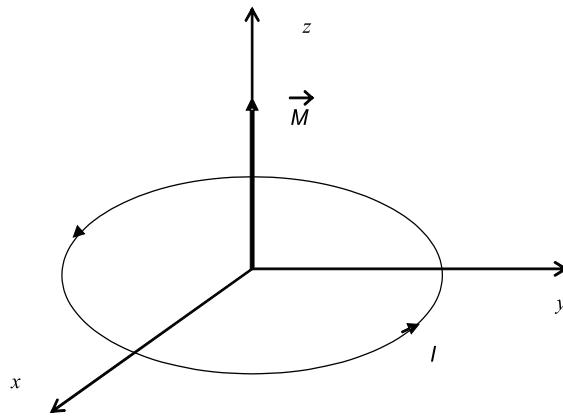
$$C_3 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (3.51)$$

s operacemi  $C_{2x}, C_{2y}$  a  $C_{2z}$  použitých v případě ortorombického systému získáme

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} K_{123} & 0 & 0 \\ 0 & K_{123} & 0 \\ 0 & 0 & K_{123} \\ -K_{123} & 0 & 0 \\ 0 & -K_{123} & 0 \\ 0 & 0 & -K_{123} \end{bmatrix}. \quad (3.52)$$

Doposud jsme uvažovali anizotropní krystal vložený do magnetického pole. Umělou anizotropii však můžeme indukovat i vložením původně izotropního prostředí do vnějšího magnetického pole. Potom podle Curieova principu je tenzor permitivity určen magnetickým polem, do něhož je látka vložena.

Uvažujme tedy homogenní magnetické pole s vektorem magnetizace ve směru osy  $\hat{z}$ . Grupa symetrie takového uspořádání je  $C_{\infty h}$  [35]. Můžeme si představit, že magnetické pole je generováno proudovou smyčkou o velkém průměru, která leží v rovině  $xy$  a protéká jí konstantní proud (obr. 3.1) Z obrázku 3.1 je zřejmé, že natočení souřadné soustavy okolo osy  $\hat{z}$  o libovolný úhel  $\varphi$  a zrcadlení podle roviny  $xy$  nezmění proud smyčkou, což odpovídá



Obrázek 3.1: Magnetizace buzená proudovou smyčkou

bodové grupě  $C_{\infty h}$ . Uvážením Voightova principu musí být tenzor invariantní vůči oběma operacím uvedené grupy symetrie. Tudíž

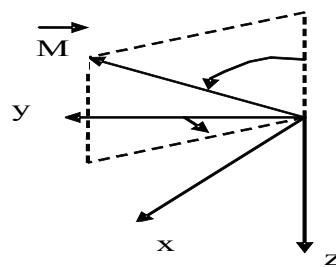
$$\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{M}) = \begin{bmatrix} \cos \varphi & \sin \varphi & 0 \\ -\sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & \pm 1 \end{bmatrix} \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{M}) \begin{bmatrix} \cos \varphi & \sin \varphi & 0 \\ -\sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & \pm 1 \end{bmatrix}. \quad (3.53)$$

Zde  $-1$  na diagonále odpovídá zrcadlení podle roviny  $xy$ . Rovnici (3.53) splňuje tenzor

$$\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{M}) = \begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} & 0 \\ -\varepsilon_{xy} & \varepsilon_{xx} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{zz} \end{bmatrix}. \quad (3.54)$$

Odvozený tvar tenzoru permitivity tedy platí pro speciální případ polární geometrie - vektor magnetizace je orientován kolmo k rovině vzorku.

Uvažujme nyní homogenní magnetické pole s obecně orientovaným vektorem magnetizace  $\mathbf{M}$  definovaným pomocí úhlů sférických souřadnic  $\theta_M$  a  $\phi_M$ . Tato situace je znázorněna na obr. 3.2.



Obrázek 3.2: Obecná orientace vektoru magnetizace

Tenzor permitivity v tomto případě nabývá tvaru[24]

$$\boldsymbol{\epsilon} = \begin{bmatrix} \epsilon_{xx} & \epsilon_{xy} \cos \theta_M & \epsilon_{xy} \sin \theta_M \cos \phi_M \\ -\epsilon_{xy} \cos \theta_M & \epsilon_{xx} & -\epsilon_{xy} \sin \theta_M \sin \phi_M \\ -\epsilon_{xy} \sin \theta_M \cos \phi_M & \epsilon_{xy} \sin \theta_M \sin \phi_M & \epsilon_{zz} \end{bmatrix}. \quad (3.55)$$

Odtud lze snadno odvodit tvar tenzoru permitivity pro longitudinální konfiguraci ( $\theta = 90^\circ$ ,  $\phi = 0^\circ$ )

$$\boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{M}) = \begin{bmatrix} \epsilon_{xx} & 0 & \epsilon_{xy} \\ 0 & \epsilon_{xx} & 0 \\ -\epsilon_{xy} & 0 & \epsilon_{zz} \end{bmatrix}. \quad (3.56)$$

Jelikož se  $\epsilon_{zz}$  od  $\epsilon_{xx}$  liší o malou veličinu druhého řádu v magnetizaci, tak pokud uvažujeme pouze lineární magnetooptické jevy, může napsat  $\epsilon_{zz} \approx \epsilon_{xx}$ . Tím se uváděné tvary tenzorů permitivity ještě více zjednoduší.

### 3.3 Mikroskopický popis optické interakce s magnetovaným prostředím

#### 3.3.1 Lorentzův model

Nejjednodušším mikroskopickým modelem je tzv. klasický Lorentzův model, který popisuje interakci izotropně elasticky vázané klasické nabité částice umístěné v homogenním a časově nezávislém magnetickém poli s polem elektromagnetické vlny. Částice - v našem případě elektron s nábojem  $e$  má konečnou relaxační dobu  $\tau$ .

Tento jednoduchý model nám poskytuje základní informace o spektrálních závislostech jednotlivých prvků tenzoru permitivity a s pomocí elektromagnetické teorie i o magneto-optických spektrech.

Hamiltonián elasticky vázané, nabité částice v magnetickém poli nezávislém na čase a souřadnicích a současně v poli elektromagnetické vlny má tvar [30]

$$H(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = \frac{1}{2m} [\mathbf{p} - q\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)]^2 + eU(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r}). \quad (3.57)$$

Zde

$$V(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}m\omega_0^2 r^2 \quad (3.58)$$

je centrální parabolický potenciál,  $m$ ,  $e$ ,  $\mathbf{r}$  a  $\mathbf{p}$  je hmotnost, náboj, polohový vektor a impulsní vektor částice a  $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$  a  $U(\mathbf{r}, t)$  jsou vektorový a skalární potenciál.

Uvážením Hamiltonových rovnic

$$\frac{\partial q_i}{\partial t} = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad (3.59)$$

$$\frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_i}, \quad (3.60)$$

zavedením fenomenologického útlumového členu

$$\Gamma \frac{d\mathbf{r}}{dt} = \tau^{-1} \quad (3.61)$$

a úpravami dostaneme pohybovou rovnici [30]

$$m \frac{\partial^2 \mathbf{r}}{\partial t^2} + m\Gamma \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial t} + m\omega_0^2 \mathbf{r} - e \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial t} \times \mathbf{B}_E = e E_0 e^{i\omega t}. \quad (3.62)$$

Nechme nyní působit externí magnetické pole proti směru osy  $z$

$$\mathbf{B}_E = (0, 0, -B_z). \quad (3.63)$$

Rozepsáním rovnice (3.62) pro jednotlivé kartézské složky získáme

$$\frac{\partial^2 x}{\partial t^2} + \Gamma \frac{\partial x}{\partial t} + \omega_0^2 x - \omega_c \frac{\partial y}{\partial t} = E_{0x} \frac{e}{m} e^{i\omega t}, \quad (3.64)$$

$$\frac{\partial^2 y}{\partial t^2} + \Gamma \frac{\partial y}{\partial t} + \omega_0^2 y + \omega_c \frac{\partial x}{\partial t} = E_{0y} \frac{e}{m} e^{i\omega t}, \quad (3.65)$$

$$\frac{\partial^2 z}{\partial t^2} + \Gamma \frac{\partial z}{\partial t} + \omega_0^2 z = E_{0z} \frac{e}{m} e^{i\omega t}, \quad (3.66)$$

kde jsme zavedli tzv. cyklotronovou frekvenci vztahem

$$\omega_c = -\frac{eB_z}{m}. \quad (3.67)$$

Řešení rovnice (3.66) hledáme ve tvaru

$$z = z_0 e^{i\omega t}. \quad (3.68)$$

Po dosazení takového řešení do rovnice (3.66) získáváme

$$z = \frac{\frac{eE_{0z} e^{i\omega t}}{m}}{(\omega_0^2 - \omega^2) + i\omega\Gamma}. \quad (3.69)$$

S uvážením [24]

$$\mathbf{P} = N e \mathbf{r} = \epsilon_0 \chi \mathbf{E} \quad (3.70)$$

a

$$\epsilon_{ij} = \chi_{ij} + \delta_{ij} = \frac{Ne}{\epsilon_0} \frac{\partial r_i}{\partial E_j} + \delta_{ij}, \quad (3.71)$$

kde  $\chi$  značí tenzor susceptibility,  $\mathbf{E}$  vnější elektrické pole,  $\mathbf{P}$  dipólový moment a  $N$  počet nabitéých částic v objemové jednotce, můžeme spočítat z (3.69)

$$\epsilon_{zz} = 1 + \frac{Ne^2}{m\epsilon_0} \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2 + i\Gamma\omega} = 1 + \omega_p^2 \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2 + i\Gamma\omega}, \quad (3.72)$$

což je známý vztah pro výpočet prvků tenzoru permitivity izotropního, absorbujejícího prostředí [27]. Externí magnetické pole  $\mathbf{B}_E$  však svazuje rovnice (3.64) a (3.65). Takovéto svažování pohybu ve směru kartézských os  $\hat{x}$  a  $\hat{y}$  je příčinou optické anizotropie vyjádřené prvky tenzoru permitivity

$$\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = 1 + \omega_p^2 \frac{\omega_0^2 - \omega^2 + i\Gamma\omega}{(\omega_0^2 - \omega^2 + i\Gamma\omega)^2 - \omega_c^2\omega^2}, \quad (3.73)$$

$$\varepsilon_{xy} = \varepsilon_{yx} = \omega_p^2 \frac{i\omega\omega_c}{(\omega_0^2 - \omega^2 + i\Gamma\omega)^2 - \omega_c^2\omega^2}, \quad (3.74)$$

$$\varepsilon_{xz} = \varepsilon_{zx} = \varepsilon_{yz} = \varepsilon_{zy} = 0. \quad (3.75)$$

Z rovnic (3.73) - (3.75) je vidět, že tenzor permitivity má tvar odpovídající požadavkům symetrie polární konfigurace a je v souladu s relacemi (3.30) vycházejícími z Onsagerova principu.

Pokud budeme předpokládat více než jeden elektron v atomu, můžeme stávající výsledky dále zobecnit. Nechť  $N_j$  je hustota elektronů vázaných s rezonanční frekvencí  $\omega_j$ , potom můžeme vztah (3.72) přepsat do tvaru

$$\varepsilon_{zz} = 1 + \frac{e^2}{m\varepsilon_0} \sum_j \frac{N_j}{\omega_0^2 - \omega^2 + i\Gamma\omega}, \quad (3.76)$$

kde

$$\sum_j N_j = N. \quad (3.77)$$

Obdobně bychom přepsali i ostatní předpisy pro prvky tenzoru permitivity. Pro nulové magnetické pole  $\omega_c \rightarrow 0$  se tenzor permitivity stává diagonální s prvky  $\varepsilon_{zz}$

### 3.3.2 Drudeho model

Drudeho model pro kovy je důsledek Lorentzova modelu pro nevodiče, pokud položíme  $\omega_0 = 0$ . To je ekvivalentní uvažované situaci, protože vodivostní elektrony v kovu nejsou vázány k atomu žádným potenciálem. Vlnová funkce pro volné elektrony je rozložena homogenně a rovnoměrně v celém kovu, pole působící na elektron je pouze střední hodnotou. Nemusíme proto uvažovat žádné korekce na lokální pole

Rovnice (3.72)-(3.74) v případě Drudeho modelu nabývají tvaru

$$\varepsilon_{zz} = 1 + \omega_p^2 \frac{1}{i\Gamma\omega - \omega^2}, \quad (3.78)$$

$$\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = 1 + \omega_p^2 \frac{i\Gamma\omega - \omega^2}{(i\Gamma - \omega^2)^2 - \omega_c^2\omega^2}, \quad (3.79)$$

a

$$\varepsilon_{xy} = -\varepsilon_{yx} = \omega_p^2 \frac{i\omega\omega_c}{(i\Gamma\omega - \omega^2)^2 - \omega_c^2\omega^2}. \quad (3.80)$$

Fyzikální původ tlumícího členu  $\Gamma$  pro kovy je dán rozptylem elektronů na poruchách, příměsích a tepelných kmitech mřížky a je spojený s elektrickým odporem. Dá se ukázat [27], že

$$\Gamma = \tau^{-1}, \quad (3.81)$$

kde  $\tau$  je doba mezi jednotlivými kolizemi. Vzhledem k tomu, že Drudeův model plyne přímo z modelu Lorentzova dosazením  $\omega_0 = 0$ , musí být optické vlastnosti kovu s volnými elektrony při  $\omega > 0$  podobné jako vlastnosti polovodičů a dielektrik při frekvencích  $\omega > \omega_0$ . Při těchto frekvencích se vázané elektrony dielektrika chovají podobně jako volné.

### 3.3.3 Polokvantový model

Pokud chceme uvážit spin a spin-orbitální vazbu, která je důležitá pro pochopení optické interakce při magnetickém uspořádání, musíme použít kvantový model. Nejrozšířenějším je poloklasická approximace popisující interakci klasické elektromagnetické vlny s kvantovým systémem. Jedním z jejích vyjádření je tzv. Kramersova-Heisenbergova formule [36, 37]. Důležité při interpretaci magnetooptických vlastností je zvolit vhodný kvantový systém, který modeluje reálný krystal. V praxi se hojně využívá metoda krystalového pole [38], ve které se reálný krystal nahradí mnohostěnem tvořeným anionty, v jejichž středu leží magnetický ion. Mnohostěny jsou tetraedry, nebo oktaedry přibližně kubické symetrie. Úplné zavedení polokvantového modelu a odvození příslušných vztahů pro výpočet tenzoru susceptibility je podrobně rozpracováno v [39], kde se vychází ze Shenovy práce [40]. Tento přístup je dostatečně obecný, neboť se neomezuje na tzv. dipólovou approximaci a je vhodný pro analýzu magnetooptických jevů v prostředí se sníženou symetrií. My se zde omezíme na shrnutí hlavních výsledků tohoto modelu (se zaměřením na 3d elektrony).

Stanovíme tenzor zobecněné susceptibility soustavy elektronů v potenciálovém poli jader za působení krystalového pole a statického magnetického pole. Jak již bylo zmíněno, vázaný elektron popisujeme kvantově, elektromagnetické pole naopak klasicky. Zavedením krystalového pole se nahrazuje vliv aniontů na elektron lokalizovaný převážně v blízkosti centrálního atomu. Vliv výměnného působení mezi spiny elektronů lokalizovaných u sousedících kationtů uvážíme fenomenologicky pomocí efektivního magnetického, tzv. výměnného pole. O tomto poli předpokládáme, že působí pouze na spinové magnetické momenty a nezávisí ani na čase ani na prostorové souřadnici.

Kvantově mechanický Hamiltonián elektronu v poli elektrostatického potenciálu  $V(\mathbf{R})$  za působení vnějšího magnetického pole a výměnného pole i pole elektromagnetické vlny

má tvar

$$H = \frac{1}{2m} [\mathbf{P} - q\mathbf{A}(\mathbf{R}, t)]^2 + V(\mathbf{R}) + qU(\mathbf{R}, t) - \frac{q}{m}\mathbf{S} \cdot \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{R}, t) + (2m^2c^2)^{-1}\mathbf{S} \times \nabla V(\mathbf{R}) \cdot [\mathbf{P} - q\mathbf{A}(\mathbf{R}, t)]. \quad (3.82)$$

Zde  $\mathbf{R}$  a  $\mathbf{P}$  jsou vektorové operátory souřadnice a impulsu elektronu,  $\mathbf{S}$  je vektorový operátor spinu a  $\mathbf{A}$  je vektorový potenciál

$$\mathbf{A}(\mathbf{R}, t) = \mathbf{A}_0(\mathbf{R}) + \mathbf{A}_{ex}(\mathbf{R}) + \mathbf{A}_1(\mathbf{R}, t), \quad (3.83)$$

kde

$$\mathbf{A}_0(\mathbf{R}) = -\frac{1}{2}\mathbf{R} \times \mathbf{B}_0 \quad (3.84)$$

a

$$\mathbf{A}_{ex}(\mathbf{R}) = -\frac{1}{2}\mathbf{R} \times \mathbf{B}_{ex} \quad (3.85)$$

jsou vektorové potenciály vnějšího magnetického pole a efektivního magnetického výměnného pole.  $\mathbf{A}_1$  je reálný vektorový potenciál elektromagnetické vlny s obecnou eliptickou polarizací. Pokud zvolíme kalibraci se skalárním potenciálem

$$U_1(\mathbf{R}, t) = 0, \quad (3.86)$$

můžeme celkový Hamiltonián (3.82) napsat jako superpozici

$$H = H_0 + H_1, \quad (3.87)$$

přičemž

$$H_0 = \frac{1}{2m}(\mathbf{P} - q\mathbf{A}_0)^2 + V(\mathbf{R}) - \frac{q}{m}\mathbf{S} \cdot \nabla \times (\mathbf{A}_0 + \mathbf{A}_{ex}) + \frac{1}{2m^2c^2}[\mathbf{S} \times \nabla V(\mathbf{R})] \cdot (\mathbf{P} - q\mathbf{A}_0). \quad (3.88)$$

Potenciál  $V(\mathbf{R})$  zahrnuje dominující kulově symetrickou složku, kubické krystalové pole, popř. krystalové pole nižší symetrie. Zanedbáváme vliv anizotropie krystalového pole na spin - orbitální vazbu.

Bez vlivu elektromagnetické vlny dostáváme

$$H_0|u_a\rangle = E_a|u_a\rangle, \quad (3.89)$$

kde  $|u_a\rangle$  a  $E_a$  jsou vlastní funkce a energie  $H_0$ . Důsledkem vlivu elektromagnetické vlny je porucha  $H_1$

$$H_1 = -\frac{1}{2m}q[\mathbf{A}_1 \cdot (\mathbf{P} - q\mathbf{A}_0) + (\mathbf{P} - q\mathbf{A}_0) \cdot \mathbf{A}_1] - \frac{q}{2m^2c^2}[\mathbf{S} \times \nabla V(\mathbf{R})] \cdot \mathbf{A}_1 + \frac{q^2}{2m}\mathbf{A}_1^2. \quad (3.90)$$

Zavedením formalismu matice hustoty [41], pomocí definic zobecněného tenzoru susceptibility a operátoru proudové hustoty dostaneme úpravami pro tenzor zobecněné susceptibility  $N$  systémů v objemové jednotce vztah [39]

$$\chi_{ij}(\omega, \mathbf{k}) = \frac{Nq^2}{2\varepsilon_{vac}m\omega^2} \times \\ \times \left[ \sum_a (-\rho_{aa})\delta_{ij} + \sum_{a,b} \frac{\rho_{aa}}{m\hbar} \left[ \frac{\langle u_a | Q_i^- | u_b \rangle \langle u_b | Q_j^+ | u_a \rangle}{\omega_{ab} - \omega - i\gamma_{ba}} + \frac{\langle u_b | Q_i^- | u_a \rangle \langle u_a | Q_j^+ | u_b \rangle}{\omega_{ba} + \omega + i\gamma_{ba}} \right] \right]. \quad (3.91)$$

Po uvážení dipólové approximace ( $\mathbf{k} = 0$ ) dostáváme výsledný vztah pro prvky tenzoru susceptibility jako funkce frekvence elektromagnetického záření

$$\chi_{ij}^{ED}(\omega) = \sum_{a,b} \frac{Nq^2 \rho_{aa} \omega_{ba} (\omega + i\gamma_{ba})}{2\varepsilon_{vac}\hbar\omega^2} \left[ \frac{\langle u_a | X_i | u_b \rangle \langle u_b | X_j | u_a \rangle}{\omega_{ba} - \omega - i\gamma_{ba}} - \frac{\langle u_a | X_i | u_b \rangle \langle u_b | X_j | u_a \rangle}{\omega_{ba} + \omega + i\gamma_{ba}} \right], \quad (3.92)$$

kde  $N$  je počet systémů v objemové jednotce,  $\rho_{aa}$  je pravděpodobnost obsazení stavu  $|u_a\rangle$ ,  $\omega_{ba} = \omega_b - \omega_a$ ,  $X_i$ ,  $X_j$  jsou kartézské složky operátoru  $\mathbf{R}$  a  $\gamma_{ba} = \gamma_{ab}$  je relaxační konstanta. Tenzor (3.92) je chápán jako superpozice složek úměrných výrazu

$$\chi_{ij}(\omega, u_a \rightarrow u_b) \sim \frac{\rho_{aa} \omega_{ba} (\omega + i\gamma_{ba})}{\omega^2} \left[ \frac{\langle u_a | X_i | u_b \rangle \langle u_b | X_j | u_a \rangle}{\omega_{ba} - \omega - i\gamma_{ba}} - \frac{\langle u_a | X_i | u_b \rangle \langle u_b | X_j | u_a \rangle}{\omega_{ba} + \omega + i\gamma_{ba}} \right]. \quad (3.93)$$

Takováto složka představuje příspěvek elektronového přechodu ze stavu  $|u_a\rangle$  do stavu  $|u_b\rangle$ , přičemž platí [30]

$$\chi_{ij}(\omega, u_a \rightarrow u_b) = -\chi_{ij}(\omega, U_b \rightarrow u_a). \quad (3.94)$$

Pokud  $i = j$ , potom spektrum komplexní složky  $\chi_{ij}$  odpovídá klasické Lorentzově rezonanční čáře.

Ke stanovení tenzoru susceptibility je potřeba znát vlastní hodnoty energie a vlastní stavy Hamiltoniánu  $H_0$ . Kulově symetrická část  $H_0$  má tvar

$$H_{centr} = \frac{1}{2m} \mathbf{P}^2 + V_{centr}(R), \quad (3.95)$$

přičemž  $V_{centr}(R)$  značí centrální potenciál. Ostatní členy  $H_0$  považujeme za poruchu. Pokud uvážíme jednoelektronové přiblížení, lze vlastní funkce  $H_{centr}$  zapsat

$$\begin{bmatrix} \psi_{nl}^\alpha \\ \psi_{nl}^\beta \end{bmatrix} = R_{nl}(r) Y_l^m(\theta, \varphi) \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix}, \quad (3.96)$$

kde  $\alpha$  a  $\beta$  označují vlastní spinové stavy. Zanedbáme-li vliv  $\mathbf{A}_0$  na vlastní hodnoty  $H_{centr}$ , dostaneme pro poruchu  $H_p$

$$H_p = V_{cf}(\mathbf{R}) - \frac{q}{m} \mathbf{S} \cdot (\nabla \times \mathbf{A}_{ex}) + \frac{1}{2m^2 c^2} \frac{1}{R} \frac{dV(R)}{dR} \mathbf{L} \cdot \mathbf{S}, \quad (3.97)$$

kde  $V_{cf}$  je potenciální energie krystalového pole.

Při vyšetřování vlivu symetrie kubického krystalového pole na  $d$ -funkce, což je náš případ (vzhledem ke struktuře zkoumaných vzorků), má  $V_{cf}$  tvar [42]

$$V_{cf} = \left(\frac{4\pi}{a}\right)^{1/2} \frac{7Zq^2}{8\pi\varepsilon_{vac}a^5} R^4 \left[ Y_4^0 + \left(\frac{5}{14}\right)^{1/2} (Y_4^4 + Y_4^{-4}) \right], \quad (3.98)$$

kde  $a$  je vzdálenost 6 bodových nábojů tvořících pravidelný oktaedr od náboje umístěného ve středu tohoto oktaedru.

Při vyšetřování vlivu snížení symetrie na vlastní stavy systému hraje v kvantové mechanice důležitou roli teorie symetrie. Ta popisuje vlastní stavy pomocí reprezentací příslušné bodové grupy symetrie systému. Pomocí této teorie se dá poměrně jednoduše stanovit, jak se vlastní stavy štěpí při vlivu vnějšího pole konkrétní symetrie. Tato teorie je podrobně popsána např. v [35, 42]. My se v dalším výkladu budeme opírat o základní poznatky této teorie.

Umístění volného iontu do krystalového pole má za následek rozpad reprezentace  $D_J$  bodové grupy symetrie vlastních stavů tohoto iontu na komponenty. Každá z komponent je ireducibilní reprezentace bodové grupy symetrie krystalu. Tedy

$$D_J = \sum_i c_i \Gamma_i. \quad (3.99)$$

Stav systému je pak reprezentován pomocí  $\Gamma_i$  a jeho degenerace je dána dimenzí  $\Gamma_i$ . Uvažujme nyní případ iontu v (kubickém) krystalu oktaedrální symetrie.

Tabulka charakterů grupy symetrie O je [43]

$G_C \equiv O$		$E$	$3C_2$	$6C_4$	$6C'_2$	$8C_3$
$A_1$	$\Gamma_1$	1	1	1	1	1
$A_2$	$\Gamma_2$	1	-1	-1	-1	-1
$E$	$\Gamma_3$	2	2	0	0	-1
$T_1$	$\Gamma_4$	3	-1	1	-1	0
$T_2$	$\Gamma_5$	3	-1	-1	1	0

Nyní najdeme charaktery reprezentace  $D_J$  užitím vztahu [35]

$$\chi_j(\omega) = \frac{\sin(j + \frac{1}{2})\omega}{\sin(\frac{1}{2}\omega)}. \quad (3.100)$$

$G_C$	$E$	$3C_2$	$6C_4$	$6C'_2$	$8C_3$
$D_0$	1	1	1	1	1
$D_1$	3	-1	1	-1	0
$D_2$	5	1	-1	1	-1
$D_3$	7	-1	-1	-1	1

Koeficienty  $c_i$  v rovnici (3.99) spočítáme s pomocí [44]

$$c_i = \frac{1}{g} \sum_R \chi(R)^* \chi_j(R) , \quad (3.101)$$

kde  $g$  značí počet operací. V našem případě  $g = 24$ . Dostáváme tedy

$$\begin{aligned} D_0 &= A_1 , \\ D_1 &= T_1 , \\ D_3 &= E + T_2 , \\ D_3 &= A_2 + T_1 + T_2 . \end{aligned} \quad (3.102)$$

V našem případě ( $J = 2$ ) se tedy  $d$  orbitaly štěpí v oktaedrálním krystalovém poli na  $e_g$  a  $t_{2g}$ . S uvážením bodu inverze a tedy kubického pole grupy  $O_h$  se  $d$  orbitaly štěpí na  $e_g$  a  $t_{2g}$  [42].

Třídění orbitálních stavů v krystalovém poli kubické symetrie uvádí následující tabulka [39]

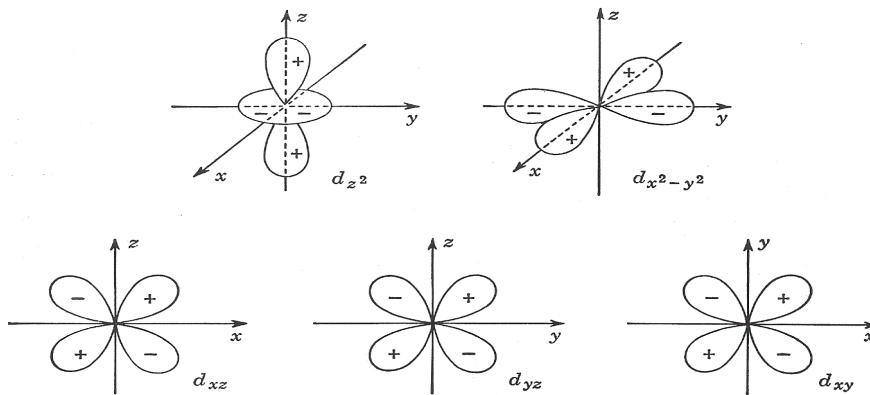
Reprezentace			
O(3)	$O_h$		
$s$	$A_{1g}$	$ s\rangle$	
$p$	$T_{1u}$	$ x\rangle$ $ y\rangle$ $ z\rangle$	
$d$	$E_g$ $E_g$ $T_{2g}$	$ 3z^2 - r^2\rangle$ $ x^2 - y^2\rangle$ $ xz\rangle$ $ yz\rangle$ $ xy\rangle$	

Elektronové hustoty  $e_g$  a  $t_{2g}$  jsou znázorněny na obr. 3.3.

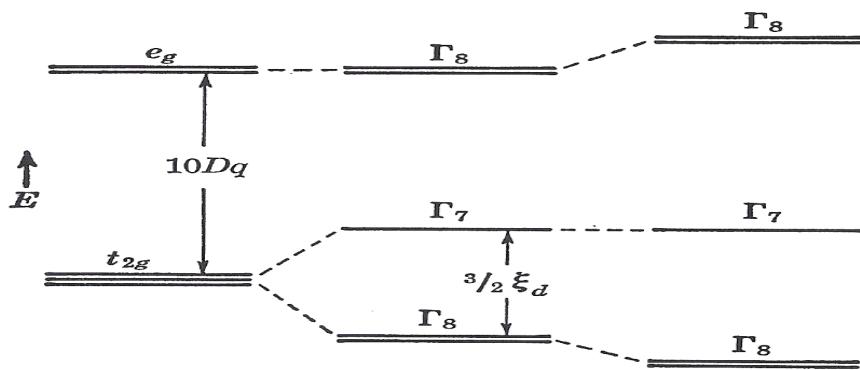
Příspěvek spin - orbitální vazby v (3.97) napišeme jednoduše pomocí parametru závislého na kvantových číslech  $n$  a  $l$  [42]

$$H_{so} = \lambda_{nl} \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} = \lambda_d \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} , \quad (3.103)$$

kdy uvažujeme konfiguraci  $n = 3, l = 2$  ( $d$  elektrony). Jak jsme si ukázali výše, působením krystalového pole se orbitálně degenerované  $d$ -stavy rozpadají na dvě skupiny symetrie  $t_{2g}$  a  $e_g$ . Po zahrnutí spin-orbitální vazby je výhodné klasifikovat vlastní stav v pomocí reprezentací  $\Gamma_7$  a  $\Gamma_8$  dvojně grupy  $O'_h$  [42]. Dojde k rozštěpení stávajících termů (viz. obr. 3.4)



Obrázek 3.3: Elektronové hustoty orbitalů  $e_g$  a  $t_{2g}$



Obrázek 3.4: Rozštěpení orbitalů  $e_g$  a  $t_{2g}$  způsobené slabou a středně silnou spin-orbitální vazbou

Efektivní výměnné pole v poruše (3.97) orientujeme ve směru jednotkového vektoru  $\mathbf{u}$ , který je určen pomocí úhlů  $\theta_u$  a  $\varphi_u$  sférických souřadnic. Složka spinového momentu je pak dána

$$S_u = \frac{\hbar}{2} \begin{bmatrix} \cos \theta_u & \sin \theta_u \exp(-i\varphi_u) \\ \sin \theta_u \exp(i\varphi_u) & -\cos \theta_u \end{bmatrix}. \quad (3.104)$$

Příspěvek výměnného pole k poruše je dán

$$-\frac{q}{m} \mathbf{S} \cdot (\nabla \times \mathbf{A}_{ex}) = 2\omega_{ex}^{(d)} S_u \quad (3.105)$$

a vlastní hodnoty energie při zapnutém výměnném poli jsou

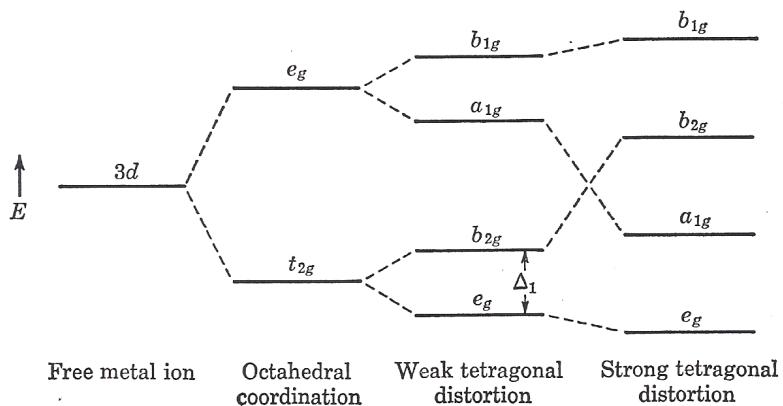
$$E = E_d \pm \hbar\omega_{ex}^{(d)}, \quad (3.106)$$

kde  $E_d$  je vlastní hodnota energie  $d$ -stavů při nulovém výměnném poli. Uvažujme poruchu (3.97) ve tvaru

$$H_p = V_{cub} + \lambda_d \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} + 2\omega_{ex}^{(d)} S_u. \quad (3.107)$$

Dá se odvodit [39], že vlastní energie a vlastní stavy (3.107) závisí na orientaci výměnného pole vůči krystalografickým osám a ještě jemněji štěpí termy vzniklé pomocí spin-orbitální interakce.

V reálných situacích existuje spousta látek, které nemají oktaedrální symetrii, ale nižší. Potom je třeba zahrnout tuto skutečnost jako poruchu k oktaedrální symetrii. Termy vzniklé rozštěpením v kubickém poli se pak dále štěpí. Výpočty pro takovéto případy jsou uvedeny v [42]. My si zde pro ilustraci uvedeme pouze energetické schéma vlivu tetragonální distorze (viz. obr. 3-4)



Obrázek 3.5: Energetické schéma štěpení  $d$  orbitalů v poli tetragonální symetrie

Výsledky uvedené v této kapitole nám umožní kvalitativně diskutovat naměřená spektra.

# Kapitola 4

## Elektromagnetické vlny v anizotropních nehomogenních prostředích

Jak jsme si ukázali v kapitole 3., nabývá permitivita v anizotropním prostředí tenzorového charakteru. Dále už také víme, že ve speciálních případech se tenzor permitivity může značně zjednodušit. V této kapitole popíšeme odraz a průchod elektromagnetické vlny anizotropní 2D mřížkou bi-periodickou v rovině rovnoběžné s rovinou rozhraní jako jednoduchým případem anizotropního nehomogenního prostředí. Tento formalismus je obecný a lze ho použít nejen na vyšetřování polarizačních vlastností elektromagnetických vln difrakovaných na mřížkách, ale i ke studiu nerovností jednotlivých rozhraní a k popisu polarizačních vlastností elektromagnetické vlny odražené na homogenním vzorku s vysokou drsností povrchu.

My však v našich výpočtech budeme z důvodu jednoduchosti uvažovat ideálně rovná rozhraní, proto na konci této kapitoly přejdeme ke speciálnímu případu odvozeného formalismu, a to k Yehově formalismu [45]. Ten se používá k popisu šíření elektromagnetických vln anizotropními multivrstevnatými strukturami. Zavedením takového formalismu budeme moci při známých parametrech prostředí spočítat Kerrovu rotaci a ellipticitu. Nakonec tento formalismus uplatníme na jednoduchou tenkou vrstvu na nemagnetickém substrátu pro polární a longitudinální geometrii.

## 4.1 Elektromagnetická pole v bi-periodických a homogenních prostředích

### 4.1.1 Maxwellovy rovnice

Vyjdeme z Maxwellových rovnic

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\mu_0 \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t}, \quad (4.1)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \epsilon_0 \epsilon \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}, \quad (4.2)$$

kde  $\epsilon$  je tenzor relativní permitivity

$$\epsilon = (\epsilon_{ij}) = \begin{bmatrix} \epsilon_{xx} & \epsilon_{xy} & \epsilon_{xz} \\ \epsilon_{yx} & \epsilon_{yy} & \epsilon_{yz} \\ \epsilon_{zx} & \epsilon_{zy} & \epsilon_{zz} \end{bmatrix}. \quad (4.3)$$

Časovou závislost polí volíme v souladu s [46] a [23] jako  $\exp(i\omega t)$ . Nyní budeme normovat prostorové souřadnice pomocí vlnového vektoru elektromagnetické vlny

$$\gamma_0 = \frac{2\pi}{\lambda}, \quad (4.4)$$

kde  $\lambda$  je vlnová délka elektromagnetické vlny ve vakuu. Definujeme si vlnovou impedanci, resp. admitanci vakuua vztahy

$$Z_0 = \sqrt{\frac{\mu_0}{\epsilon_0}}, \quad (4.5)$$

resp.

$$Y_0 = Z_0^{-1} = \sqrt{\frac{\epsilon_0}{\mu_0}}. \quad (4.6)$$

S uvážením časové závislosti polí a s pomocí (4.5) a (4.6) můžeme Maxwellovu rovnici (4.1) přepsat

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\mu_0 i\omega \mathbf{H} = -i \frac{\mu_0 \omega}{(\mu_0 \epsilon_0)^{1/2} c} \mathbf{H} = -i \frac{\omega}{c} \sqrt{\frac{\mu_0^2}{\mu_0 \epsilon_0}} = -i \frac{\omega}{c} \sqrt{\frac{\mu_0}{\epsilon_0}} \mathbf{H} = -i \gamma_0 \sqrt{\frac{Z_0}{Y_0}} \mathbf{H}, \quad (4.7)$$

tedy

$$\bar{\nabla} \times \sqrt{Z_0} \mathbf{H} = i \epsilon \sqrt{Y_0} \mathbf{E}, \quad (4.8)$$

kde

$$\bar{\nabla} = \frac{1}{\gamma_0} \nabla = \hat{x} \frac{\partial}{\partial(\gamma_0 x)} + \dots. \quad (4.9)$$

Obdobně upravíme rovnici (4.2)

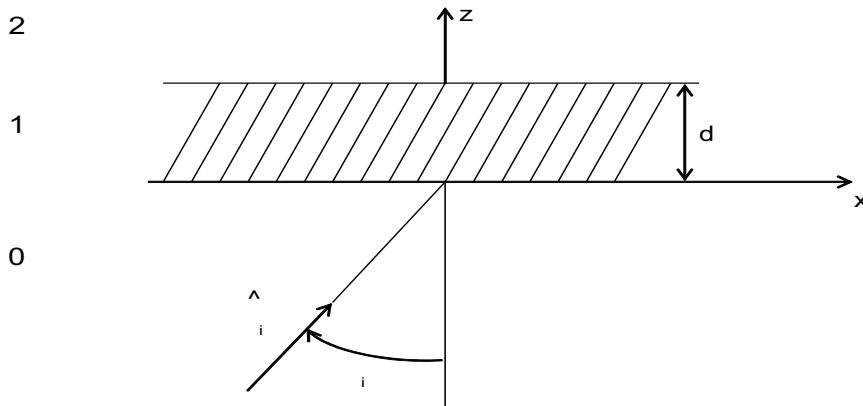
$$\nabla \times \mathbf{H} = i\varepsilon_0\boldsymbol{\varepsilon}\omega\mathbf{E} = i\frac{\varepsilon_0\boldsymbol{\varepsilon}\omega}{(\mu_0\varepsilon_0)^{1/2}c}\mathbf{E} = i\boldsymbol{\varepsilon}\frac{\omega}{c}\sqrt{\frac{\varepsilon_0}{\mu_0}}\sqrt{\frac{\varepsilon_0}{\mu_0}}\mathbf{E} = i\boldsymbol{\varepsilon}\gamma_0 Y_0 Z_0^{-1}\mathbf{E}. \quad (4.10)$$

Potom

$$\bar{\nabla} \times \sqrt{Z_0}\mathbf{H} = i\boldsymbol{\varepsilon}\sqrt{Y_0}\mathbf{E}. \quad (4.11)$$

### 4.1.2 Polarizační stav dopadající vlny

Uvažujeme elektromagnetickou vlnu, označenou indexem  $i$ , která dopadá na anizotropní bi-periodickou mřížku obklopenou dvěma odlišnými homogenními prostředími pod obecným úhlem popsaným ve sférických souřadnicích dvěma úhly  $\theta_i$  a  $\phi_i$ . Narozdíl od jiných autorů [46] volíme souřadný systém s osou  $z$  kolmou k rozhraním s kladným směrem ve směru postupu elektromagnetické vlny. Takto zvolený souřadný systém se v magnetooptice používá velmi často a nám tak lépe umožní přechod k Yehově formalismu [45]. Řez mřížkou v rovině dopadu (určenou pomocí  $\phi_i$ ) je znázorněn na obr. 4.1. Bi-periodická anizotropní mřížka je ohraničena rovinami  $z = 0$  a  $z = d$ . Parametry mřížky jsou nezávislé na souřadnici  $z$ .



Obrázek 4.1: Bi-periodická mřížka (1) tloušťky  $d$  obklopená anizotropními prostředími (0), (2)

Vstupní a výstupní oblasti (oblast 0 a 2) jsou homogenní izotropní prostředí se skalárními relativními permitivitami  $\varepsilon^{(0)}$  a  $\varepsilon^{(2)}$ .

Elektrické pole  $\mathbf{E}_i$  homogenní rovinné vlny dopadající z prostředí  $\varepsilon^{(0)}$  má obecně eliptickou polarizaci popsanou jednotkovým vektorem  $\hat{u}_i$ . Prostorová závislost dopadající vlny je

$$\exp[-i\sqrt{\varepsilon_0}(\hat{x}\sin\theta_i\cos\phi_i + \hat{y}\sin\theta_i\sin\phi_i + \hat{z}\cos\theta_i)] \quad (4.12)$$

$$\text{s } \hat{x} = \left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)x, \hat{y} = \left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)y \text{ a } \hat{z} = \left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)z.$$

Komplexní jednotkový vektor  $\hat{u}_i$  je kolmý na směr šíření daný jednotkovým vlnovým vektorem

$$\hat{\gamma}_i = \hat{x} \sin \theta_i \cos \phi_i + \hat{y} \sin \theta_i \sin \phi_i + \hat{z} \cos \theta_i , \quad (4.13)$$

kde  $\hat{x}$ ,  $\hat{y}$ ,  $\hat{z}$  jsou jednotkové kartézské vektory. Jednotkový vektor  $\hat{u}_i$  můžeme napsat jako

$$\hat{u}_i = \mathbf{R}_z(\phi_i) \mathbf{R}_y(\theta_i) \mathbf{R}_z(\psi_i) \begin{bmatrix} \cos \epsilon_i \\ i \sin \epsilon_i \\ 0 \end{bmatrix} , \quad (4.14)$$

kde rotace jsou určeny úhly  $\psi_i$ ,  $\theta_i$ ,  $\phi_i$  [47]

$$\begin{aligned} \mathbf{R}_z(\phi_i) \mathbf{R}_y(\theta_i) \mathbf{R}_z(\psi_i) &= \begin{bmatrix} \cos \phi_i & -\sin \phi_i & 0 \\ \sin \phi_i & \cos \phi_i & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos \theta_i & 0 & \sin \theta_i \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \theta_i & 0 & \cos \theta_i \end{bmatrix} \times \\ &\times \begin{bmatrix} \cos \psi_i & -\sin \psi_i & 0 \\ \sin \psi_i & \cos \psi_i & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} . \end{aligned} \quad (4.15)$$

Zde  $0 \leq \theta_i \leq \frac{\pi}{2}$ ,  $0 \leq \phi_i < 2\pi$ . Azimut polarizační elipsy  $\psi_i$  ( $-\frac{\pi}{2} \leq \psi_i < \frac{\pi}{2}$ ) se počítá od roviny dopadu  $\phi_i = \text{konst.}$ ,  $\tan \epsilon_i$  ( $-\frac{\pi}{4} \leq \epsilon_i \leq \frac{\pi}{4}$ ) je ellipticitu. Elektrické pole s komplexní amplitudou  $E_{0i}$  dopadající vlny je pak dáno vztahem

$$\mathbf{E}_i = E_{0i} \hat{u}_i \exp[i\omega t - i\sqrt{\varepsilon^{(0)}}(\hat{x} \sin \theta_i \cos \phi_i + \hat{y} \sin \theta_i \sin \phi_i + \hat{z} \cos \theta_i)] . \quad (4.16)$$

Kartézské složky vektoru elektrického pole dopadající vlny se dají vyjádřit pomocí sférických komponent vztahy

$$E_{x_i} = \cos \theta_i \cos \phi_i E_{\theta_i} - \sin \phi_i E_{\phi_i} , \quad (4.17)$$

$$E_{y_i} = \cos \theta_i \sin \phi_i E_{\theta_i} + \cos \phi_i E_{\phi_i} , \quad (4.18)$$

$$E_{z_i} = -\sin \theta_i E_{\theta_i} . \quad (4.19)$$

Odpovídající magnetická pole plynou z Maxwellových rovnic

$$\sqrt{Z_0} H_{x_i} = -\sqrt{\varepsilon^{(0)}} (\sin \phi_i \sqrt{Y_0} + \cos \theta_i \cos \phi_i \sqrt{Y_0} E_{\phi_i}) , \quad (4.20)$$

$$\sqrt{Z_0} H_{y_i} = \sqrt{\varepsilon^{(0)}} (\cos \phi_i \sqrt{Y_0} E_{\theta_i} - \cos \theta_i \sin \phi_i \sqrt{Y_0} E_{\phi_i}) , \quad (4.21)$$

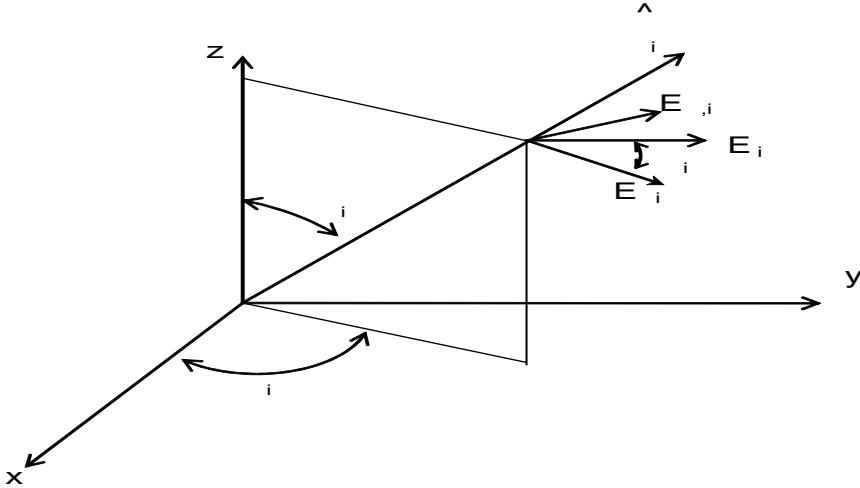
$$\sqrt{Z_0} H_{z_i} = \sqrt{\varepsilon^{(0)}} \sin \theta_i \sqrt{Y_0} E_{\phi_i} . \quad (4.22)$$

Komponenty  $E_{\theta_i}$  a  $E_{\phi_i}$  jsou dány [25]

$$E_{\theta_i} = E_{0i} (\cos \psi_i \cos \epsilon_i - i \sin \psi_i \sin \epsilon_i) , \quad (4.23)$$

$$E_{\phi i} = E_{0i}(\sin \psi_i \cos \epsilon_i + i \cos \psi_i \sin \epsilon_i) . \quad (4.24)$$

Při obecném úhlu dopadu ( $\theta_i \neq 0$ ) můžeme obecně ellipticky polarizované světlo rozložit do dvou komponent. Komponenty kolmé ( $E_{\theta i} = 0$ ) a rovnoběžné ( $E_{\phi i} = 0$ ) s rovinou dopadu, reprezentující  $TE$  a  $TM$  polarizace (viz. obr. 4.2). Pro lineárně polarizované dopadající světlo ( $\epsilon_i = 0$ )  $TE$  a  $TM$  módy v rovnicích (4.17) až (4.24) nastávají pro  $\psi_i = \frac{\pi}{2}$  a  $\epsilon_i = 0$ .



Obrázek 4.2: Vektor intenzity elektrického pole  $\mathbf{E}_i$  a jeho složky  $\mathbf{E}_{\theta,i}$  a  $\mathbf{E}_{\phi,i}$  elektromagnetické vlny šířící se s vlnovým vektorem  $\gamma_i$ .

### 4.1.3 Pole v bi-periodické anizotropní mřížce

Oblast mřížky (prostředí 2 v obrázku 4.1) je anizotropní prostředí, bi-periodické v rovině kolmé na osu  $z$  charakterizované komplexním tenzorem permitivity. Jeho složky můžeme rozepsat do Fourierovy řady [46]

$$\varepsilon_{ij}(\bar{x}, \bar{y}) = \sum_{k,l} \varepsilon_{ij,kl} \exp[i(kp\bar{x} + lq\bar{y})] , \quad (4.25)$$

kde  $i, j = x, y$  nebo  $z$ ,  $p = \frac{\lambda}{\Lambda_x}$  a  $q = \frac{\lambda}{\Lambda_y}$ , přičemž  $\Lambda_x$  a  $\Lambda_y$  jsou periody mřížky ve směrech os  $x$  a  $y$ .  $k, l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

Podle Floquetova-Blochova teorému můžeme elektrická a magnetická pole vyjádřit jako [47]

$$\sqrt{Y_0} \mathbf{E} = \sum_{m,n} \mathbf{e}_{mn} \exp[-i(p_m \bar{x} + q_n \bar{y} + s\bar{z})] , \quad (4.26)$$

$$\sqrt{Z_0} \mathbf{H} = \sum_{m,n} \mathbf{h}_{mn} \exp[-i(p_m \bar{x} + q_n \bar{y} + s\bar{z})] , \quad (4.27)$$

kde

$$p_m = p_0 + mp , \quad (4.28)$$

$$q_n = q_0 + nq , \quad (4.29)$$

přičemž

$$p_0 = \sqrt{\varepsilon^{(0)}} \sin \theta_i \cos \phi_i , \quad (4.30)$$

$$q_0 = \sqrt{\varepsilon^{(0)}} \sin \theta_i \sin \phi_i . \quad (4.31)$$

Sčítání v (4.26) a (4.27) se provádí přes všechna  $m, n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ ,  $\bar{z}$ -ová závislost neplyne z Floquetova teorému a parametr  $s$  je vypočten později řešením rovnice pro vlastní hodnoty. Nyní postupně dosadíme rovnice (4.26) a (4.27) do rovnice (4.8)

$$\frac{\partial}{\partial \bar{y}} \sqrt{Y_0} E_z - \frac{\partial}{\partial \bar{z}} \sqrt{Y_0} E_y = -i \sqrt{Z_0} H_x . \quad (4.32)$$

Pravá strana rovnice je

$$-i \sqrt{Z_0} H_x = -i \sqrt{Z_0} \sum_{mn} h_{x,mn} \exp[-i(p_m \bar{x} + q_n \bar{y} + s \bar{z})] , \quad (4.33)$$

levá strana rovnice se rovná

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \bar{y}} \sqrt{Y_0} E_z - \frac{\partial}{\partial \bar{z}} \sqrt{Y_0} E_y &= \frac{\partial}{\partial \bar{y}} \sqrt{Y_0} \sum_{mn} e_{z,mn} \exp[-i(p_m \bar{x} + q_n \bar{y} + s \bar{z})] - \\ &- \frac{\partial}{\partial \bar{z}} \sqrt{Y_0} \sum_{mn} e_{y,mn} \exp[-i(p_m \bar{x} + q_n \bar{y} + s \bar{z})] = \\ &\sqrt{Y_0} \sum_{mn} [(-iq_n) e_{z,mn} + is e_{y,mn}] \exp[-i(p_m \bar{x} + q_n \bar{y} + s \bar{z})] . \end{aligned} \quad (4.34)$$

Rovnice (4.8) má tvar

$$\sum_{mn} [(-iq_n) e_{z,mn} + is e_{y,mn} + ih_{x,mn}] \exp[-i(p_m \bar{x} + q_n \bar{y} + s \bar{z})] = 0 . \quad (4.35)$$

Obě strany (4.35) vynásobíme faktorem  $\exp[i(p_{m'} \bar{x} + q_{n'} \bar{y} + s \bar{z})]$ , zaměníme indexy  $m$  a  $m'$ ,  $n$  a  $n'$  a integrujeme přes normované periody  $\frac{\lambda}{\Lambda_x}$  a  $\frac{\lambda}{\Lambda_y}$

$$\begin{aligned} \sum_{m'n'} \int_{\bar{x}_0}^{\bar{x}_0 + \frac{2\pi}{p}} d\bar{x} \int_{\bar{y}_0}^{\bar{y}_0 + \frac{2\pi}{q}} d\bar{y} \exp[-i((m - m')p\bar{x} + (n - n')q\bar{y})] \times \\ \times [(-iq_{n'}) e_{z,m'n'} + is e_{y,m'n'} + ih_{x,m'n'}] = 0 . \end{aligned} \quad (4.36)$$

Z toho dostaneme rovnici

$$\sum_{m'n'} \delta_{mm'} \delta_{nn'} [(-iq_{n'}) e_{z,m'n'} + is e_{y,m'n'} + ih_{x,m'n'}] = 0 . \quad (4.37)$$

Ve výsledku můžeme napsat

$$q_n e_{z,mn} - s e_{y,mn} = h_{x,mn} . \quad (4.38)$$

Obdobně můžeme postupovat i u dalších dvou rovnic a dostaneme

$$se_{x,mn} - p_m e_{z,mn} = h_{y,mn} \quad (4.39)$$

a

$$p_m e_{y,mn} - q_n e_{x,mn} = h_{z,mn} . \quad (4.40)$$

Dosazování do druhé Maxwellovy rovnice (4.11) je vzhledem k tenzorové povaze permitivity poněkud složitější

$$-i \left[ \frac{\partial}{\partial \bar{y}} (\sqrt{Z_0} H_z) - \frac{\partial}{\partial \bar{z}} (\sqrt{Z_0} H_y) \right] = \varepsilon_{xx} \sqrt{Y_0} E_x + \varepsilon_{xy} \sqrt{Y_0} E_y + \varepsilon_{xz} \sqrt{Y_0} E_z . \quad (4.41)$$

Tuto rovnici upravíme a uplatníme rozvoj (4.25)

$$\begin{aligned} & \sum_{m,n} (-q_n h_{z,mn} + s h_{y,mn}) \exp[-i(p + m\bar{x} + q_n \bar{y} + s\bar{z})] = \\ & \sum_{k,l} \sum_{m,n} \{ \varepsilon_{xx,kl} e_{x,mn} + \varepsilon_{xy,kl} e_{y,mn} + \varepsilon_{xz,kl} e_{z,mn} \} \times \\ & \times \exp[i(kp - p_m)\bar{x} + i(lq - q_n)\bar{y} - is\bar{z}] . \end{aligned} \quad (4.42)$$

Obě strany (4.42) vydělíme faktorem  $\exp[-i(p_0\bar{x} + q_0\bar{y})]$ , opět vynásobíme faktorem  $\exp[i(pm'\bar{x} + qn'\bar{y})]$ , zaměníme indexy  $m, m'$  a  $n, n'$  a integrujeme přes normované periody  $\frac{\lambda}{\Lambda_x}$  a  $\frac{\lambda}{\Lambda_y}$

$$\begin{aligned} & \sum_{kl} \sum_{m'n'} \int_{\bar{x}_0}^{\bar{x}_0 + \frac{2\pi}{p}} d\bar{x} \int_{\bar{y}_0}^{\bar{y}_0 + \frac{2\pi}{q}} d\bar{y} \{ (-q_n h_{z,m'n'} + s h_{y,m'n'}) \exp[-i(m'p\bar{x} + n'q\bar{y})] - \\ & - (\varepsilon_{xx,kl} e_{x,m'n'} + \varepsilon_{xy,kl} e_{y,m'n'} + \varepsilon_{xz,kl} e_{z,m'n'}) \exp[(i(k - m')p\bar{x} + i(l - n')q\bar{y})] \} \times \\ & \times \exp[i(mp\bar{x} + nq\bar{y})] = 0 . \end{aligned} \quad (4.43)$$

Potom

$$-q_n h_{z,mn} + s h_{y,mn} - \sum_{k,l,m',n'} (\varepsilon_{xx,kl} e_{x,m'n'} + \varepsilon_{xy,kl} e_{y,m'n'} + \varepsilon_{xz,kl} e_{z,m'n'}) \delta_{k,m'-m} \delta_{l,n'-n} = 0 . \quad (4.44)$$

Úpravou

$$-q_n h_{z,mn} + s h_{y,mn} = \sum_{m',n'} (\varepsilon_{xx,m'-m,n'-n} e_{x,m'n'} + \varepsilon_{xy,m'-m,n'-n} e_{y,m'n'} + \varepsilon_{xz,m'-m,n'-n} e_{z,m'n'}) . \quad (4.45)$$

Nyní zaměníme sumační indexy  $m' \rightarrow k$  a  $n' \rightarrow l$ . Výsledný tvar rovnice je pak

$$s h_{y,mn} - q_n h_{z,mn} = \sum_i \sum_{k,l} \varepsilon_{xi,l-m,l-n} e_{i,kl} . \quad (4.46)$$

Obdobným postupem získáme zase zbylé dvě rovnice

$$p_m h_{z,mn} - s h_{x,mn} = \sum_i \sum_{k,l} \varepsilon_{yi,k-m,l-n} e_{i,kl} \quad (4.47)$$

a

$$q_n h_{x,mn} - p_{m,mn} = \sum_i \sum_{k,l} \varepsilon_{zi,k-m,l-n} e_{i,kl} . \quad (4.48)$$

Těchto výsledných 6 rovnic (4.38), (4.39), (4.40) a (4.46), (4.47), (4.48) může být přepsáno do maticového tvaru použitím konstrukce popsané Noponenem a Turunenem [47]

$$\mathbf{qe}_z - \mathbf{se}_y = \mathbf{h}_x , \quad (4.49)$$

$$\mathbf{se}_x - \mathbf{pe}_z = \mathbf{h}_y , \quad (4.50)$$

$$\mathbf{sh}_y - \mathbf{qh}_z = \varepsilon_{xx} \mathbf{e}_x + \varepsilon_{xy} \mathbf{e}_y + \varepsilon_{xz} \mathbf{e}_z , \quad (4.51)$$

$$\mathbf{ph}_z - \mathbf{sh}_x = \varepsilon_{yx} \mathbf{e}_x + \varepsilon_{yy} \mathbf{e}_y + \varepsilon_{yz} \mathbf{e}_z , \quad (4.52)$$

$$\mathbf{pe}_y - \mathbf{qe}_x = \mathbf{h}_z , \quad (4.53)$$

$$\mathbf{qh}_x - \mathbf{ph}_y = \varepsilon_{zx} + \varepsilon_{zy} \mathbf{e}_y + \varepsilon_{zz} \mathbf{e}_z , \quad (4.54)$$

kde

$$\mathbf{s} = s \cdot \mathbf{1} \quad (4.55)$$

a  $\mathbf{1}$  je jednotková matice. V numerických výpočtech musí být nekonečný počet soustavy rovnic nahrazen počtem konečným. Počet modů tak závisí na rychlosti konvergence v uvažovaném problému.

Pokud uvážíme  $m = 0, \pm 1, \dots, \pm m_{max}$  difrakčních modů ve směru  $x$  a  $n = 0, \pm 1, \dots, \pm n_{max}$  difrakčních modů ve směru  $y$ , pak  $\mathbf{e}_x$ ,  $\mathbf{e}_y$ ,  $\mathbf{h}_x$  a  $\mathbf{h}_y$  jsou sloupové matice konečné dimenze  $(2m_{max} + 1) \times (2n_{max} + 1)$  s prvky

$$e_{x,\alpha} = e_{x,mn}, \quad e_{y,\alpha} = e_{y,mn} , \quad (4.56)$$

$$h_{x,\alpha} = h_{x,mn}, \quad h_{y,\alpha} = h_{y,mn} . \quad (4.57)$$

$\mathbf{p}$  a  $\mathbf{q}$  jsou diagonální čtvercové matice  $[(2m_{max} + 1) \times (2n_{max} + 1)]^2$  s prvky

$$p_{\alpha'\alpha} \delta_{\alpha'\alpha} = p_m , \quad q_{\alpha'\alpha} \delta_{\alpha'\alpha} = q_n \quad (4.58)$$

a  $\varepsilon_{ij}$  ( $i, j = x, y, z$ ) jsou čtvercové matice  $[(2_{max} + 1) \times (2n_{max} + 1)]^2$  s elementy

$$\varepsilon_{ij\alpha\alpha'} = \varepsilon_{ij,m'-m,n'-n} , \quad (4.59)$$

kde  $\alpha' = m' + m_{max}n'$  a  $\alpha = m + m_{max}n$ .

Nyní eliminujeme  $\mathbf{e}_z$  a  $\mathbf{h}_z$  z maticových rovnic (4.49) - (4.52) s pomocí (4.53) a (4.54). Rovnici (4.54) přepíšeme do tvaru

$$\mathbf{e}_z = [\mathbf{qh}_x - \mathbf{ph}_y - \varepsilon_{zx} \mathbf{e}_x - \varepsilon_{zy} \mathbf{e}_y] \varepsilon_{zz}^{-1} \quad (4.60)$$

a dosadíme do rovnice (4.49)

$$\mathbf{h}_x = \mathbf{q}(\varepsilon_{zz})^{-1}[\mathbf{q}\mathbf{h}_x - \mathbf{p}\mathbf{h}_y - \varepsilon_{zx}\mathbf{e}_x - \varepsilon_{zy}\mathbf{e}_y] - s\mathbf{e}_y . \quad (4.61)$$

Podobně dosadíme i do rovnice (4.50)

$$\mathbf{h}_y = s\mathbf{e}_x - \mathbf{p}(\varepsilon_{zz})^{-1}[\mathbf{q}\mathbf{h}_x - \mathbf{p}\mathbf{h}_y - \varepsilon_{zx}\mathbf{e}_x - \varepsilon_{zy}\mathbf{e}_y] . \quad (4.62)$$

S pomocí rovnic (4.53) a (4.60) přepíšeme rovnice (4.52) a (4.52) do tvaru

$$s\mathbf{h}_y - \mathbf{q}[\mathbf{p}\mathbf{e}_y - \mathbf{q}\mathbf{e}_x] = \varepsilon_{xx}\mathbf{e}_x + \varepsilon_{xy}\mathbf{e}_y + \varepsilon_{xz}(\varepsilon_{zz})^{-1}[\mathbf{q}\mathbf{h}_x - \mathbf{p}\mathbf{h}_y - \varepsilon_{zx}\mathbf{e}_x - \varepsilon_{zy}\mathbf{e}_y] \quad (4.63)$$

a

$$\mathbf{p}[\mathbf{p}\mathbf{e}_y - \mathbf{q}\mathbf{e}_x] - s\mathbf{h}_x = \varepsilon_{xy}\mathbf{e}_x + \varepsilon_{yy}\mathbf{e}_y + \varepsilon_{yz}(\varepsilon_{zz})^{-1}[\mathbf{q}\mathbf{h}_x - \mathbf{p}\mathbf{h}_y - \varepsilon_{zx}\mathbf{e}_x - \varepsilon_{zy}\mathbf{e}_y] . \quad (4.64)$$

Výsledné rovnice (4.61)-(4.64) můžeme přepsat do maticového tvaru

$$\begin{bmatrix} -q\varepsilon_{zz}^{-1}\varepsilon_{zx} & -q\varepsilon_{zz}^{-1}p & -q\varepsilon_{zz}^{-1}\varepsilon_{zy} - s & q\varepsilon_{zz}^{-1} - 1 \\ s + p\varepsilon_{zz}^{-1}\varepsilon_{zx} & p\varepsilon_{zz}^{-1}p - 1 & p\varepsilon_{zz}^{-1}\varepsilon_{zy} & -p\varepsilon_{zz}^{-1}q \\ q^2 - \varepsilon_{xx} + \varepsilon_{xz}\varepsilon_{zx}\varepsilon_{zz}^{-1}\varepsilon_{zx} & \varepsilon_{xz}\varepsilon_{zz}^{-1}p + s & -qp - \varepsilon_{xy} + \varepsilon_{xz}\varepsilon_{zz}^{-1}\varepsilon_{zy} & -\varepsilon_{xz}\varepsilon_{zz}^{-1}q \\ -pq - \varepsilon_{xy} + \varepsilon_{yz}\varepsilon_{zz}^{-1}\varepsilon_{zx} & \varepsilon_{yz}\varepsilon_{zz}^{-1}p & p^2 - \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{yz}\varepsilon_{zz}^{-1}\varepsilon_{zy} & -s - \varepsilon_{yz}\varepsilon_{zz}^{-1}q \end{bmatrix} \times \\ \times \begin{bmatrix} \mathbf{e}_x \\ \mathbf{h}_y \\ \mathbf{e}_y \\ \mathbf{h}_x \end{bmatrix} = 0 , \quad (4.65)$$

který lze upravit

$$\begin{bmatrix} \mathbf{e}_x \\ \mathbf{h}_y \\ \mathbf{e}_y \\ \mathbf{h}_x \end{bmatrix} = \\ = \begin{bmatrix} -p\varepsilon_{zz}^{-1}\varepsilon_{zx} & 1 - p\varepsilon_{zz}^{-1}p & -p\varepsilon_{zz}^{-1}\varepsilon_{zy} & p\varepsilon_{zz}^{-1}q \\ \varepsilon_{xx} - \varepsilon_{xz}\varepsilon_{zz}^{-1}\varepsilon_{zx} - q^2 & -\varepsilon_{xz}\varepsilon_{zz}^{-1}p & \varepsilon_{xy} - \varepsilon_{xz}\varepsilon_{zz}^{-1}\varepsilon_{zy} + qp & \varepsilon_{xz}\varepsilon_{zz}^{-1}q \\ -q\varepsilon_{zz}^{-1}\varepsilon_{zx} & -q\varepsilon_{zz}^{-1}p & -q\varepsilon_{zz}^{-1}\varepsilon_{zy} & q\varepsilon_{zz}^{-1}q - 1 \\ \varepsilon_{yz}\varepsilon_{zz}^{-1}\varepsilon_{xz} - \varepsilon_{yx} - pq & \varepsilon_{yz}\varepsilon_{zz}^{-1}p & p^2 - \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{yz}\varepsilon_{zz}^{-1}\varepsilon_{zy} & -\varepsilon_{yz}\varepsilon_{zz}^{-1}q \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{e}_x \\ \mathbf{h}_y \\ \mathbf{e}_y \\ \mathbf{h}_x \end{bmatrix} . \quad (4.66)$$

Z rovnic (4.53) a (4.60) sestavíme

$$\begin{bmatrix} \mathbf{e}_z \\ \mathbf{h}_z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\varepsilon}_{zz}^{-1} \boldsymbol{\varepsilon}_{zx} & -\boldsymbol{\varepsilon}_{zz}^{-1} \mathbf{p} & -\boldsymbol{\varepsilon}_{zz}^{-1} \boldsymbol{\varepsilon}_{zy} & \boldsymbol{\varepsilon}_{zz}^{-1} \mathbf{q} \\ -\mathbf{q} & 0 & \mathbf{p} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{e}_x \\ \mathbf{h}_y \\ \mathbf{e}_y \\ \mathbf{h}_x \end{bmatrix}. \quad (4.67)$$

Stručněji zapsáno

$$s\mathbf{f}_{\hat{t}} = \mathbf{C}\mathbf{f}_{\hat{t}}, \quad (4.68)$$

$$\mathbf{f}_{\hat{n}} = \mathbf{D}\mathbf{f}_{\hat{t}}, \quad (4.69)$$

kde

$$\mathbf{f}_{\hat{t}} = \begin{bmatrix} \mathbf{e}_x \\ \mathbf{h}_y \\ \mathbf{e}_y \\ \mathbf{h}_x \end{bmatrix} \quad (4.70)$$

jsou tečné složky polí a

$$\mathbf{f}_{\hat{n}} = \begin{bmatrix} \mathbf{e}_z \\ \mathbf{h}_z \end{bmatrix} \quad (4.71)$$

jsou normálové složky polí.

Prvky matic  $\mathbf{C}$  a  $\mathbf{D}$  tvoří maticové výrazy. Matice  $\mathbf{C}$  má rozměr  $(2m_{max}+1) \times (2n_{max}+1) \times 4$  a matice  $\mathbf{D}$  má rozměr  $(2m_{max}+1) \times (2n_{max}+1) \times 2$ . Tyto vazební matice popisují vazbu všech prostorových harmonických složek polí navzájem, a to včetně interakce mezi  $TE$  a  $TM$  módy v obecně anizotropní oblasti mřížky.

#### 4.1.4 Pole v homogenním anizotropním prostředí

Pole homogenních izotropních či anizotropních prostředí představují speciální případ právě odvozených maticových rovnic. V homogenních anizotropních prostředích je rozvoj (4.25) redukován na jediný člen s  $p = 0 = q$  a  $\boldsymbol{\varepsilon}_{ij}$  je v rovnicích (4.66) a (4.67) reprezentována součinem  $\varepsilon_{ij} \mathbf{1}$ , kde  $\mathbf{1}$  je jednotková matice dimenze  $(2m_{max}+1)(2n_{max}+1)$ . Nedochází k interakci mezi prostorovými harmonickými složkami polí, všechny podmatice vystupující v  $\mathbf{C}$  a  $\mathbf{D}$  jsou diagonální a rovnice (4.66) a (4.67) lze rozdělit na  $(2m_{max}+1) \times (2n_{max}+1)$

nezávislých rovnic

$$\begin{aligned}
 & s \begin{bmatrix} e_{x,mn} \\ h_{y,mn} \\ e_{y,mn} \\ h_{x,mn} \end{bmatrix} = \\
 & = \begin{bmatrix} -p_m \varepsilon_{zz}^{-1} \varepsilon_{zx} & 1 - p_m^2 \varepsilon_{zz}^{-1} & -p_m \varepsilon_{zz}^{-1} \varepsilon_{zy} & p_m q_n \varepsilon_{zz}^{-1} \\ \varepsilon_{xx} - \varepsilon_{xz} \varepsilon_{zz}^{-1} \varepsilon_{zx} - q_n^2 & -p_m \varepsilon_{xz} \varepsilon_{zz}^{-1} & \varepsilon_{xy} - \varepsilon_{xz} \varepsilon_{zz}^{-1} \varepsilon_{zy} + p_m q_n & q_n \varepsilon_{xz} \varepsilon_{zz}^{-1} \\ -q_n \varepsilon_{zz}^{-1} \varepsilon_{zx} & -q_n \varepsilon_{zz}^{-1} p_m & -q_n \varepsilon_{zz}^{-1} \varepsilon_{zy} & q_n^2 \varepsilon_{zz}^{-1} - 1 \\ \varepsilon_{yz} \varepsilon_{zz}^{-1} \varepsilon_{zx} - \varepsilon_{yz} - p_m q_n & \varepsilon_{yz} \varepsilon_{zz}^{-1} p_m & p_m^2 - \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{yz} \varepsilon_{zz}^{-1} \varepsilon_{zy} & -\varepsilon_{yz} \varepsilon_{zz}^{-1} q_n \end{bmatrix} \\
 & \times \begin{bmatrix} e_{x,mn} \\ h_{y,mn} \\ e_{y,mn} \\ h_{x,mn} \end{bmatrix}, \tag{4.72}
 \end{aligned}$$

$$\begin{bmatrix} e_{z,mn} \\ h_{z,mn} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \varepsilon_{zz}^{-1} \varepsilon_{zx} & -\varepsilon_{zz}^{-1} p_m & -\varepsilon_{zz}^{-1} \varepsilon_{zy} & \varepsilon_{zz}^{-1} q_n \\ -q_n & 0 & p_m & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e_{x,mn} \\ h_{y,mn} \\ e_{y,mn} \\ h_{x,mn} \end{bmatrix}. \tag{4.73}$$

#### 4.1.5 Pole v homogenním izotropním prostředí

Pokud je navíc homogenní prostředí izotropní, má  $\boldsymbol{\varepsilon}_{ij}$  tvar

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{ij} = \varepsilon \delta_{ij} \mathbf{1} \tag{4.74}$$

a matice  $\mathbf{C}$  a  $\mathbf{D}$  se značně zjednoduší. Tedy

$$\mathbf{C}^{(u)} = \begin{bmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{1} - p^2/\varepsilon & \mathbf{0} & pq/\varepsilon \\ \varepsilon \mathbf{1} - \mathbf{q}^2 & \mathbf{0} & qp & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & -pq/\varepsilon & \mathbf{0} & q^2/\varepsilon - 1 \\ -pq & \mathbf{0} & p^2 - \varepsilon \mathbf{1} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \tag{4.75}$$

a

$$\mathbf{D}^{(u)} = \begin{bmatrix} \mathbf{0} & -p/\varepsilon & \mathbf{0} & q/\varepsilon \\ -q & \mathbf{0} & q & \mathbf{0} \end{bmatrix}. \tag{4.76}$$

Všechny podmatice  $\mathbf{C}^{(u)}$  a  $\mathbf{D}^{(u)}$  jsou diagonální a opět každá složka pole definovaná indexy  $m$  a  $n$  samostatně splňuje Maxwellovy rovnice. Rovnice (4.66) a (4.67) mohou být rozděleny na  $(2m_{max} + 1) \times (2n_{max} + 1)$  nezávislých rovnic. Stručně zapsáno

$$\mathbf{s} \mathbf{f}_{\hat{t},mn}^{(u)} = \mathbf{C}_{mn}^{(u)} \mathbf{f}_{\hat{t},mn}^{(u)}, \quad \mathbf{f}_{\hat{n},mn}^{(u)} = \mathbf{D}_{mn}^{(u)} \mathbf{f}_{\hat{t},mn}^{(u)}. \tag{4.77}$$

## 4.2 Maticová formulace řešení

### 4.2.1 Charakteristická pole v bi-periodické mřížce

Řešení soustavy rovnic pro vázané vlny (4.66) se redukuje na řešení problému vlastních hodnot čtvercové matice  $\mathbf{C}$  dimenze  $(2m_{max} + 1) \times (2n_{max} + 1) \times 4$ . Nechť  $\kappa_v$ ,  $[v = 1, 2, \dots, 4 \times (2m_{max} + 1) \times (2n_{max} + 1)]$  je vlastní hodnota získaná z charakteristické rovnice

$$\det(\mathbf{C} - \kappa \mathbf{1}) = 0 , \quad (4.78)$$

$\boldsymbol{\nu}_v$  odpovídající vlastní vektory (s prvky  $\nu_{vw}, [w = 1, 2, \dots, 4 \times (2m_{max} + 1) \times (2n_{max} + 1)]$ ) a  $\mathbf{T} = [\boldsymbol{\nu}_1, \boldsymbol{\nu}_2, \dots, \boldsymbol{\nu}_{4(2m_{max}+1)(2n_{max}+1)}]$  diagonalizační matice. Transformujeme

$$\mathbf{f}_{\hat{t}} = \mathbf{T} \mathbf{g} . \quad (4.79)$$

Substitucí do rovnice (4.68) dostaváme

$$s\mathbf{g} = (\mathbf{T}^{-1} \mathbf{C} \mathbf{T}) \mathbf{g} = \boldsymbol{\kappa} \mathbf{g} , \quad (4.80)$$

kde  $\boldsymbol{\kappa}$  je diagonální matice s prvky  $\kappa_v, [v = 1, 2, \dots, 4 \times (2m_{max} + 1) \times (2n_{max} + 1)]$ .

### 4.2.2 Charakteristická pole v homogenním anizotropním prostředí

V homogenních anizotropních prostředích charakterizovaných obecným tenzorem permittivity může být charakteristická rovnice (4.78) napsána jako součin rovnic čtvrtého řádu o daném  $m$  a  $n$ . Každá z těchto rovnic poskytuje čtyři obecně libovolné vlastní čísla a jím odpovídající vlastní polarizace. Pokud je  $p = q = 0$ , rovnice (4.78) má tvar odvozený Yehem [45] při vyšetřování homogenních anizotropních multivrstevnatých prostředí. Charakteristická rovnice (4.78) se proto redukuje na klasickou rovnici pro vlastní hodnoty

$$\begin{aligned} & \varepsilon_{zz}s^4 + [p_0(\varepsilon_{zx} + \varepsilon_{xz}) + q_0(\varepsilon_{yz} + \varepsilon_{zy})]s^3 - [\varepsilon_{zz}(\varepsilon_{xx} - p_0^2) + \varepsilon_{zz}(\varepsilon_{yy} - q_0^2) - \\ & - \varepsilon_{xx}p_0^2 - \varepsilon_{yy}q_0^2 - p_0q_0(\varepsilon_{xy} + \varepsilon_{yx}) - \varepsilon_{yz}\varepsilon_{zy} - \varepsilon_{zx}\varepsilon_{xz}]s^2 - [(\varepsilon_{xx} - q_0^2)q_0(\varepsilon_{yz} + \varepsilon_{zy}) + \\ & + (\varepsilon_{yy} - p_0^2)p_0(\varepsilon_{zx} + \varepsilon_{xz}) - (\varepsilon_{xy} + p_0q_0)(p_0\varepsilon_{yz} + q_0\varepsilon_{zx}) - \\ & - (\varepsilon_{yx} + p_0q_0)(p_0\varepsilon_{zy} + q_0\varepsilon_{xz})]s + (\varepsilon_{yy} - p_0^2 - q_0^2)[(\varepsilon_{xx} - q_0^2)(\varepsilon_{yy} - p_0^2) - \\ & - (\varepsilon_{xy} + p_0q_0)(\varepsilon_{yx} + p_0q_0)] - (\varepsilon_{xx} - q_0^2)\varepsilon_{yz}\varepsilon_{zy} - (\varepsilon_{yy} - p_0^2)\varepsilon_{zx}\varepsilon_{xz} + \varepsilon_{xy}\varepsilon_{zx}\varepsilon_{yz} + \\ & + \varepsilon_{yx}\varepsilon_{xz}\varepsilon_{zy} = 0 . \end{aligned} \quad (4.81)$$

### 4.2.3 Charakteristická pole v homogenním izotropním prostředí

V homogenních izotropních prostředích ( $I = 0, 2$ ) můžeme vlastní čísla, vlastní vektory a diagonalizační matici napsat explicitně. Odpovídající normované vlnové vektory jsou

dány vztahem  $\bar{\gamma}_{I,mn} = \hat{x}p_m + \hat{y}q_n + \hat{z}s_{I,mn}$ , kde  $p_m$  a  $q_n$  jsou dány rovnicemi (4.28) a (4.29) a  $s_{I,mn}$  jsou vlastní čísla rovnice pro vlastní hodnoty s maticí ve tvaru (4.75)

$$s_{I,mn}^\pm = \pm[\varepsilon_I - (p_m^2 + q_n^2)]^{1/2} = \pm\zeta_{I,mn}. \quad (4.82)$$

Obecný vlastní vektor náležící vlastnímu číslu  $s_{I,mn}^{(1)} = s_{I,mn}^{(2)} = \zeta_{I,mn}$  je

$$\boldsymbol{\nu}(\zeta_{I,mn}) = \begin{bmatrix} (\varepsilon_I - p_m^2)\alpha + p_m q_n \beta \\ \varepsilon_I \zeta_{I,mn} \alpha \\ -p_m q_n \alpha - (\varepsilon_I - q_n^2) \beta \\ \varepsilon_I \zeta_{I,mn} \beta \end{bmatrix}, \quad (4.83)$$

kde  $\alpha$  a  $\beta$  jsou libovolná. Obdobně obecný vlastní vektor náležící vlastnímu číslu  $s_{I,mn}^{(3)} = s_{I,mn}^{(4)} = -\zeta_{I,mn}$  (s libovolnými  $\gamma$  a  $\delta$ ) má tvar

$$\boldsymbol{\nu}(-\zeta_{I,mn}) = \begin{bmatrix} -(\varepsilon_I - p_m^2)\gamma - p_m q_n \delta \\ \varepsilon_I \zeta_{I,mn} \gamma \\ -p_m q_n \gamma + (\varepsilon_I - q_n^2) \delta \\ \varepsilon_I \zeta_{I,mn} \delta \end{bmatrix}. \quad (4.84)$$

Za předpokladu  $p_m \neq 0$  a  $q_n \neq 0$  volíme vlastní vektory náležící vlastnímu číslu  $\zeta_{I,mn}$  ve směru šíření  $\exp(-i\zeta_{I,mn}\hat{z})$  reprezentující  $TE$  ( $e_{z;I,mn}^{(1)} = 0$ ) a  $TM$  ( $h_{z;I,mn}^{(2)} = 0$ ) módy

$$\boldsymbol{\nu}_{I,mn}^{(1)} = \begin{bmatrix} \dot{q}_n \\ \dot{q}_n \zeta_{I,mn} \\ -\dot{p}_m \\ \dot{p}_m \zeta_{I,mn} \end{bmatrix}, \quad (e_{z;I,mn}^{(1)} = 0), \quad (4.85)$$

$$\boldsymbol{\nu}_{I,mn}^{(2)} = \begin{bmatrix} \dot{p}_m \\ \varepsilon \dot{p}_m / \zeta_{I,mn} \\ \dot{q}_n \\ -\varepsilon \dot{q}_n / \zeta_{I,mn} \end{bmatrix}, \quad (h_{z;I,mn}^{(2)} = 0). \quad (4.86)$$

Vlastní vektory ve směru šíření  $\exp(i\zeta_{I,mn}\hat{z})$  náležící vlastnímu číslu  $-\zeta_{I,mn}$  volíme pro  $TE$  ( $e_{z;I,mn}^{(3)} = 0$ ) a  $TM$  ( $h_{z;I,mn}^{(4)} = 0$ ) módy

$$\boldsymbol{\nu}_{I,mn}^{(3)} = \begin{bmatrix} \dot{q}_n \\ -\dot{q}_n \zeta_{I,mn} \\ \dot{p}_m \\ -\dot{p}_m \zeta_{I,mn} \end{bmatrix}, \quad (e_{z;I,mn}^{(3)} = 0), \quad (4.87)$$

$$\boldsymbol{\nu}_{I,mn}^{(4)} = \begin{bmatrix} \dot{p}_m \\ -\varepsilon \dot{p}_m / \zeta_{I,mn} \\ \dot{q}_n \\ \varepsilon \dot{q}_n / \zeta_{I,mn} \end{bmatrix}, \quad (h_{z;I,mn}^{(4)} = 0), \quad (4.88)$$

přičemž

$$\dot{p}_m = \frac{p_m}{(p_m^2 + q_n^2)^{1/2}}, \quad \dot{q}_n = \frac{q_n}{(p_m^2 + q_n^2)^{1/2}}. \quad (4.89)$$

Vektory elektrického a magnetického pole náležící vlastním modům dostaneme z rovnic (4.68) a (4.69) s maticemi ve tvarach (4.75) a (4.76).

*TE* vlna postupující ve směru  $+z$

$$\mathbf{e}_{I,mn}^{(1)} = \hat{\mathbf{x}}\dot{q}_n - \hat{\mathbf{y}}\dot{p}_m, \quad |\mathbf{e}_{I,mn}^{(1)}| = 1, \quad (4.90)$$

$$\mathbf{h}_{I,mn}^{(1)} = (\hat{\mathbf{x}}\dot{p}_m + \hat{\mathbf{y}}\dot{q}_n)\zeta_{I,mn} - \hat{\mathbf{z}}(p_m^2 + q_n^2)^{1/2}, \quad |\mathbf{h}_{I,mn}^{(1)}| = \varepsilon_I^{1/2}. \quad (4.91)$$

*TM* vlna postupující ve směru  $+z$

$$\mathbf{e}_{I,mn}^{(2)} = \hat{\mathbf{x}}\dot{p}_m + \hat{\mathbf{y}}\dot{q}_n - \hat{\mathbf{z}}\frac{(p_m^2 + q_n^2)^{1/2}}{\zeta_{I,mn}}, \quad |\mathbf{e}_{I,mn}^{(2)}| = \frac{\varepsilon_I^{1/2}}{|\zeta_{I,mn}|}, \quad (4.92)$$

$$\mathbf{h}_{I,mn}^{(2)} = \frac{-(\hat{\mathbf{x}}\dot{q}_n - \hat{\mathbf{y}}\dot{p}_m)\varepsilon_I}{\zeta_{I,mn}}, \quad |\mathbf{h}_{I,mn}^{(2)}| = \frac{\varepsilon_I}{|\zeta_{I,mn}|}. \quad (4.93)$$

*TE* vlna postupující ve směru  $-z$

$$\mathbf{e}_{I,mn}^{(3)} = \hat{\mathbf{x}}\dot{q}_n - \hat{\mathbf{y}}\dot{p}_m, \quad |\mathbf{e}_{I,mn}^{(3)}| = 1, \quad (4.94)$$

$$\mathbf{h}_{I,mn}^{(3)} = -(\hat{\mathbf{x}}\dot{p}_m + \hat{\mathbf{y}}\dot{q}_n)\zeta_{I,mn} - \hat{\mathbf{z}}(p_m^2 + q_n^2)^{1/2}, \quad |\mathbf{h}_{I,mn}^{(3)}| = \varepsilon_I^{1/2}. \quad (4.95)$$

*TM* vlna postupující ve směru  $-z$

$$\mathbf{e}_{I,mn}^{(4)} = \hat{\mathbf{x}}\dot{p}_m + \hat{\mathbf{y}}\dot{q}_n + \hat{\mathbf{z}}\frac{(p_m^2 + q_n^2)^{1/2}}{\zeta_{I,mn}}, \quad |\mathbf{e}_{I,mn}^{(4)}| = \frac{\varepsilon_I^{1/2}}{|\zeta_{I,mn}|}, \quad (4.96)$$

$$\mathbf{h}_{I,mn}^{(4)} = \frac{(\hat{\mathbf{x}}\dot{q}_n - \hat{\mathbf{y}}\dot{p}_m)\varepsilon_I}{\zeta_{I,mn}}, \quad |\mathbf{h}_{I,mn}^{(4)}| = \frac{\varepsilon_I}{|\zeta_{I,mn}|}. \quad (4.97)$$

Vlny  $\boldsymbol{\nu}_{I,mn}^{(1)}$  a  $\boldsymbol{\nu}_{I,mn}^{(2)}$  postupující ve směru šíření  $+z$  jsou transverzální vzhledem k vlnovému vektoru  $\bar{\gamma}(+\zeta_{I,mn}) = \hat{\mathbf{x}}p_m + \hat{\mathbf{y}}q_n + \hat{\mathbf{z}}\zeta_{I,mn}$ . Obdobně vlny  $\boldsymbol{\nu}_{I,mn}^{(3)}$  a  $\boldsymbol{\nu}_{I,mn}^{(4)}$  postupující ve směru šíření  $-z$  jsou transverzální s ohledem na vlnový vektor  $\bar{\gamma}(-\zeta_{I,mn}) = \hat{\mathbf{x}}p_m + \hat{\mathbf{y}}q_n - \hat{\mathbf{z}}\zeta_{I,mn}$ . Nyní můžeme napsat diagonalizační matici

$$\mathbf{T}_{I,mn}^{(u)} = \begin{bmatrix} \dot{q}_n & \dot{p}_m & \dot{q}_n & \dot{p}_m \\ \dot{q}_n\zeta_{I,mn} & \dot{p}_m\varepsilon_I/\zeta_{I,mn} & -\dot{q}_n\zeta_{I,mn} & -\dot{p}_m\varepsilon_I/\zeta_{I,mn} \\ -\dot{p}_m & \dot{q}_n & -\dot{p}_m & \dot{q}_n \\ \dot{p}_m\zeta_{I,mn} & -\dot{q}_n\varepsilon_I/\zeta_{I,mn} & -\dot{p}_m\zeta_{I,mn} & \dot{q}_n\varepsilon_I/\zeta_{I,mn} \end{bmatrix}. \quad (4.98)$$

Pro homogenní izotropní prostředí můžeme rovnici (4.79) přepsat do tvaru

$$\begin{bmatrix} e_{x,mn}^I \\ h_{y,mn}^I \\ e_{y,mn}^I \\ h_{x,mn}^I \end{bmatrix} = \mathbf{T}_{I,mn}^{(u)} \begin{bmatrix} {}^Eg_{I,mn}^+ \\ {}^Mg_{I,mn}^+ \\ {}^Eg_{I,mn}^- \\ {}^Mg_{I,mn}^- \end{bmatrix}. \quad (4.99)$$

V maticové formě

$$\begin{bmatrix} \mathbf{e}_x \\ \mathbf{h}_y \\ \mathbf{e}_y \\ \mathbf{h}_x \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \dot{\mathbf{q}} & \dot{\mathbf{p}} & \dot{\mathbf{q}} & \dot{\mathbf{p}} \\ \dot{\mathbf{q}}\zeta & \dot{\mathbf{p}}\varepsilon^u\zeta^{-1} & -\dot{\mathbf{q}}\zeta & -\dot{\mathbf{p}}\varepsilon^u\zeta^{-1} \\ -\dot{\mathbf{p}} & \dot{\mathbf{q}} & -\dot{\mathbf{p}} & \dot{\mathbf{q}} \\ \dot{\mathbf{p}}\zeta & -\dot{\mathbf{q}}\varepsilon^u\zeta^{-1} & -\dot{\mathbf{p}}\zeta & \dot{\mathbf{q}}\varepsilon^u\zeta^{-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} {}^E\mathbf{g}^+ \\ {}^M\mathbf{g}^+ \\ {}^E\mathbf{g}^- \\ {}^M\mathbf{g}^- \end{bmatrix}. \quad (4.100)$$

Pro  $p_m = q_n = 0$  (např. pro kolmý dopad) nemůžeme diagonalizační matici (4.98) použít. Musíme vycházet z rovnic (4.83) a (4.83) a potom dostaneme

$$\mathbf{T}_{I,mn}^{(u)} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & -1 & 0 \\ \varepsilon_I^{1/2} & 0 & \varepsilon_I^{1/2} & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 1 \\ 0 & \varepsilon_I^{1/2} & 0 & \varepsilon_I^{1/2} \end{bmatrix} = \left[ \boldsymbol{\nu}_{I,mn}^{(1)\perp}, \boldsymbol{\nu}_{I,mn}^{(2)\perp}, \boldsymbol{\nu}_{I,mn}^{(3)\perp}, \boldsymbol{\nu}_{I,mn}^{(4)\perp} \right]. \quad (4.101)$$

### 4.3 Podmínky spojitosti na rozhraních

Doposud jsme uvažovali řešení (4.80) v jednotlivých oblastech  $I$  ( $I = 0, 1, 2$ ). Uvažujme nyní dvě řešení v jedné oblasti  $I$ . Řešení  $\mathbf{g}_I(\bar{z})$  vztažené k libovolné rovině  $\bar{z}$  a řešení  $\mathbf{g}_I(\bar{z}_0)$  vztažené k jiné libovolné rovině  $\bar{z}_0$  jsou spolu svázány tzv. transmisní maticí  $\mathbf{U}_I(\bar{z} - \bar{z}_0)$ , která popisuje šíření vlastních modů ve směru kolmém na rozhraní.

$$\mathbf{g}_I(\bar{z}) = \mathbf{U}_I(\bar{z} - \bar{z}_0)\mathbf{g}_I(\bar{z}_0), \quad (4.102)$$

kde  $\mathbf{U}_I(\bar{z} - \bar{z}_0) = \exp[i\boldsymbol{\kappa}_I(\bar{z} - \bar{z}_0)]$  a  $\exp[i\boldsymbol{\kappa}_I(\bar{z} - \bar{z}_0)]$  je diagonální matice s prvky  $\exp[i\kappa_{I,v}(\bar{z} - \bar{z}_0)]$ .

Požadavek spojitosti tangenciálních složek polí na rovinných rozhraních, které oddělují homogenní izotropní prostředí ( $I = 0, 2$ ) od bi-periodické anizotropní mřížky ( $I = 1$ ) v  $\bar{z} = 0$  a  $\bar{z} = \bar{d}$  zavádí relace mezi amplitudami vlastních modů. S pomocí rovnice (4.79) zavedeme podmínu spojitosti na rozhraních  $\bar{z} = 0$  a  $\bar{z} = \bar{d}$ , tzn.

$$\mathbf{T}_0^u \mathbf{g}_0(0) = \mathbf{T}_1 \mathbf{g}_1(0), \quad \mathbf{T}_1 \mathbf{g}_1(d) = \mathbf{T}_2^u \mathbf{g}_2(d). \quad (4.103)$$

Tyto podmínky spojitosti můžeme napsat pomocí vazebné matice  $\mathbf{B}_{I,I+1}$  svazující  $\mathbf{g}_I$  s  $\mathbf{g}_{I+1}$  na rozhraních

$$\mathbf{g}_0(0) = \mathbf{B}_{01} \mathbf{g}_1(0), \quad \mathbf{g}_1(d) = \mathbf{B}_{12} \mathbf{g}_2(d), \quad (4.104)$$

přičemž  $\mathbf{B}_{01} = (\mathbf{T}_0^u)^{-1} \mathbf{T}_1$  a  $\mathbf{B}_{12} = (\mathbf{T}_1)^{-1} \mathbf{T}_2^u$ . Relaci mezi vlastním módy  $\mathbf{g}_0$  a  $\mathbf{g}_2$  v homogenních izotropních prostředích obklopujících bi-periodické mřížkové prostředí můžeme napsat jako

$$\mathbf{g}_0 = \begin{bmatrix} \mathbf{g}_0^+ \\ \mathbf{g}_0^- \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{W}_1 & \mathbf{W}_2 \\ \mathbf{W}_3 & \mathbf{W}_4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{g}_2^+ \\ \mathbf{g}_2^- \end{bmatrix} = \mathbf{W} \mathbf{g}_2, \quad (4.105)$$

kde matice  $\mathbf{W}$  je matice bi-periodické mřížky

$$\mathbf{W} = \mathbf{B}_{01}\mathbf{U}_1(-\bar{d})\mathbf{B}_{12}. \quad (4.106)$$

Sloupcové matice  $\mathbf{g}_I^\pm$  získáme z

$$\mathbf{g}_I^\pm = \begin{bmatrix} {}^E\mathbf{g}_I^\pm \\ {}^M\mathbf{g}_I^\pm \end{bmatrix}. \quad (4.107)$$

## 4.4 Dopadající, odražená a prošlá vlna

Pokud dopadá jednotková  $TE$  nebo  $TM$  vlna v rovině  $\phi_i$  z prostředí 0 na mřížku 1 pod obecným úhlem, jsou difrakované  $TE$  a  $TM$  vlny dány rovnicí (4.105), kde pro dopadající  $TE$  vlnu platí

$${}^E\mathbf{g}_0^+ = (0, \dots, 1, \dots, 0)^t, \quad {}^M\mathbf{g}_0^+ = \mathbf{0} \quad (4.108)$$

a pro dopadající  $TM$  vlnu platí

$${}^M\mathbf{g}_0^+ = (0, \dots, 1, \dots, 0)^t, \quad {}^E\mathbf{g}_0^+ = \mathbf{0}, \quad (4.109)$$

index  $t$  zde značí transpozici.

Dále předpokládejme, že se žádná vlna nešíří z prostředí 2 na mřížku 1, tedy  $\mathbf{g}_2^- = \mathbf{0}$ . S ohledem na rovnici (4.105) je odražená a prošlá vlna dána vztahem

$$\mathbf{g}_2^+ = (\mathbf{W}_1)^{-1}\mathbf{g}_0^+, \quad \mathbf{g}_0^- = \mathbf{W}_3(\mathbf{W}_1)^{-1}\mathbf{g}_0^+. \quad (4.110)$$

Pro obecně polarizovanou dopadající vlnu platí

$${}^E\mathbf{g}_0^+ = (0, \dots, {}^Eg_{0,00}^+, \dots, 0)^t, \quad {}^M\mathbf{g}_0^+ = (0, \dots, {}^Mg_{0,00}^+, \dots, 0)^t, \quad (4.111)$$

kde komplexní  ${}^Eg_{0,00}^+$  a  ${}^Mg_{0,00}^+$  splňují  $|{}^Eg_{0,00}^+|^2 + |{}^Mg_{0,00}^+|^2 = 1$ . Pomocí azimuthu  $\psi_i = \psi_{0,00}^+$  a ellipticity  $\epsilon_i = \epsilon_{0,00}^+$  můžeme předchozí vztah přepsat na

$${}^Eg_{0,00}^+ = \sin \psi_{0,00}^+ \cos \epsilon_{0,00}^+ + i \cos \psi_{0,00}^+ \sin \epsilon_{0,00}^+, \quad (4.112)$$

$${}^Mg_{0,00}^+ = \cos \psi_{0,00}^+ \cos \epsilon_{0,00}^+ - i \sin \psi_{0,00}^+ \sin \epsilon_{0,00}^+. \quad (4.113)$$

Abychom zjistili polarizační charakteristiku difrakovaných odražených vln, šířící se s vlnovým vektorem  $\bar{\gamma}_{0,mn}^- = \hat{x}p_m + \hat{y}q_n - \hat{z}\zeta_{0,mn}$ , napišeme odpovídající amplitudy vlastních modů pomocí  $\psi_{0,mn}^-$  a  $\epsilon_{0,mn}^-$

$${}^Eg_{0,mn}^- = A_{0,mn}^-(\sin \psi_{0,mn}^- \cos \epsilon_{0,mn}^- + i \cos \psi_{0,mn}^- \sin \epsilon_{0,mn}^-), \quad (4.114)$$

$${}^Mg_{0,mn}^- = A_{0,mn}^-(\cos \psi_{0,mn}^- \cos \epsilon_{0,mn}^- - i \sin \psi_{0,mn}^- \sin \epsilon_{0,mn}^-), \quad (4.115)$$

kde  $A_{0,mn}^-$  je komplexní amplituda. Pro prošlé vlny šířící se s vlnovým vektorem  $\bar{\gamma}_{2,mn}^+ = \hat{x}p_m + \hat{y}q_n + \hat{z}\zeta_{2,mn}$  platí obdobné vztahy

$${}^E g_{2,mn}^+ = A_{2,mn}^+ (\sin \psi_{2,mn}^+ \cos \epsilon_{2,mn}^+ + i \cos \psi_{2,mn}^+ \sin \epsilon_{2,mn}^+) , \quad (4.116)$$

$${}^M g_{2,mn}^+ = A_{2,mn}^+ (\cos \psi_{2,mn}^+ \cos \epsilon_{2,mn}^+ - i \sin \psi_{2,mn}^+ \sin \epsilon_{2,mn}^+) . \quad (4.117)$$

Rovnici (4.105) můžeme přepsat do tvaru obecné Yehovy matice  $\mathbf{M}$  [45], pokud pře- rozdělíme vlastní módy následujícím způsobem

$$\begin{bmatrix} {}^E \mathbf{g}_0^+ \\ {}^E \mathbf{g}_0^- \\ {}^M \mathbf{g}_0^+ \\ {}^M \mathbf{g}_0^- \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{M}_{11} & \mathbf{M}_{12} & \mathbf{M}_{13} & \mathbf{M}_{14} \\ \mathbf{M}_{21} & \mathbf{M}_{22} & \mathbf{M}_{23} & \mathbf{M}_{24} \\ \mathbf{M}_{31} & \mathbf{M}_{32} & \mathbf{M}_{33} & \mathbf{M}_{34} \\ \mathbf{M}_{41} & \mathbf{M}_{42} & \mathbf{M}_{43} & \mathbf{M}_{44} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} {}^E \mathbf{g}_2^+ \\ {}^E \mathbf{g}_2^- \\ {}^M \mathbf{g}_2^+ \\ {}^M \mathbf{g}_2^- \end{bmatrix} . \quad (4.118)$$

V takovémto případě odpovídá diagonalizační matici  $\mathbf{T}$  Yehově dynamické matici  $\mathbf{D}$  a transmisní matice  $\mathbf{U}$  odpovídá Yehově propagační matici  $\mathbf{P}$ . Stejně jako výše, předpokládáme, že žádná vlna nedopadá na mřížku z prostředí 2, t.j.  ${}^E \mathbf{g}_2^- = {}^M \mathbf{g}_2^- = \mathbf{0}$ . Pro dopadající  $TE$  vlnu popsanou rovnicí (4.108) dostáváme pro prošlé a odražené vlny

$${}^E \mathbf{g}_2^+ = (\mathbf{M}_{11} - \mathbf{M}_{13} \mathbf{M}_{33}^{-1} \mathbf{M}_{31})^{-1} {}^E \mathbf{g}_0^+ , \quad (4.119)$$

$${}^M \mathbf{g}_2^+ = -(\mathbf{M}_{33} - \mathbf{M}_{31} \mathbf{M}_{11}^{-1} \mathbf{M}_{13})^{-1} \mathbf{M}_{31} \mathbf{M}_{11}^{-1} {}^E \mathbf{g}_0^+ , \quad (4.120)$$

$${}^E \mathbf{g}_0^- = (\mathbf{M}_{21} - \mathbf{M}_{23} \mathbf{M}_{33}^{-1} \mathbf{M}_{31})(\mathbf{M}_{11} - \mathbf{M}_{13} \mathbf{M}_{33}^{-1} \mathbf{M}_{31})^{-1} {}^E \mathbf{g}_0^+ , \quad (4.121)$$

$${}^M \mathbf{g}_0^- = (\mathbf{M}_{41} - \mathbf{M}_{43} \mathbf{M}_{33}^{-1} \mathbf{M}_{31})(\mathbf{M}_{11} - \mathbf{M}_{13} \mathbf{M}_{33}^{-1} \mathbf{M}_{31})^{-1} {}^E \mathbf{g}_0^+ \quad (4.122)$$

a pro dopadající  $TM$  vlnu danou rovnicí (4.109)

$${}^M \mathbf{g}_2^+ = (\mathbf{M}_{33} - \mathbf{M}_{31} \mathbf{M}_{11}^{-1} \mathbf{M}_{13})^{-1} {}^M \mathbf{g}_0^+ , \quad (4.123)$$

$${}^E \mathbf{g}_2^+ = -(\mathbf{M}_{11} - \mathbf{M}_{13} \mathbf{M}_{33}^{-1} \mathbf{M}_{31})^{-1} \mathbf{M}_{13} \mathbf{M}_{33}^{-1} {}^M \mathbf{g}_0^+ , \quad (4.124)$$

$${}^M \mathbf{g}_0^- = (\mathbf{M}_{43} - \mathbf{M}_{41} \mathbf{M}_{11}^{-1} \mathbf{M}_{13})(\mathbf{M}_{33} - \mathbf{M}_{31} \mathbf{M}_{11}^{-1} \mathbf{M}_{13})^{-1} {}^M \mathbf{g}_0^+ , \quad (4.125)$$

$${}^E \mathbf{g}_0^- = (\mathbf{M}_{23} - \mathbf{M}_{21} \mathbf{M}_{11}^{-1} \mathbf{M}_{13})(\mathbf{M}_{33} - \mathbf{M}_{31} \mathbf{M}_{11}^{-1} \mathbf{M}_{13})^{-1} {}^M \mathbf{g}_0^+ . \quad (4.126)$$

Nyní můžeme napsat reflexní koeficienty mřížky, které nám umožní vyjádřit Kerrovu rotaci a ellipticitu pomocí prvků Yehovy matice  $\mathbf{M}$ .

$$r_{12} = \left( \frac{{}^E \mathbf{g}_0^-}{{}^E \mathbf{g}_0^+} \right)_{M \mathbf{g}_0^+=0} = \frac{\mathbf{M}_{21} \mathbf{M}_{33} - \mathbf{M}_{23} \mathbf{M}_{31}}{\mathbf{M}_{11} \mathbf{M}_{33} - \mathbf{M}_{13} \mathbf{M}_{31}} , \quad (4.127)$$

$$r_{14} = \left( \frac{{}^M \mathbf{g}_0^-}{{}^M \mathbf{g}_0^+} \right)_{M \mathbf{g}_0^+=0} = \frac{\mathbf{M}_{41} \mathbf{M}_{33} - \mathbf{M}_{43} \mathbf{M}_{31}}{\mathbf{M}_{11} \mathbf{M}_{33} - \mathbf{M}_{13} \mathbf{M}_{31}} , \quad (4.128)$$

$$r_{34} = \left( \begin{smallmatrix} {}^M\mathbf{g}_0^- \\ {}^M\mathbf{g}_0^+ \end{smallmatrix} \right)_{E\mathbf{g}_0^+=0} = \frac{\mathbf{M}_{43}\mathbf{M}_{11} - \mathbf{M}_{41}\mathbf{M}_{13}}{\mathbf{M}_{11}\mathbf{M}_{33} - \mathbf{M}_{13}\mathbf{M}_{31}}, \quad (4.129)$$

$$r_{32} = \left( \begin{smallmatrix} {}^E\mathbf{g}_0^- \\ {}^M\mathbf{g}_0^+ \end{smallmatrix} \right)_{E\mathbf{g}_0^+=0} = \frac{\mathbf{M}_{23}\mathbf{M}_{11} - \mathbf{M}_{21}\mathbf{M}_{13}}{\mathbf{M}_{11}\mathbf{M}_{33} - \mathbf{M}_{13}\mathbf{M}_{31}}. \quad (4.130)$$

Pro dopadající lineárně polarizované světlo můžeme Jonesovu matici reflexe napsat ve tvaru

$$\mathbf{S}^{XY} = \begin{bmatrix} r_{ss} & r_{sp} \\ r_{ps} & r_{pp} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} r_{12} & r_{32} \\ -r_{14} & -r_{34} \end{bmatrix}. \quad (4.131)$$

S pomocí definic (2.46) a (2.47) lze poté napsat vztahy pro Kerrův jev

$$\phi_{K_s} = -\frac{r_{ps}}{r_{ss}} = \frac{r_{14}}{r_{12}} = \frac{\mathbf{M}_{41}\mathbf{M}_{33} - \mathbf{M}_{43}\mathbf{M}_{31}}{\mathbf{M}_{21}\mathbf{M}_{33} - \mathbf{M}_{23}\mathbf{M}_{31}}, \quad (4.132)$$

$$\phi_{K_p} = \frac{r_{sp}}{r_{pp}} = -\frac{r_{32}}{r_{34}} = \frac{\mathbf{M}_{23}\mathbf{M}_{11} - \mathbf{M}_{21}\mathbf{M}_{13}}{\mathbf{M}_{43}\mathbf{M}_{11} - \mathbf{M}_{41}\mathbf{M}_{13}}. \quad (4.133)$$

## 4.5 Anizotropní bi-periodické multivrstvy

Rozšíření výše odvozeného formalismu provedl jako první Roskushima [46]. Uvažujme  $N$  bi-periodických vrstev obklopených z obou stran homogenními prostředími s vlastními vektory  $\mathbf{g}_0$  a  $\mathbf{g}_{N+1}$ . Tyto vektory jsou spolu svázány vztahem

$$\mathbf{g}_0 = \mathbf{W}\mathbf{g}_{N+1}. \quad (4.134)$$

Nechť jsou  $\bar{d}_1, \bar{d}_2, \dots, \bar{d}_N$  redukované tloušťky vrstev tvořící anizotropní multivrstevnatý systém. Přenosová matice  $W$  takovéto struktury je potom dána rovnicí

$$\mathbf{W} = \mathbf{B}_{01}\mathbf{U}_1(-\bar{d}_1)\mathbf{B}_{12}\dots\mathbf{U}_N(-\bar{d}_N)\mathbf{B}_{N,N+1}, \quad (4.135)$$

kde  $\mathbf{B}_{I,I+1}$  jsou vazebné matice jednotlivých vrstev, které lze napsat jako

$$\mathbf{B}_{I,I+1} = \mathbf{T}_I^{-1}\mathbf{T}_{I+1}. \quad (4.136)$$

Výše uvedeným způsobem lze získat Yehovu matici struktury  $M$  a spočítat Kerrův magnetooptický jev na takovéto multivrstevnaté struktuře.

## 4.6 Jednoduchá vrstva na nemagnetickém substrátu

Výše odvozený formalismus je obecný a lze ho velmi efektivně využít například i ke zkoumání vlivu drsnosti rozhraní. My však pro jednoduchost budeme uvažovat ideální, ostré

rozhraní a proto přejdeme ke speciálnímu případu tohoto formalismu a to k Yehově formalismu. To nám umožní spočítat modelová spektra Kerrovy rotace a ellipticity a porovnat je s experimentálními daty.

Uvažujme tedy nyní případ jednoduché homogenní ( $p = q = 0$ ) anizotropní vrstvy na nekonečném nemagnetickém substrátu, což odpovídá struktuře námi měřených vzorků. Nejdříve si uvedeme případ kolmého dopadu elektromagnetické vlny na polárně magnetovaný vzorek. Dále si pak uvedeme případ longitudinálně magnetovaného vzorku a elektromagnetické vlny dopadající pod obecným úhlem.

#### 4.6.1 Polární Kerrův jev při kolmém dopadu

V kapitole 3. jsme si ukázali, že v polární geometrii nabývá tenzor permitivity tvaru (3.54). Pro případ kolmého dopadu je  $\phi_i = 0$  a  $\theta_i = 0$  tedy  $p_0 = q_0$ . Charakteristická rovnice (4.81) se redukuje na tvar

$$s^4 - 2\varepsilon_{xx}s^2 + \varepsilon_{xx}^2 + \varepsilon_{xy}^2 = 0 . \quad (4.137)$$

Z důvodu zachování konzistentnosti značení s jinými autory [24, 22] zavedeme označení  $s = N_z$ . Řešením rovnice (4.137) dostaváme vlastní hodnoty

$$N_z^2 = \varepsilon_{xx} \pm i\varepsilon_{xy} . \quad (4.138)$$

Zavedeme si označení

$$N_+ = (\varepsilon_{xx} + i\varepsilon_{xy})^{1/2} , \quad (4.139)$$

$$N_- = (\varepsilon_{xx} - i\varepsilon_{xy})^{1/2} . \quad (4.140)$$

Vrstvou se tedy šíří čtyři kruhově polarizované vlastní módy. Yehova dynamická matice pro tento speciální případ nabývá tvaru [24]

$$\mathbf{D}^{(n)} = \frac{\sqrt{2}}{2} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ N_+^{(n)} & -N_+^{(n)} & N_-^{(n)} & -N_-^{(n)} \\ i & i & -i & -i \\ -iN_+^{(n)} & iN_+^{(n)} & iN_-^{(n)} & iN_-^{(n)} \end{bmatrix} \quad (4.141)$$

a Yehova propagační matice nabývá tvaru

$$\mathbf{P}^{(n)} = \begin{bmatrix} \exp i\frac{\omega}{c}N_+^{(n)}t_n & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \exp -i\frac{\omega}{c}N_+^{(n)}t_n & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \exp i\frac{\omega}{c}N_-^{(n)}t_n & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \exp -i\frac{\omega}{c}N_-^{(n)}t_n \end{bmatrix} , \quad (4.142)$$

kde  $\omega$  je frekvence dopadající elektromagnetické vlny a  $t_n$  je tloušťka vrstvy. Výslednou Yehovu matici struktury dostaneme vynásobením výše uvedených matic

$$\mathbf{M} = \mathbf{D}_0^{-1} \mathbf{D}_1 \mathbf{P}_1 \mathbf{D}_1^{-1} \mathbf{D}_2 . \quad (4.143)$$

Pro kolmý dopad je Yehova matice struktury  $\mathbf{M}$  diagonální, což znamená, že nedochází k interakci mezi kruhově polarizovanými vlastními módy.

Reflexní koeficienty pro dopadající LCP a RCP vlnu určíme (4.127) a (4.129). Vzhledem k tomu, že v tomto případě nedochází k interakci mezi kruhově polarizovanými vlnami, dostaváme [24]

$$r_+ = \frac{M_{21}}{M_{11}} , \quad (4.144)$$

$$r_- = \frac{M_{43}}{M_{33}} . \quad (4.145)$$

Nyní můžeme vyjádřit magnetooptické parametry v reprezentaci kruhových polarizací. Podle (2.57) je magnetooptický komplexní parametr

$$\chi_{LR}^K = \frac{r_+}{r_-} = \frac{M_{11}M_{43}}{M_{21}M_{33}} . \quad (4.146)$$

S pomocí (2.59) a (2.60) si můžeme vyjádřit Kerrovu rotaci a Kerrovu ellipticitu

$$\theta_K = \frac{1}{2} \arg \left( \frac{r_-}{r_+} \right) , \quad (4.147)$$

$$\epsilon_K = \frac{|r_-| - |r_+|}{|r_-| + |r_+|} . \quad (4.148)$$

### 4.6.2 Longitudinální Kerrův jev

Pro longitudinální geometrii nabývá tenzor permitivity tvaru (3.56). Jako v předchozím případě platí  $\phi_i = 0$ , a tudíž  $q_0 = 0$ . Avšak díky obecnému úhlu dopadu  $\theta_i \neq 0$  a tedy i  $p_0 \neq 0$ . Charakteristická rovnice (4.81) má složitější tvar než v případě kolmého dopadu

$$s^4 - s^2 \left[ 2(\varepsilon_{xx} - p_0^2) + \frac{\varepsilon_{xz}^2}{\varepsilon_{xx}} \right] + (\varepsilon_{xx} - p_0^2)^2 + \varepsilon_{xz}^2 = 0 . \quad (4.149)$$

Opět zavedeme označení  $s = N_z$  a nyní ještě  $p_0 = N_y$ . Vlastní čísla mají nyní složitější tvar

$$N_{z\pm}^2 = \varepsilon_{xx} - N_y^2 + \frac{\varepsilon_{xz}}{2\varepsilon_{xx}} \left[ \pm \sqrt{4\varepsilon_{xx}N_y^2 - \varepsilon_{xz}^2} + \varepsilon_{xz} \right] . \quad (4.150)$$

Dynamická Yehova matice  $\mathbf{D}$  pro longitudinální orientaci magnetizace je potom [22]

$$\mathbf{D} = \begin{bmatrix} D_{11} & -D_{11} & D_{13} & -D_{13} \\ D_{21} & D_{21} & D_{23} & D_{23} \\ D_{31} & -D_{31} & D_{33} & D_{33} \\ D_{41} & -D_{41} & D_{43} & -D_{43} \end{bmatrix} , \quad (4.151)$$

s prvky

$$\begin{aligned}
 D_{11} &= \varepsilon_{xz} N_y N_{z+} , \\
 D_{13} &= \varepsilon_{xz} N_y N_{z-} , \\
 D_{31} &= (\varepsilon_{xx} - N_y^2)(\varepsilon_{xx} - N_y^2 - N_{z+}^2) - \varepsilon_{xz}\varepsilon_{zx} , \\
 D_{33} &= (\varepsilon_{xx} - N_y^2)(\varepsilon_{xx} - N_y^2 - N_{z-}^2) - \varepsilon_{xz}\varepsilon_{zx} , \\
 D_{43} &= -N_{z+}[\varepsilon_{xx}(\varepsilon_{xx} - N_y^2 - N_{z+}^2) - \varepsilon_{xz}\varepsilon_{zx}] , \\
 D_{43} &= -N_{z-}[\varepsilon_{xx}(\varepsilon_{xx} - N_y^2 - N_{z-}^2) - \varepsilon_{xz}\varepsilon_{zx}] .
 \end{aligned}$$

Yehova propagační matice pro longitudinální geometrii má stejný tvar (4.142) jako v případě geometrie polární. Výslednou Yehovu matici struktury dostaneme opět vynásobením

$$\boldsymbol{M} = \boldsymbol{D}_0^{-1} \boldsymbol{D}_1 \boldsymbol{P}_1 \boldsymbol{D}_1^{-1} \boldsymbol{D}_2 . \quad (4.152)$$

V tomto případě však matice  $\boldsymbol{M}$  již není diagonální. V prostředí se opět šíří čtyři vlastní módy, které spolu nyní interagují. Výsledný vztah pro Kerrovu rotaci a ellipticitu dostaneme užitím (4.132) a (4.133).

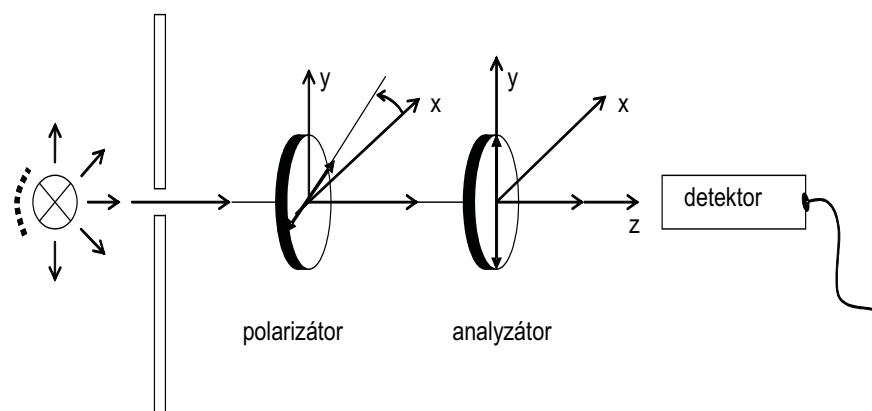
# Kapitola 5

## Experimentální metody měření Kerrova jevu

Existují různé experimentální techniky používané k měření magnetooptických vlastností materiálů. Každá z nich má své výhody i nevýhody. V první části této kapitoly si uvedeme základní principy některých z nich. Protože v naší laboratoři používáme pro měření metodu modulace azimutu, bude zbytek kapitoly věnován právě této metodě. Ukážeme si, jak fungují základní optické prvky používané při této metodě, popíšeme si aparaturu použitou při měření Kerrova jevu na vzorcích, které jsou předmětem našeho zkoumání a popíšeme kalibrační proceduru použitou při našich měřeních.

### 5.1 Základní principy experimentálních metod

Uvažujme dva lineární polarizátory umístěné za sebou podle obr. 5.1.



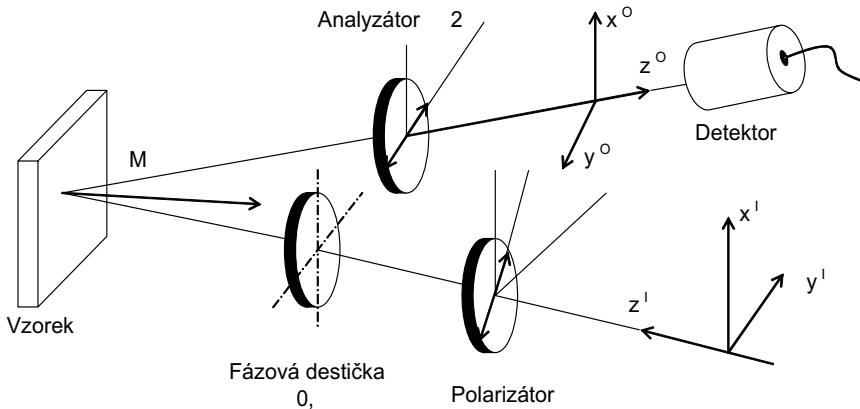
Obrázek 5.1: Zkrížené polarizátory při stejnosměrném měření

Intenzita světla dopadajícího na detektor je závislá na úhlu natočení polarizátorů vůči

sobě a je dána Malusovým zákonem

$$I = I_0 \sin^2 \alpha . \quad (5.1)$$

Vložme nyní mezi tyto dva polarizátory reflektující vzorek a fázovou destičku podle obr. 5.2.



Obrázek 5.2: Soustava polarizátor, fázová destička, reflektující vzorek v magnetickém poli a analyzátor.

Jonesův vektor popisující polarizaci vystupujícího světla z této soustavy optických prvků je

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_{xy}^{(O)} &= r \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & -\phi_k \\ -\phi_k & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e^{i\frac{\delta}{2}} & 0 \\ 0 & e^{-i\frac{\delta}{2}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos \alpha \\ \sin \alpha \end{bmatrix} = \\ &= r \begin{bmatrix} 0 \\ -\phi_k e^{i\frac{\delta}{2}} \cos \alpha - e^{-i\frac{\delta}{2}} \sin \alpha \end{bmatrix}, \end{aligned} \quad (5.2)$$

kde  $r$  je reflexní koeficient vzorku. Matice vzorku jsme získali dosazením (2.46) do (2.51). Intenzita světla je dána

$$I \approx \frac{1}{2} \mathbf{J}_{xy}^{(O)} \mathbf{J}_{xy}^{(O)\dagger} = \frac{R}{2} \left[ \sin^2 \alpha + |\phi_k|^2 \cos^2 \alpha + \sin(2\alpha) \Re(\phi_k e^{i\frac{\delta}{2}}) \right] , \quad (5.3)$$

kde  $R$  je reflektivita vzorku. Podle toho, jak jsme definovali magnetooptické parametry (2.46) můžeme vztah (5.3) napsat ve tvaru

$$I \approx \frac{R}{2} [\sin^2 \alpha + (\theta_k \cos \delta + \epsilon_k \sin \delta) \sin(2\alpha)] = I_M + \Delta I_M . \quad (5.4)$$

$I_M$  je člen reprezentující klasický Malusův zákon (5.1) a 2. člen  $\Delta I_M$  odpovídá magnetooptickému příspěvku vzorku. V závislosti na fázovém zpoždění potom můžeme měřit buď Kerrovu rotaci ( $\delta = 0$ ), nebo Kerrovu ellipticitu ( $\delta = \frac{\pi}{2}$ ). Díky závislosti  $\sin 2\alpha$  vymizí magnetooptický příspěvek při zkřížených polarizátorech ( $\alpha = 0$ ) a naopak nabývá

maxima pro  $\alpha = \frac{\pi}{4}$ . Toto usporádání představuje nejjednodušší stejnosměrnou metodu měření Kerrova jevu.

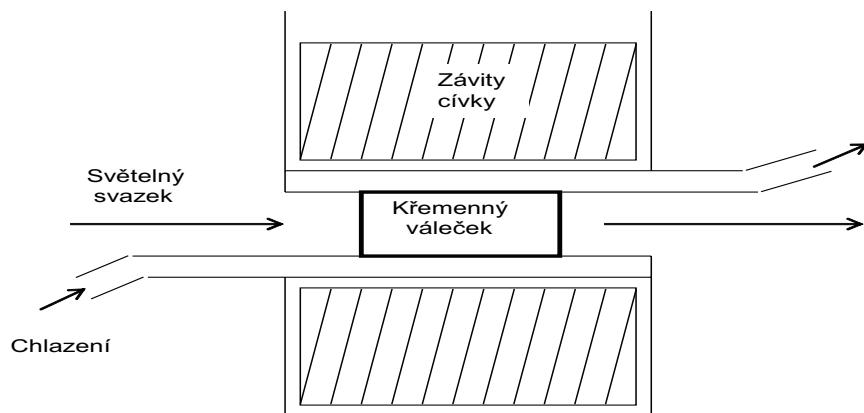
Další používanou stejnosměrnou metodou je měření rozdílu intenzit. V tomto případě je do soustavy polarizátor - analyzátor přidán Wollastonův hranol, který rozdělí svazek vystupujícího světla na dva s polarizacemi  $\theta = \pm \frac{\pi}{4}$ . Z rozdílu intenzit těchto svazků lze potom určit požadovaný Kerrův magnetooptický jev. Díky měření rozdílu intenzit je poměr signálu ku šumu v tomto uspořádání vyšší než v předchozím případě. Další skupinou experimentálních metod jsou tzv. modulační metody. Mezi jejich přednosti patří odstranění některých nevýhod stejnosměrných metod. A to polovodičového šumu a nepřesného nastavení zkřížení polarizátoru a analyzátoru, které je způsobeno plochým minimem Malusova zákona (5.1). Existují dvě modulační metody: metoda modulace azimutu a metoda modulace ellipticity. Nás bude zajímat první z nich. Metoda modulace ellipticity je detailněji popsána např. v [24].

## 5.2 Metoda modulace azimutu

Tato metoda spočívá v modulaci azimutu polarizační elipsy harmonicky v čase.

### 5.2.1 Modulační cela

Mezi polarizátor a analyzátor zařadíme nyní optický prvek, který se nazývá Faradayova modulační cela. Je to křemenný váleček vložený do solenoidální cívky (obr. 5.3)



Obrázek 5.3: Faradayova modulační cela

Tato cela využívá Faradayovy rotace v křemenném skle a díky sinusové závislosti modulačního proudu, který jí protéká, harmonicky v čase moduluje azimut polarizace vstupující

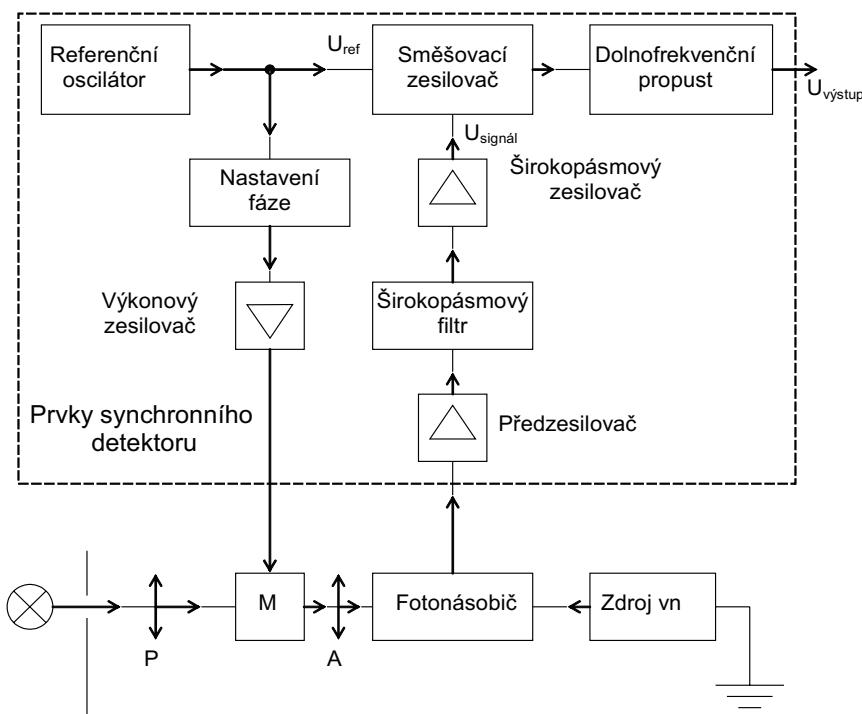
vlny. Jonesova matice Faradayovy modulační cely je pak

$$M = \begin{bmatrix} \cos(\beta_0 \sin \omega t) & -\sin(\beta_0 \sin \omega t) \\ \sin(\beta_0 \sin \omega t) & \cos(\beta_0 \sin \omega t) \end{bmatrix}, \quad (5.5)$$

kde  $\beta_0$  je amplituda modulace a  $\omega$  je modulační frekvence.

### 5.2.2 Synchronní detekce

Abychom využili modulace azimutu, budeme sledovat intenzitu světla vystupujícího z analyzátoru pomocí synchronní detekce [48]. Její princip je znázorněn na obr. 5.4



Obrázek 5.4: Schéma synchronní detekce pro metodu modulace azimutu.

Základním prvkem synchronního detektoru je směšovací zesilovač. V něm dochází k násobení napětí přivedeného z referenčního oscilátoru a zesíleného napětí z fotonásobiče.

$$U_{ref} = U_r \cos \omega t, \quad (5.6)$$

$$U_{signal} = U_s \sin(\omega t + \varphi), \quad (5.7)$$

$$U_{ref} \times U_{signal} = \frac{U_r U_s}{2} [\sin(2\omega t + \varphi) + \sin \varphi]. \quad (5.8)$$

Odfiltrujeme - li střídavou složku, získáme výstupní napětí  $U_{vyst}$

$$U_{vyst} = \frac{U_r U_s}{2} \sin \varphi. \quad (5.9)$$

Výstupní napětí je tedy závislé pouze na amplitudách měřeného a referenčního napětí a jeho fázovém rozdílu  $\varphi$ . Při tomto postupu předpokládáme, že synchronní detektor pracuje jako ideální selektivní zesilovač a z měřeného signálu využívá pouze složku s frekvencí  $\omega$ . Jonesův vektor vystupujícího světla ze soustavy polarizátor - modulační cela - analyzátor spočítáme jednoduše

$$\mathbf{J}_{xy} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \mathbf{M} \begin{bmatrix} \cos \alpha \\ \sin \alpha \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ \sin(\beta_0 \sin \omega t + \alpha) \end{bmatrix}. \quad (5.10)$$

Intenzita světla na fotonásobiči je pak dána

$$I \approx \frac{1}{2} \mathbf{J}_{xy}^2 = \frac{1}{2} \sin^2(\beta_0 \sin \omega t + \alpha). \quad (5.11)$$

Jelikož  $\beta_0$  i  $\alpha$  jsou malé úhly, můžeme funkci sinus rozvinout do Taylorovy řady a omezit se pouze na první člen rozvoje

$$I \approx \beta_0^2 \frac{\sin^2 \omega t}{2} + \beta_0 \alpha \sin \omega t + \frac{\alpha^2}{2} = \beta_0^2 \frac{1 - \cos 2\omega t}{4} + \beta_0 \alpha \sin \omega t + \frac{\alpha^2}{2}. \quad (5.12)$$

Složka s frekvencí referenčního signálu (5.12) je potom

$$I_\omega \approx \beta_0 \alpha \sin \omega t. \quad (5.13)$$

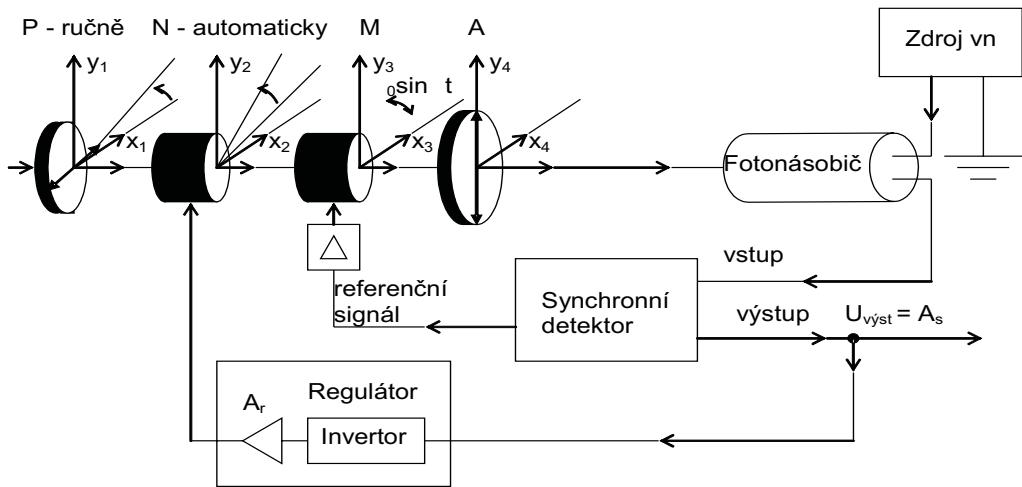
Jelikož napětí z fotonásobiče  $U_S \sim I$ , je výstupní napětí stejně jako intenzita  $I$  lineární funkci odchylky polarizátorů od zkřížené polohy. Polarizátory jsou tedy zkříženy, pokud  $U_{vyst} = 0$ . Tímto způsobem je zvýšena přesnost nastavení zkřížené polohy oproti stejnosměrným metodám.

### 5.2.3 Kompenzační cela a zpětnovazební smyčka

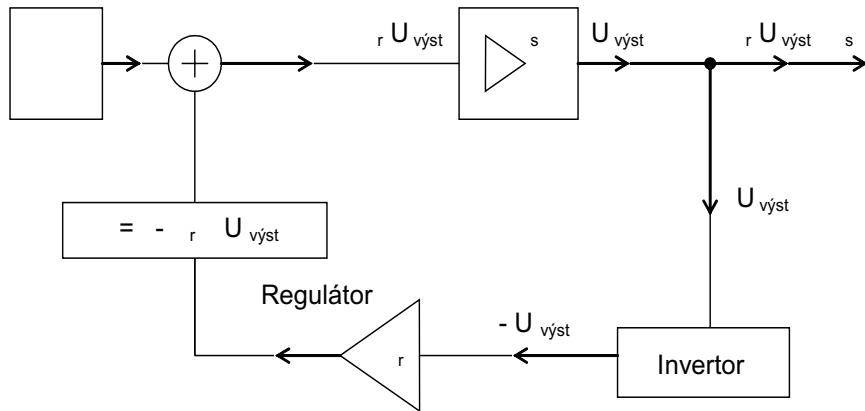
Abychom nemuseli natáčet polarizátorem do zkřížené polohy ručně, vložíme do optické soustavy další prvek - Faradayovu kompenzační celu N. Polohu roviny polarizace světla vystupujícího z této soustavy prvků pak můžeme řídit velikostí a směrem proudu procházejícím nulovací celou. A proto není nutný žádný mechanický pohyb negativně ovlivňující měření. Při zavedení záporné zpětné vazby, kdy je proud nulovací celou řízen regulátorem v závislosti na  $U_{vyst}$  se zkřížená poloha polarizátorů nastavuje zcela automaticky. Pokud nulovací cela stáčí rovinu polarizace o úhel  $\zeta$  (obr. 5.5) je detekovaná intenzita na frekvenci  $\omega$  podle analogie s (5.13) dána vztahem

$$I_\omega \approx \beta_0 (\alpha + \zeta) \sin \omega t. \quad (5.14)$$

Nyní si podrobně vysvětlíme funkci zpětnovazební smyčky, jejíž schéma je znázorněno na



Obrázek 5.5: Soustava prvků řízená zpětnovazební regulační smyčkou.



Obrázek 5.6: Popis činnosti zpětnovazební regulační smyčky.

obrázku 5.6.

Definujeme si celkové zesílení měřící aparatury bez zpětné vazby

$$A_s = \frac{\partial U_{vyst}}{\partial (\alpha + \eta)} \quad [V \cdot \text{deg}^{-1}] , \quad (5.15)$$

celkové zesílení regulátoru

$$A_r = \frac{\partial \eta}{\partial U_{vyst}} \quad [\text{deg} \cdot V^{-1}] \quad (5.16)$$

a celkové zesílení regulační smyčky

$$g = A_r \cdot A_s . \quad (5.17)$$

Podle obr. 5-6 pak lze jednoduše napsat

$$U_{vyst} = A_s(\alpha - A_r U_{vyst}) , \quad (5.18)$$

a

$$\eta = -A_r U_{vyst} , \quad (5.19)$$

z čehož vyplývá

$$U_{vyst} = \frac{A_s}{1 + A_r A_s} \alpha \quad (5.20)$$

a

$$\eta = -\frac{A_r A_s}{1 + A_r A_s} \alpha = -\frac{g}{1 + g} \alpha . \quad (5.21)$$

Pro dostatečně veliké zesílení  $g$  regulační smyčky lze vztah (5.21) přepsat do tvaru

$$\eta \approx -\alpha . \quad (5.22)$$

Při dostatečně velikém zesílení tedy nulovací cela natáčí rovinu polarizace do polohy rovnoběžné s osou  $\hat{x}$ , čímž automaticky nastavuje polarizátory do zkřížené polohy. Pokud platí vztah (5.22), dosazením do (5.19) získáme

$$U_{vyst} \approx \frac{\alpha}{A_r} \quad (5.23)$$

a výstupní signál je opět úměrný natočení polarizátoru, přičemž nezávisí na zesílení  $A_s$ . Citlivost aparatury je dána vztahem

$$C = \frac{\partial U_{vyst}}{\partial \alpha} \approx \frac{1}{A_r} \quad (5.24)$$

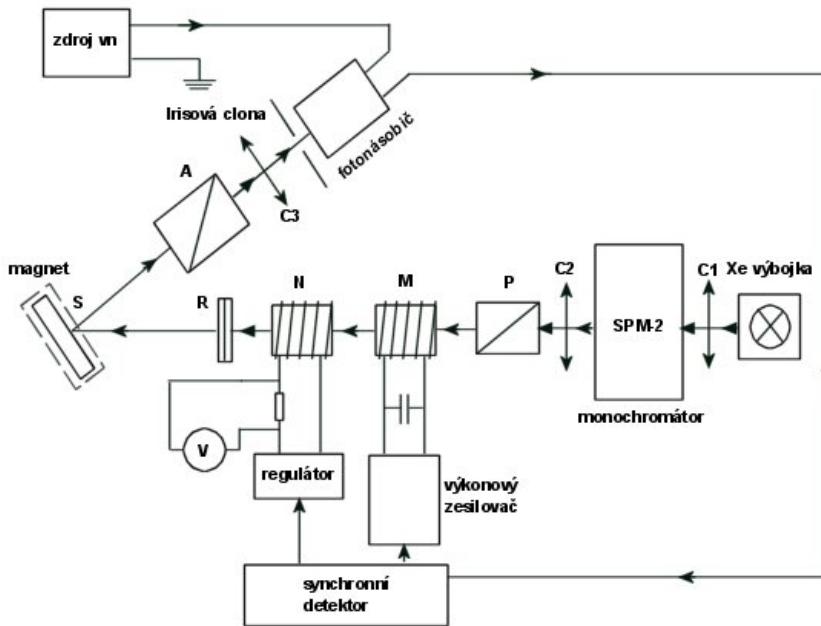
a roste s klesajícím zesílením regulátoru.

Hlavní výhody metody modulace azimutu tedy jsou:

- zvýšení poměru mezi užitečným signálem a šumem
- průběh intenzity světla za analyzátorem je lineární funkcí odchylky od zkřížené polohy
- zkřížení polarizátorů je nastavováno automaticky bez mechanických zásahů. Při velkém zesílení  $g$  je nastavení velmi přesné
- při velkém  $g$  nezávisí velikost měřeného úhlu na intenzitě svazku dopadajícího na detektor

### 5.3 Magnetooptický spektrometr

Pro naše měření byl použit magnetooptický spektrometr, který vychází z principu popsaného Billardonem [49], přičemž měření ellipticity je původní. Schéma aparatury je znázorněno na obr. 5.7.



Obrázek 5.7: Schéma magnetooptického spektrometru.

Jako zdroj světla je použita vysokotlaká Xe výbojka (Osram XBO 450W/1) v křemenné baňce. Generované světlo prochází hranolovým monochromátorem (SPM - 2 Carl Zeiss Jena) a systémem čočka  $C_2$  polarizátor  $P$  a Faradayovy cely  $M$  a  $N$ . Čočka a cely jsou vyrobeny z velmi čistého křemenného skla Suprasil s propustností v UV oblasti záření. Teplota Faradayových cel je udržována na konstantní teplotě pomocí uzavřeného oběhu s termostatem. Polarizátor  $P$  je kalcitový, jehož rovinu propustnosti nastavujeme do polohy  $\alpha$  pomocí mikrometrického šroubu (1 otáčka odpovídá 1/9 stupně). Pokud měříme ellipticitu, tak před odrazem na vzorku prochází světlo ještě okalibrovanými fázovými destičkami  $R$ . Po odrazu na vzorku  $S$  umístěném v elektromagnetu prochází světlo analyzátem  $A$  (opět kalcitový) a čočkou  $C_3$ , za níž je umístěna irisová clona a fotonásobič. Pro naše experimenty jsme použili fotonásobič Hamamatsu R3310 - 02 s InGaAs fotokatodou. Díky použitým prvkům je možné s aparaturou měřit v intervalu vlnových délek 260 - 1000 nm a v magnetických polích 0.1 až 0.5 T. Jelikož napájení nulovací cely obstarává velice stabilní proudový zdroj (stabilita  $10^{-4}$  A), můžeme Kerrův jev měřit s přesností na  $10^{-3}$  stupně.

Nyní popíšeme funkci magnetooptického spektrometru pomocí Jonesova formalismu. Užitím matic příslušných optických prvků (2.41) - (2.43) a reflexní matice můžeme vyjádřit

Jonesův vektor vlny dopadající na detektor jako součin

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_{XY}^O = & \begin{bmatrix} \cos^2 \xi & \cos \xi \sin \xi \\ \cos \xi \sin \xi & \sin^2 \xi \end{bmatrix} \begin{bmatrix} r_{ss} & r_{sp} \\ r_{ps} & r_{pp} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e^{i\frac{\delta}{2}} & 0 \\ 0 & e^{-i\frac{\delta}{2}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos \eta & -\sin \eta \\ \sin \eta & \cos \eta \end{bmatrix} \times \\ & \times \begin{bmatrix} \cos(\beta_0 \sin \omega t) & -\sin(\beta_0 \sin \omega t) \\ \sin(\beta_0 \sin \omega r) & \cos(\beta_0 \sin \omega t) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos \alpha \\ \sin \alpha \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (5.25)$$

Magnetooptická spektra měříme při dvou speciálních orientacích analyzátoru

- propustnost p polarizace ( $\xi = \frac{\pi}{2}$ )
- propustnost s polarizace ( $\xi = 0$ )

Pokud uvažujeme pouze tyto dva případy, dostaneme

$$\mathbf{J}_{XY}^O = \begin{bmatrix} \cos^2 \xi (r_{ss} e^{i\frac{\delta}{2}} \cos \Omega + r_{sp} e^{-i\frac{\delta}{2}} \sin \Omega) \\ \sin^2 \xi (r_{ps} e^{i\frac{\delta}{2}} \cos \Omega + r_{pp} e^{-i\frac{\delta}{2}} \sin \Omega) \end{bmatrix}, \quad (5.26)$$

kde

$$\Omega = \alpha + \eta + \beta_0 \sin \omega t. \quad (5.27)$$

Pokud  $\xi = \frac{\pi}{2}$  a  $|\alpha|, |\beta_0|, |\eta| \ll 1$ , pak je intenzita světla  $I$  za analyzátorem

$$I \approx \frac{1}{2} [|r_{ps}|^2 + |r_{pp}|^2 \Omega^2 + (r_{ps} r_{pp}^* e^{i\delta} + r_{ps}^* r_{pp} e^{-i\delta}) \Omega] \quad (5.28)$$

a intenzita užitečného signálu (složka úměrná  $\omega$ )

$$I_\omega \approx \left[ \alpha + \eta + \Re \left( \frac{r_{ps}}{r_{pp}} e^{i\delta} \right) \right]. \quad (5.29)$$

Jelikož zpětnovazební smyčka nastavuje rovinu polarizace tak, aby

$$I_\omega \approx 0, \quad (5.30)$$

je celkový úhel natočení polarizační roviny světla vystupujícího z nulovací cely

$$\Gamma(\delta) = \alpha + \eta \approx -\Re \left( \frac{r_{ps}}{r_{pp}} e^{i\delta} \right). \quad (5.31)$$

Vztah (5.31) je obecný a platí pro všechny experimentální geometrie s libovolnou orientací vektoru magnetizace.

Uvažujme nyní polární geometrii. Podle (2.50) a definice (2.47) můžeme vztah (5.31) přepsat do tvaru

$$\Gamma_P(\delta) \approx -\Re (\phi_{K_p} e^{i\delta}) = -(\theta_K \sin \delta + \epsilon_K \sin \delta). \quad (5.32)$$

V longitudinální geometrii platí vztah obdobný vztahu (2.50) [24]

$$r_{sp} = -r_{ps} . \quad (5.33)$$

S uvážením (5.33) a definice (2.46) můžeme napsat

$$\Gamma_L(\delta) \approx \Re(\phi_{K_p} e^{i\delta}) = \theta_K \cos \delta + \epsilon_K \sin \delta . \quad (5.34)$$

Pro orientaci polarizátoru  $\xi = \frac{\pi}{2}$  bude  $\alpha \sim \pm \frac{\pi}{2}$ .

Úhel  $\alpha$  vyjádříme vztahem

$$\alpha = \frac{\pi}{2} + \zeta . \quad (5.35)$$

Vztah (5.27) přejde na

$$\Omega = \frac{\pi}{2} + \zeta + \eta + \beta_0 \sin \omega t . \quad (5.36)$$

Analogickým postupem jako v předchozím případě za podmínky  $|\zeta|, |\eta|, |\beta_0| \ll 1$  obdržíme

$$I_\omega \approx \left[ \zeta + \eta - \Re \left( \frac{r_{sp}}{r_{ss}} e^{-i\delta} \right) \right] \beta_0 \sin \omega t \quad (5.37)$$

a

$$\Gamma'(\delta) \equiv \zeta + \eta \approx \Re \left( \frac{r_{sp}}{r_{ss}} e^{-i\delta} \right) . \quad (5.38)$$

V případě polární geometrie a podle definice (2.46) platí

$$\Gamma'_P(\delta) = -\Re(\phi_{K_S} e^{-i\delta}) = -\theta_K \cos \delta + \epsilon_K \sin \delta . \quad (5.39)$$

V případě longitudinální geometrie (vztah (5.33)) a s pomocí definice (2.46) dostáváme

$$\Gamma'_L(\delta) = \Re(\phi_{K_S} e^{-i\delta}) = \theta_K \cos \delta - \epsilon_K \sin \delta . \quad (5.40)$$

Měřením bez fázových destiček získáme hodnotu Kerrovy rotace

$$\begin{aligned} \theta_K &\approx -\Gamma_P(0), \quad \theta_K \approx -\Gamma'_P(0), \\ \theta_K &\approx \Gamma_L(0), \quad \theta_K \approx \Gamma'_L(0). \end{aligned} \quad (5.41)$$

Úhel změřený při experimentu se zařazenými destičkami použijeme k výpočtu Kerrovy ellipticity.

- Polární konfigurace:

$$\xi = 0 : \quad \epsilon_K = -\frac{\Gamma_P(\delta) - \theta_K \cos \delta}{\sin \delta} . \quad (5.42)$$

$$\xi = \frac{\pi}{2} : \quad \epsilon_K = \frac{\Gamma'_P(\delta) + \theta_K \cos \delta}{\sin \delta} . \quad (5.43)$$

- Longitudinální konfigurace:

$$\xi = 0 : \quad \epsilon_K = \frac{\Gamma_L(\delta) - \theta_K \cos \delta}{\sin \delta} . \quad (5.44)$$

$$\xi = \frac{\pi}{2} : \quad \epsilon_K = -\frac{\Gamma'_L(\delta) + \theta_K \cos \delta}{\sin \delta} . \quad (5.45)$$

Pro čtvrtvlnné destičky by byl výpočet  $\epsilon_K$  na  $\theta_K$  nezávislý. Vlivem disperze však není fázové zpoždění  $\delta$  konstantní a proto nelze provést takovéto zjednodušení.

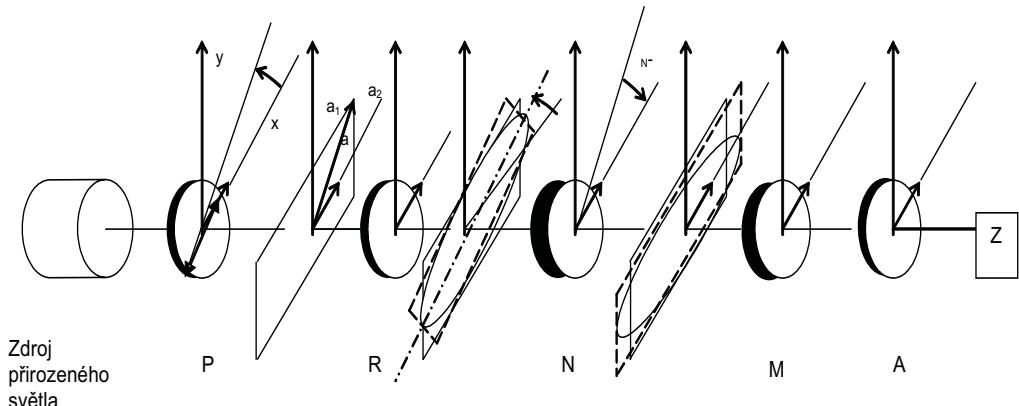
V praxi se pak výsledný úhel  $\Gamma(\delta)$  určuje jako polovina rozdílu úhlů rotace a elipticity změřených při opačných polaritách magnetického pole

$$\Gamma(\delta) = \frac{\Delta(\alpha + \eta)}{2} . \quad (5.46)$$

## 5.4 Kalibrační procedura

Během experimentu neměříme přímo Kerrův jev, ale velikost napětí na odporovém normálu. Je proto nutné provést kalibrační měření, abychom mohli naměřené napětí převést na stupně. Dále je potřeba znát závislost fázového rozdílu  $\delta$  na vlnové délce.

Uvažujeme soustavu polarizátor - fázové destičky - nulovací cela - modulační cela - analyzátor (PRNMA) (viz. obr. 5.8)



Obrázek 5.8: Princip kalibrace magnetooptického spektrometru.

Po průchodu světla polarizátorem  $P$  je světlo lineárně polarizované v rovině, která svírá s osou  $\hat{x}$  úhel  $\alpha$ . Vektor amplitudy  $\mathbf{a}$  světelné vlny lze rozložit do dvou složek  $\mathbf{a}_1$ ,  $\mathbf{a}_2$  rovnoběžných s osami  $\hat{x}$  a  $\hat{y}$ , přičemž

$$\frac{\mathbf{a}_2}{\mathbf{a}_1} = \tan \alpha . \quad (5.47)$$

Průchodem fázovými destičkami se světlo stává díky fázovému rozdílu  $\delta$  kartézských složek elipticky polarizované. Azimut elipsy polarizace je dán vztahem

$$\tan 2\theta = \tan 2\alpha \cos \delta . \quad (5.48)$$

Nulovací cela natočí elipsu o úhel

$$\eta = -\theta \quad (5.49)$$

a z (5.48) tedy plyne

$$\tan 2\eta = -\tan 2\alpha \cos \delta . \quad (5.50)$$

Tato rovnice umožňuje během dvou měření okalibrovat celu i fázové destičky.

Při kalibraci nulovací cely použijeme uspořádání PNMA. Stočení roviny polarizace je ve Faradayově cele v ideálním případě dáno

$$\eta(\lambda) = C_N(\lambda)I_N , \quad (5.51)$$

kde  $I_N$  je proud vinutím cívky a  $C_N$  je kalibrační konstanta závislá na použité cívce, délce křemenného válečku a vlnové délce světla.

Hodnotu  $C_N$  můžeme stanovit ze změny proudu  $I_N$  při natočení polarizátoru o malý známý úhel

$$C_N = -\frac{\Delta\alpha}{\Delta I_N} = \frac{\Delta\eta}{\Delta I_N} . \quad (5.52)$$

Při kalibraci fázových destiček provádíme stejné měření v uspořádání PRNMA. Kalibrační konstanta je podobně dána vztahem

$$D_N = -\frac{\Delta\alpha}{\Delta I_N} . \quad (5.53)$$

Pro malé úhly  $\alpha$  a  $\eta$  lze (5.50) napsat

$$\eta \approx -\alpha \cos \delta . \quad (5.54)$$

Užitím (5.54),(5.53) a (5.52) dostaneme výsledný vztah pro výpočet fázového rozdílu  $\delta$

$$\cos \delta \approx \frac{C_N}{D_N} . \quad (5.55)$$

# Kapitola 6

## Studované vzorky

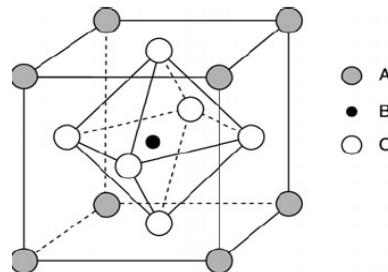
Tato kapitola je věnována charakterizaci struktur studovaných v rámci předkládané práce. Soustředili jsme se na studium tenkých vrstev  $La_{2/3}Sr_{1/3}MnO_3$  na substrátu  $SrTiO_3$  (001) připravených pomocí pulzní laserové depozice (PLD).

V první části této kapitoly se budeme zabývat krystalovou strukturou  $La_{2/3}Sr_{1/3}MnO_3$  a kvalitativně shrneme jeho základní fyzikální vlastnosti. Dále si pak vysvětlíme princip pulzní laserové depozice, pomocí níž byly vzorky připravovány. Na závěr uvedeme parametry námi studovaných vzorků.

### 6.1 Struktura $La_{2/3}Sr_{1/3}MnO_3$ a jeho základní fyzikální vlastnosti

#### 6.1.1 Krystalografická struktura

Struktura  $Re_{1-x}M_xMnO_3$  (v našem případě  $La_{2/3}Sr_{1/3}MnO_3$ ) je velmi blízká kubické perovskitové struktuře, která je znázorněna na obrázku 6.1. Velké atomy trivalentní RE



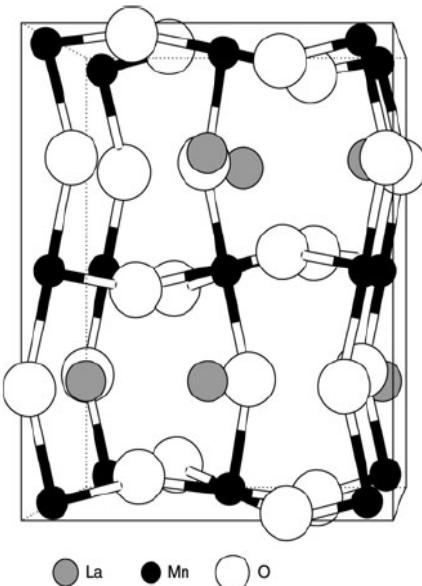
Obrázek 6.1: Krystalografická struktura  $Re_{1-x}M_xMnO_3$ .

a divalentní M jsou umístěny v rozích A krychle. Menší iont Mn se smíšenou valencí

$Mn^{3+}$  -  $Mn^{4+}$  je umístěn ve středu B krychle obklopen 6 kyslíkatými ionty v oktaedrálním uspořádání. Pro stechiometrický oxid je podíl Mn iontů s valencí 3+, resp. 4+ 1-x, resp. x. Struktura manganitů je určena tzv. Goldschmidtovým faktorem tolerance [50]

$$t = \frac{r_A + r_O}{\sqrt{2}(r_B + r_O)}, \quad (6.1)$$

kde  $r_A, r_B$  a  $r_O$  jsou poloměry iontů v polohách A, B a kyslíku. Perovskitová struktura je stabilní pro  $t$  v rozmezí 0.89 až 1.02. Pokud je  $t$  rovno jedné, jedná se o přesně kubickou strukturu. V praxi se však  $t$  od jedné liší, a proto mají manganity přinejmenším při nízkých teplotách nižší romboedrickou či ortorombickou strukturu. To je ilustrováno na obrázku 6.2, kde je znázorněna ortorombická struktura  $LaMnO_3$ , která se používá jako výchozí sloučenina pro výrobu nejzkoumanějších manganitů pro potenciální praktické aplikace. Tyto manganity se vyrábí částečným nahrazením La pomocí Ca nebo Sr.



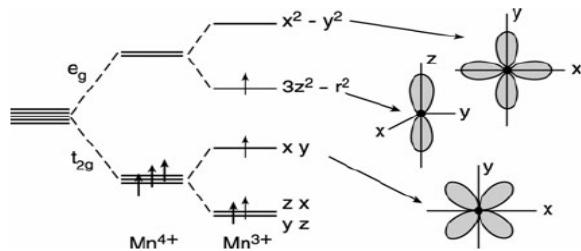
Obrázek 6.2: Krystalografická struktura  $LaMnO_3$ .

### 6.1.2 Elektronová struktura

Jak jsme si ukázali v kapitole 3., pokud vložíme volý 3d ion do krystalu, působením kubického krystalového pole se 5 krát degenerované  $d$ -orbitaly rozštěpí na třikrát degenerované  $t_{2g}$  orbitaly s nižší energií a dvakrát degenerované  $e_g$  orbitaly s vyšší energií. Pro  $MnO_6$  oktaedr je rozštěpení mezi nejnižším stavem  $t_{2g}$  a nejvyšším stavem  $e_g$  přibližně 1,5 eV [51].

Pro  $Mn^{3+}$  a  $Mn^{4+}$  ionty meziatomární korelace způsobí paralelní uspořádání elektronových spinů (První Hundovo pravidlo [52]). Odpovídající výměnná energie je přibližně

2,5 eV [51], což je více než energie krystalového štěpení  $\Delta$ . V krystalovém poli nižší symetrie než kubické se dále snímá degenerace  $e_g$  a  $t_{2g}$  orbitalů, jak je tomu znázorněno na obr. 6-3 pro axiální prodloužení oktaedru tvořeného kyslíkovými ionty. Ačkoliv energie  $Mn^{4+}$  iontu zůstává nezměněna působením takovéto distorze, energie  $Mn^{3+}$  iontu je nižší [51]. Proto má  $Mn^{3+}$  větší tendenci deformovat oktaedrální uskupení než  $Mn^{4+}$ . Tyto Jahn-Tellerovy distorze [38] jsou efektivnější v lehce dopovaných manganitech, tzn. s vyšší koncentrací 1-x pro  $Mn^{3+}$  ionty. S naruštajícím množstvím  $Mn^{4+}$  iontů se Jahn-Tellerovy distorze redukují. Nicméně ve velkém počtu manganitů nejsou orbitaly  $e_g$  dvou typů  $3z^2 - r^2$  a  $x^2 - y^2$  obsazovány  $e_g$  elektronami  $Mn^{3+}$  iontů náhodně a uspořádání orbitalů se zachovává.

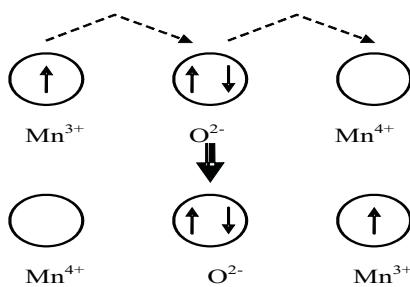


Obrázek 6.3: Energetické uspořádání pro  $Mn^{4+}$  a  $Mn^{3+}$  v krystalovém poli oktaedrální symetrie s axiální deformací.

### 6.1.3 Výměnné interakce

Magnetické vlastnosti manganitů jsou určovány výměnnými interakcemi mezi spiny Mn iontů. Tyto interakce jsou relativně silné mezi dvěma Mn spiny oddělenými kyslíkovým atomem a jsou uskutečněny díky překryvu Mn  $d$ -orbitalů a O  $p$ -orbitalů. Příslušná supervýměnná interakce závisí na konfiguraci orbitalů řídící se pravidly Goodenough-Kanamoriho [51]. Pro  $Mn^{4+} - O - Mn^{4+}$  je interakce antiferomagnetická, zatímco pro  $Mn^{3+} - O - Mn^{3+}$  může být feromagnetická nebo antiferomagnetická [14].

Zvláštní a zajímavý případ nastává pro  $Mn^{3+} - O - Mn^{4+}$ , kdy si Mn ionty mohou vyměnit valenci pomocí skoku  $e_g$  elektronu z  $Mn^{3+}$  iontu do  $p$ -orbitalu iontu kyslíku a zároveň skoku elektronu z  $p$ -orbitalu kyslíku do prázdného  $e_g$  orbitalu  $Mn^{4+}$  iontu. Tento mechanizmus dvojité výměny popsáný Zenerem [13] zajišťuje silnou feromagnetickou interakci. Její princip je znázorněn na obr. 6.4.



Obrázek 6.4: Mechanismus dvojité výměny.

#### 6.1.4 Efekty změny parametrů

Fyzikální vlastnosti manganitů jsou ovlivněny dvěma parametry [51]: mírou dopovádání

$$x = \frac{Mn^{4+}}{(Mn^{3+} + Mn^{4+})} \quad (6.2)$$

a průměrnou velikostí kationtu v poloze A  $\langle r_A \rangle$ . Třetím relevantním parametrem je pak stupeň neuspřádanosti v poloze A definovaný vztahem

$$\sigma^2 = \langle r_A^2 \rangle - \langle r_A \rangle^2 . \quad (6.3)$$

Tématu popisu efektů spojených se změnou výše uvedených parametrů se věnuje mnoho prací. Přehled těch nejzákladnějších je uveden např. v [51]. My si nyní uvedeme pouze nejzákladnější poznatky.

Maximum feromagnetické dvojité výměny nastává zhruba pro  $x = \frac{1}{3}$  a pro  $\langle r_A \rangle \approx 0.124$  nm. Snižování  $\langle r_A \rangle$  z této optimální hodnoty vede ke zvýšení distorze v krystalografické struktuře. Následné zmenšování úhlu mezi Mn – O – Mn ze  $180^\circ$  k nižším hodnotám má za následek snížení feromagnetické dvojité výměny a zvýšení tendence k lokalizaci nosičů náboje. Tento efekt pak drasticky mění odpory vzorku [53].

## 6.2 Pulzní laserová depozice

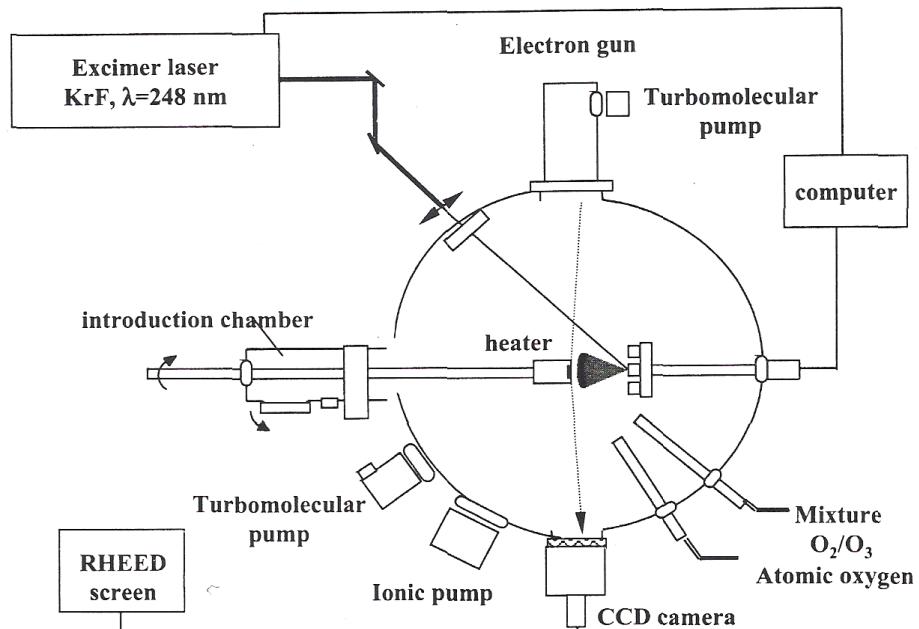
Z pohledu dnešního aplikačního uplatnění je nutné připravit kvalitní tenké vrstvy požadovaných manganitů s dobrými magnetickými a elektrickými vlastnostmi a kvalitním povrchem.

V posledních patnácti letech bylo tomuto tématu věnováno veliké úsilí a v dnešní době existuje několik technik výroby kvalitních filmů. Přehled různých struktur manganitů s jejich metodou přípravy a použitým substrátem lze najít v [54].

Vzorky, které jsme měli k dispozici a které jsou předmětem této práce byly vyrobeny pomocí pulzní laserové depozice (PLD). Princip této metody je relativně jednoduchý.

Svazek z výkonového pulzního laseru dopadá na keramický terčík požadovaného materiálu a vyráží atomy z jeho povrchu. Za přítomnosti plynu v napařovací komoře (většinou kyslíku) je produkováno plazma, které kondenuje na vyhřívaném substrátu. Typické lasery použité při výrobě manganitů jsou excimerové UV lasery  $KrF$  - (s vlnovou délkou  $\lambda = 248$  nm) [55],  $XeCl$  - ( $\lambda = 308$  nm) [56] nebo  $ArF$  - ( $\lambda = 193$  nm) [57]. K monitrování růstu se potom používá Difrakce vysokoenergetických elektronů (Reflection High Energy Electron Diffraction - RHEED). PLD jako metoda přípravy je hojně využívána z důvodu zachování stechiometrie terčíku během depozice. Pomocí této metody se také získávají nejkvalitnější tenké vrstvy s drsností řádově jedné elementární buňky.

Schéma aparatury na přípravu  $La_{2/3}Sr_{1/3}MnO_3$  pomocí PLD je znázorněno na obr. 6.5.



Obrázek 6.5: Aparatura PLD používaná k výrobě tenkých filmů  $La_{2/3}Sr_{1/3}MnO_3$  [54].

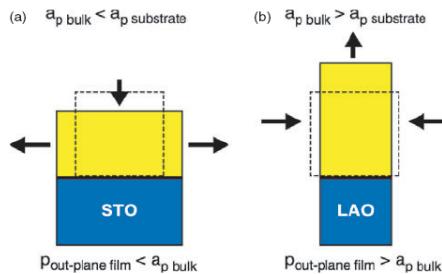
Jako substráty pro nanášení tenkých filmů manganitů se nejvíce používají

- $SrTiO_3$  (STO):  $a = 0.3905$  nm - kubický ( $a$  je mřížková konstanta substrátu)
- $LaAlO_3$  (LAO):  $a = 0.3788$  nm - pseudokubický
- $MgO$ :  $a = 0.4205$  nm - kubický
- $NdGaO_3(NGO)$ :  $a = 0.5426$  nm,  $b = 0.5502$  nm a  $c = 0.7706$  nm - ortorombický

Mřížkový rozdíl  $\delta$  podél rozhraní je definován vztahem [51]

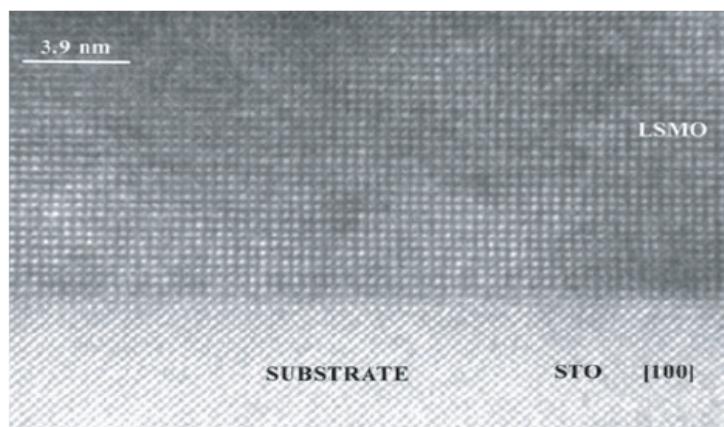
$$\delta = (a_{p_{subst}} - a_{p_{bulk}})/a_{p_{subst}}, \quad (6.4)$$

kde  $a_{p_{subst}}$  je mřížková konstanta substrátu a  $a_{p_{bulk}} = 0.3889$  nm je mřížková konstanta objemového  $La_{2/3}Sr_{1/3}MnO_3$ . Kladné hodnoty  $\delta$  odpovídají tahovému napětí v rovině rozhraní a stlačení ve směru kolmém k rovině rozhraní, kdežto záporné hodnoty  $\delta$  odpovídají přesně opačné situaci. Oba případy jsou pak schematicky znázorněny na obr. 6-6. Takovéto



Obrázek 6.6: Vliv rozdílu mřížkových konstant  $La_{2/3}Sr_{1/3}MnO_3$  a substrátu na deformaci nanášené vrstvy.

napětí indukuje mřížkové deformace, které se projeví v odchylce mřížkové konstanty ve směru kolmém k rozhraní od mřížkové konstanty objemového  $La_{2/3}Sr_{1/3}MnO_3$ . Tyto distorze se dají měřit pomocí rentgenové difrakce (XRD) a elektronovým mikroskopem s vysokým rozlišením (HREM). V případě tenké vstvy  $La_{2/3}Sr_{1/3}MnO_3$  na substrátu  $SrTiO_3$



Obrázek 6.7: Obrázek přičného řezu  $La_{2/3}Sr_{1/3}MnO_3/SrTiO_3$  pořízený elektronovým mikroskopem s vysokým rozlišením [51].

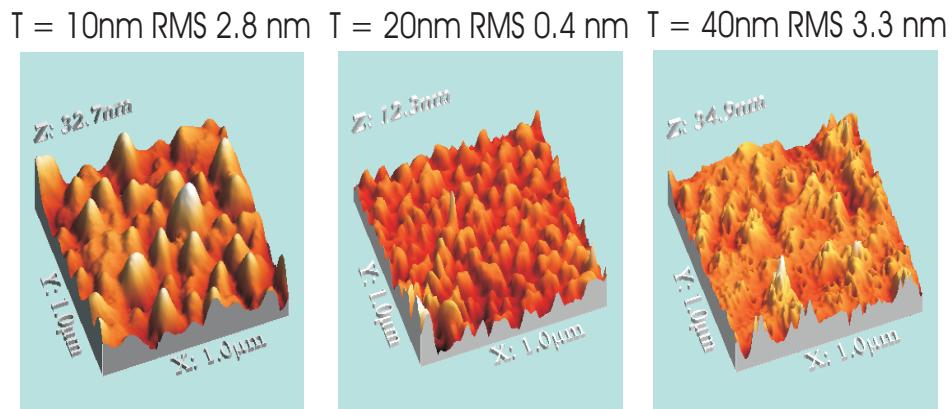
(nejmenší napětí  $\delta_{STO} = +0.81\%$ ) je situace poměrně jednoduchá.  $La_{2/3}Sr_{1/3}MnO_3$  vyzkazuje perfektní epitaxii mezi filmem a substrátem. Jak je vidět ze snímku pořízeného

HREM [58] (obr. 6.7), nejsou pozorovány žádné defekty. Změna poměru ( $a_{\perp}/a_{v \text{ rovine}}$ ) jako funkce tloušťky je nepatrná.

### 6.3 Parametry studovaných vzorků

Jak již bylo zmíněno výše, vzorky které jsme měli k dispozici, byly tenké vrstvy  $La_{2/3}Sr_{1/3}MnO_3$  deponované pomocí PLD na substrátu  $SrTiO_3$  (001) [21]. Tyto vzorky byly vyrobeny v laboratoři CRISMAT - ISMRA, CNRS v Caen ve Francii skupinou Prof. B. Merceyho.

Teplota substrátu byla  $630^{\circ}\text{C}$  a depozice byla prováděna při nízkém tlaku směsi kyslíku a ozónu  $P = 5 \times 10^{-3}$  mbar. Filmy byly chlazené při tlaku  $O_2/O_3 P = 5 \times 10^{-3}$  mbar na  $T = 300^{\circ}\text{C}$  a poté mezi  $300^{\circ}$  -  $180^{\circ}\text{C}$  pod atmosférou  $O_2$ . Byly deponovány vrstvy s tloušťkami 10, 20, 30, 40 a 60 nm. Krystalová struktura byla monitorována rentgenovou difraccí a povrchová morfologie pomocí mikroskopie atomové síly (Atomic Force Microscopy - AFM). Obrázky povrchu pořízené AFM mikroskopem při různých tloušťkách vrstev jsou znázorněny na obr. 6.8 spolu s drsností povrchu.



Obrázek 6.8: Obrázky pořízené AFM mikroskopí pro různé tloušťky vzorků. Číslo RMS udává drsnost vzorku.

Z obrázků pořízených pomocí AFM je patrné, že s přibývající tloušťkou roste drsnost povrchu.

# Kapitola 7

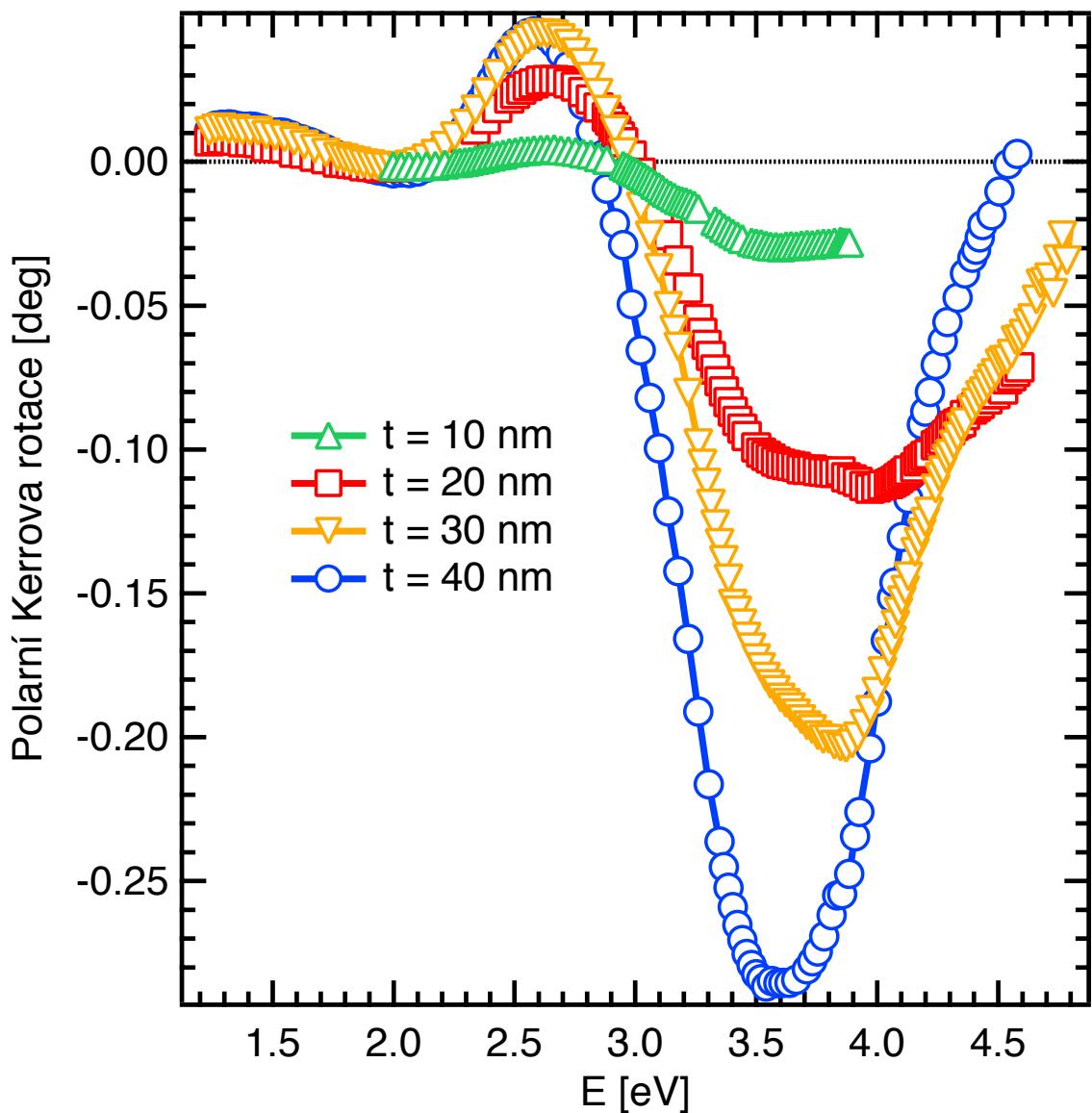
## Experimentální výsledky a jejich diskuse

### 7.1 Polární magnetizace

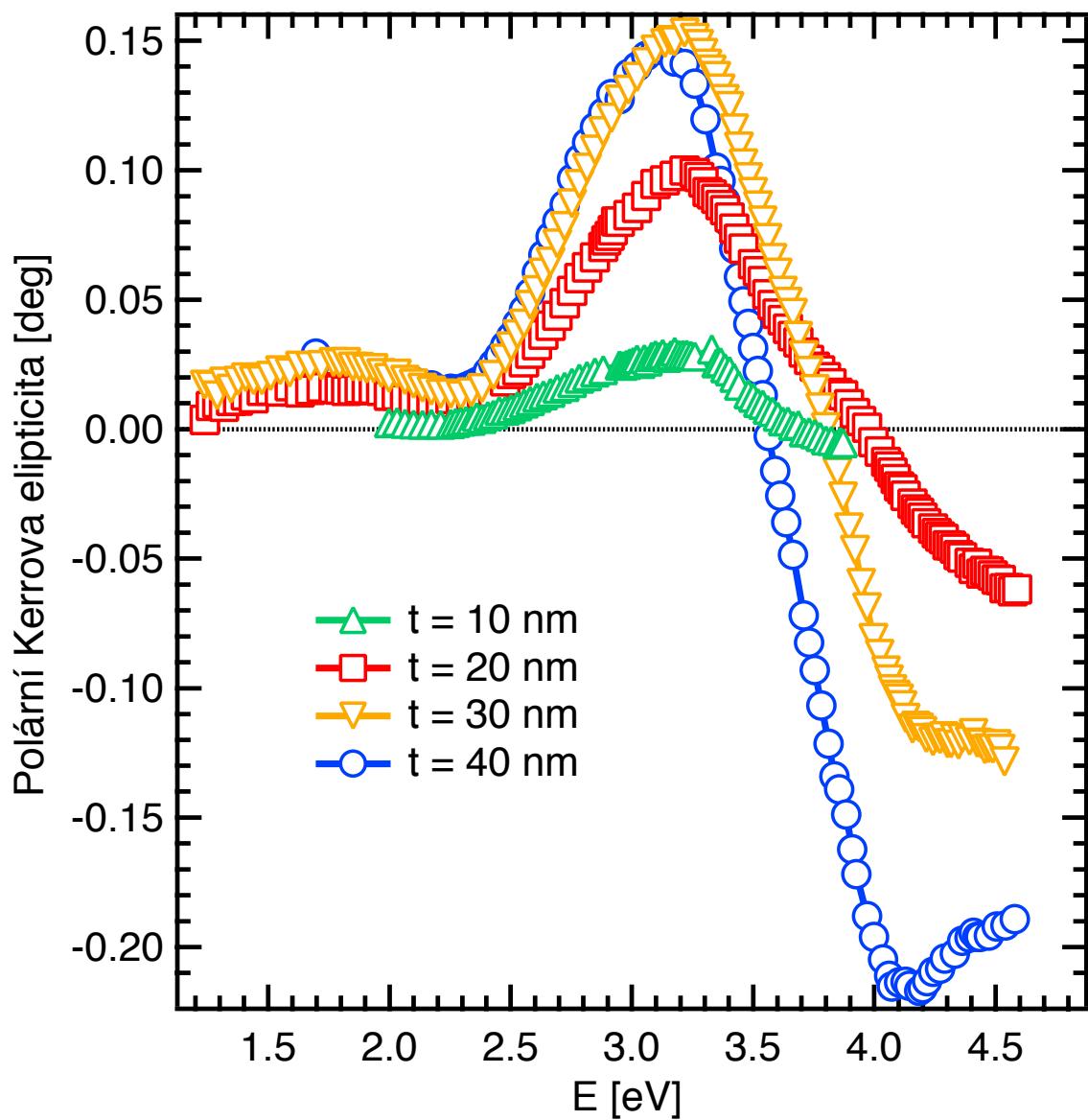
Polární magnetooptická spektra byla změřena při úhlu dopadu 4 stupně (téměř kolmý dopad). Vzorek byl uchycen na pólovém nástavci elektromagnetu a měření bylo prováděno při magnetickém poli  $B = 470$  mT [21]. Měřili jsme v oblasti energií fotonů 1.2 až 4.5 eV. Dolní limit byl dán citlivostí fotonásobiče, horní potom parazitním vlivem rozptyleného světla, a tudiž zhoršením kvality měřeného signálu. Šířka světelné stopy na vzorku byla přibližně 1.5 mm. Vzhledem ke skutečnosti, že vrstvy  $La_{2/3}Sr_{1/3}MnO_3$  mají teplotu  $T_C$  blízkou pokojové teplotě, bylo výhodné vzorek chladit k zesílení magnetooptického signálu, což bylo provedeno vodním chlazením pólového nástavce, na němž byl vzorek připevněn.

Použitím voltmetru jsme měřili napětí úměrné proudu v nulovací cele a naměřená data jsme zaznamenávali v počítací propojeným s voltmetrem pomocí GPIB rozhraní. Z naměřených údajů jsme pomocí kalibračních konstant  $C_N$  a  $D_N$  stanovili hodnoty Kerrový rotace a ellipticity. K získání výsledného spektra bylo ještě nutné provést korekci na tzv. rozptylové magnetické pole (příspěvek vlivu použitých optických prvků na měřená spektra), kdy jsme měřili Kerrovu rotaci na nemagnetickém zrcátku. Tyto naměřené hodnoty jsme od změřených spekter vzorků odečetli. Naměřená spektra jsou uvedena na obrázcích 7.1 a 7.2.

Vzhledem k výskytu volných elektronů ve vrstvě  $La_{2/3}Sr_{1/3}MnO_3$ , jsou spektra hladká a vykazují pouze dvě význačné spektroskopické sktruktury opačných znamének. První z nich má menší amplitudu a dosahuje maxima spektra v blízkosti energie 2.6 eV. Druhá, která je širší dosahuje minima spektra v blízkosti energie 3.6 eV a je znatelně tloušťkově závislá s pozorovatelným rozšířením pro tloušťky menší než 40 nm. Ze spekter je také vidět, že jsou splněny disperzní relace (viz. kapitola 3.) - ellipticita prochází inflexním



Obrázek 7.1: Změřená spektra polární Kerrové rotace tenkých vrstev  $La_{2/3}Sr_{1/3}MnO_3$  na substrátu  $SrTiO_3$  pro různé tloušťky  $t$  vrstev



Obrázek 7.2: Změřená spektra polární Kerrovy ellipticity tenkých vrstev  $La_{2/3}Sr_{1/3}MnO_3$  na substrátu  $SrTiO_3$  pro různé tloušťky  $t$  vrstev

bodem v bodě, kde má rotace své maximum.

Průběh naměřených spekter se shoduje s tvary spekter naměřených Fumagallim [19] a Choem [20] na tlustých vrstvách (s tloušťkou  $t = 150 \pm 10$  nm), Yamaguchim [17] na objemovém materiálu a Popmou [18] na polykrystalických vzorcích. Amplitudy spekter uváděných Yamaguchim jsou však diskutabilní, jelikož z praxe je známé, že měření tak malých úhlů, jak Yamaguchi uvádí, je málo pravděpodobné a velice obtížné (ne-li nemožné). Pozice maxima a minima našich spekter jsou ale posunuty k vyšším energiím. Amplitudy Kerrovy polární rotace a ellipticity se s výše uvedenými pracemi (s výjimkou Yamaguchiho) shodují.

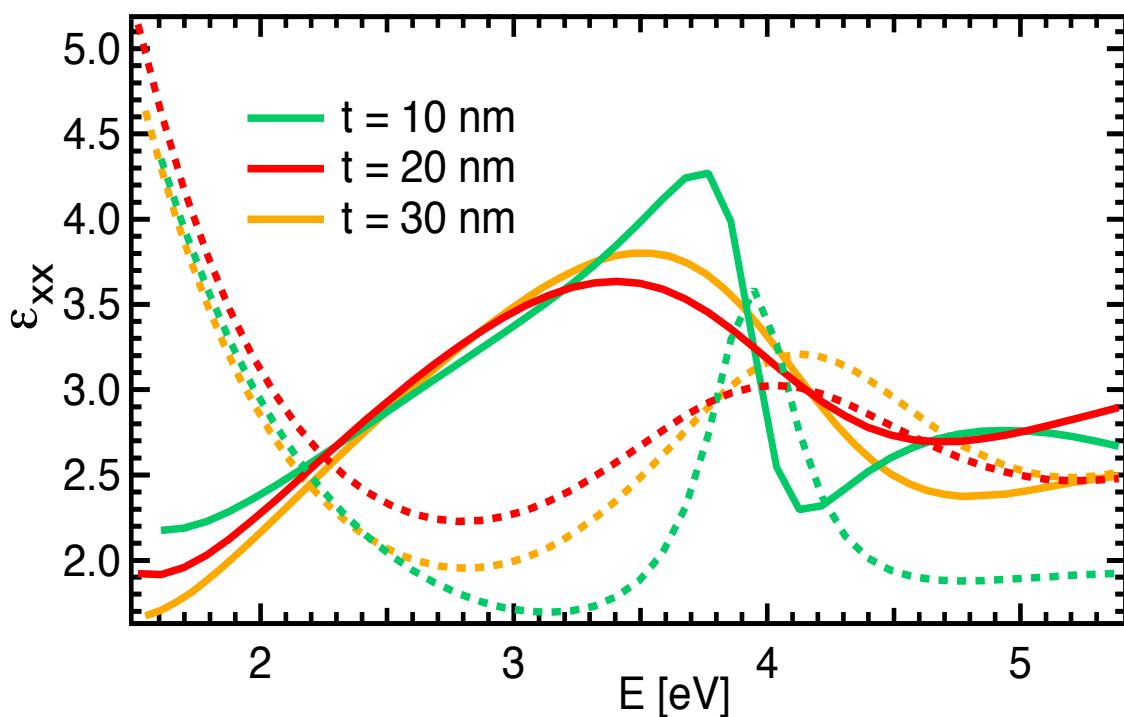
Jak jsme ukázali v kapitole 3., polohy maxim a minim magnetooptických spekter nejsou přímo svázány s elektronovými přechody v látce, a tudíž s její elektronovou strukturou. Fyzikální veličina, která dává informaci o elektronových přechodech, je tenzor permitivity.

Abychom zjistili, které elektronové přechody jsou magnetoopticky aktivní a popsali tak magnetooptické vlastnosti čisté vrstvy  $La_{2/3}Sr_{1/3}MnO_3$ , museli jsme vypočítat spektra nediagonálních prvků tenzoru permitivity této vrstvy - takzvané magnetooptické konstanty. To nám umožnila teorie odvozená v kapitole 4. Ze znalosti spektra polárního Kerrova jevu, diagonálních prvků tenzoru permitivity vrstvy  $La_{2/3}Sr_{1/3}MnO_3$  popisujících optické vlastnosti vrstvy a diagonálních prvků tenzoru permitivity substrátu reprezentujících vliv substrátu na spektra Kerrova jevu jsme vypočítali spektra magnetooptických konstant  $La_{2/3}Sr_{1/3}MnO_3$ .

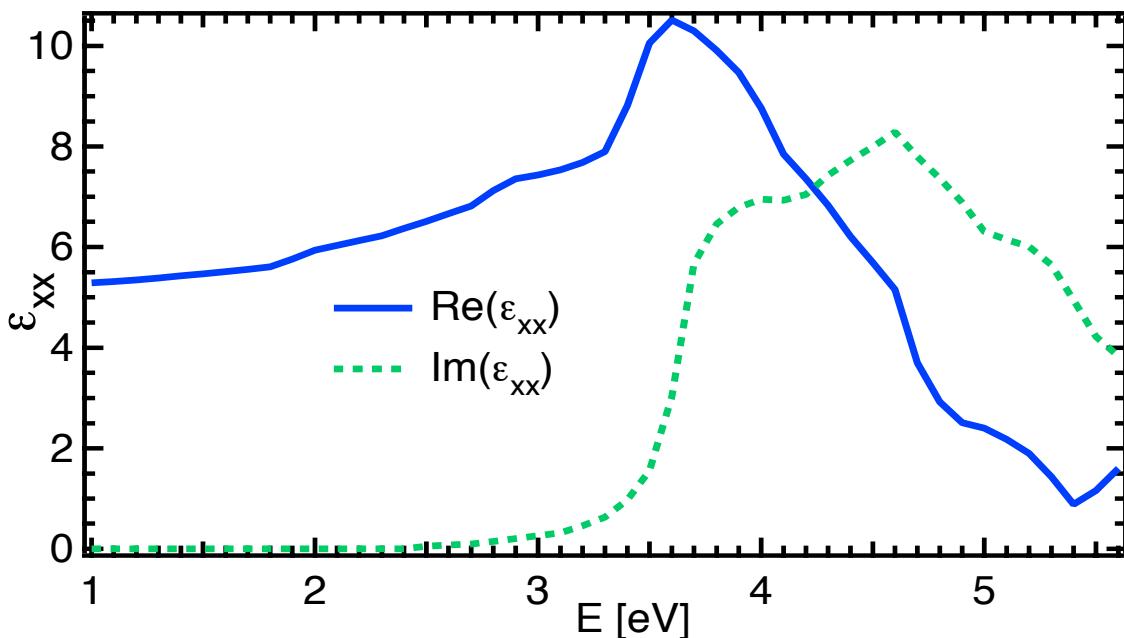
Uvažovali jsme případ jednoduché tenké vrstvy  $La_{2/3}Sr_{1/3}MnO_3$  na nekonečném nemagnetickém substrátu  $SrTiO_3$ . V našich výpočtech jsme předpokládali, že všechna rozhraní mezi vrstvami jsou ostrá a rovinatá. Pro realistické výpočty je navíc velmi důležitá volba diagonálních prvků tenzoru permitivity. Ty musí co nejlépe popisovat vlastnosti použitých materiálů.

V našem případě jsme použili optické konstanty vrstev  $La_{2/3}Sr_{1/3}MnO_3$  s tloušťkami 10 nm, 20 nm a 30 nm určené z elipsometrických měření J. Mistrikem [59] a optické konstanty substrátu z publikace [28]. Průběhy jednotlivých diagonálních prvků tenzoru permitivity jsou znázorněny v grafech 7.3 a 7.4. Vypočítané magnetooptické konstanty vrstvy jsou pak znázorněny v grafech 7.5 a 7.6. Pro tloušťku 40 nm jsme neměli k dispozici optické konstanty a proto jsme použili optické konstanty vzorku s tloušťkou vrstvy 30 nm.

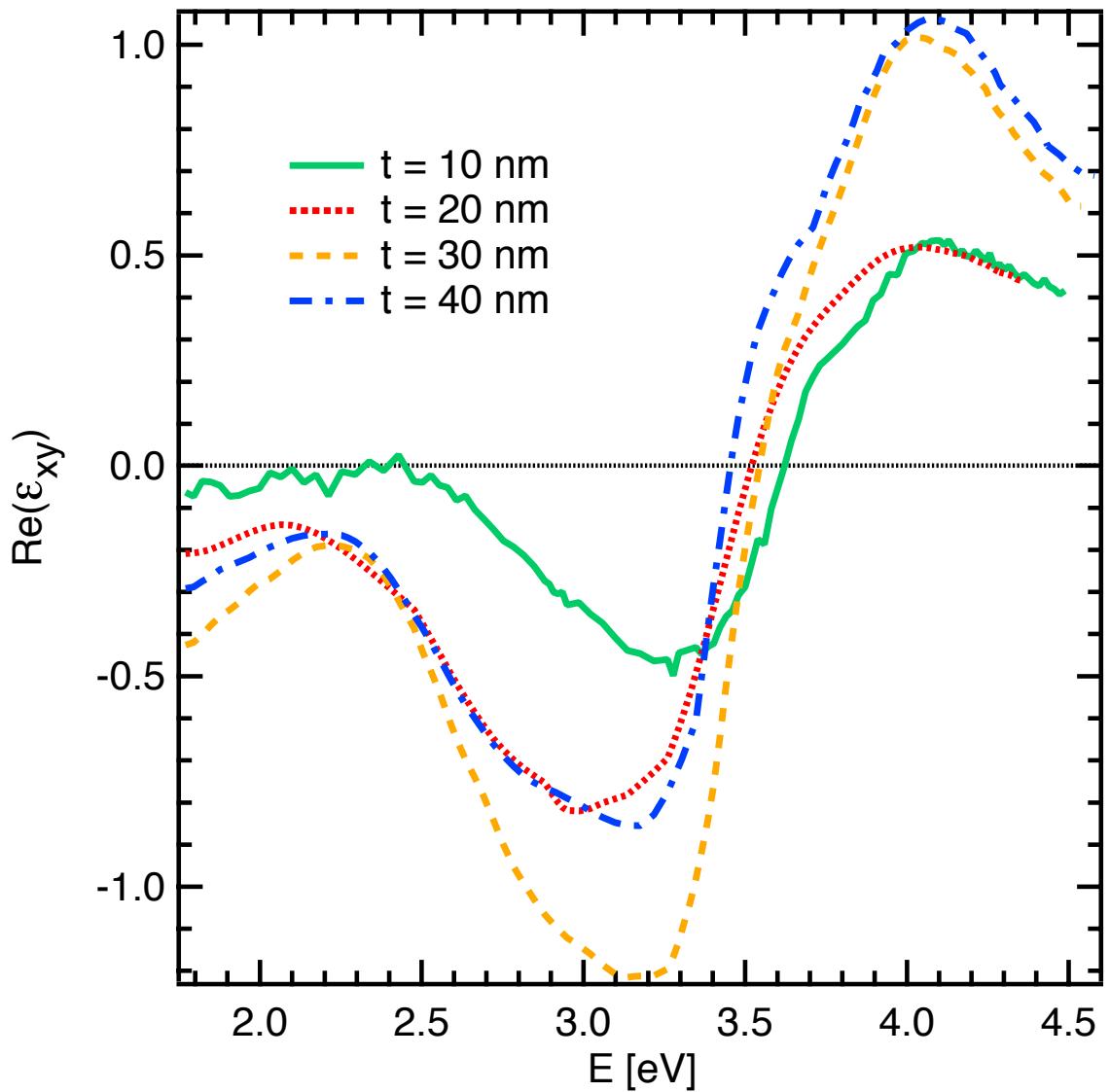
Tvary vypočítaných spekter magnetooptických konstant jsou v dobré shodě s konstantami určenými Yamaguchim [17] (opět jsou ovšem diskutabilní amplitudy) i Fumagallim [19] (spočítal prvky tenzoru vodivosti). Polohy maxim a minim spekter se shodují, z čehož se dá usoudit, že elektronové přechody, které jsou magnetoopticky aktivní v objemovém materiálu, jsou aktivní i v tenké vrstvě  $La_{2/3}Sr_{1/3}MnO_3$ . V imaginární části nediago-



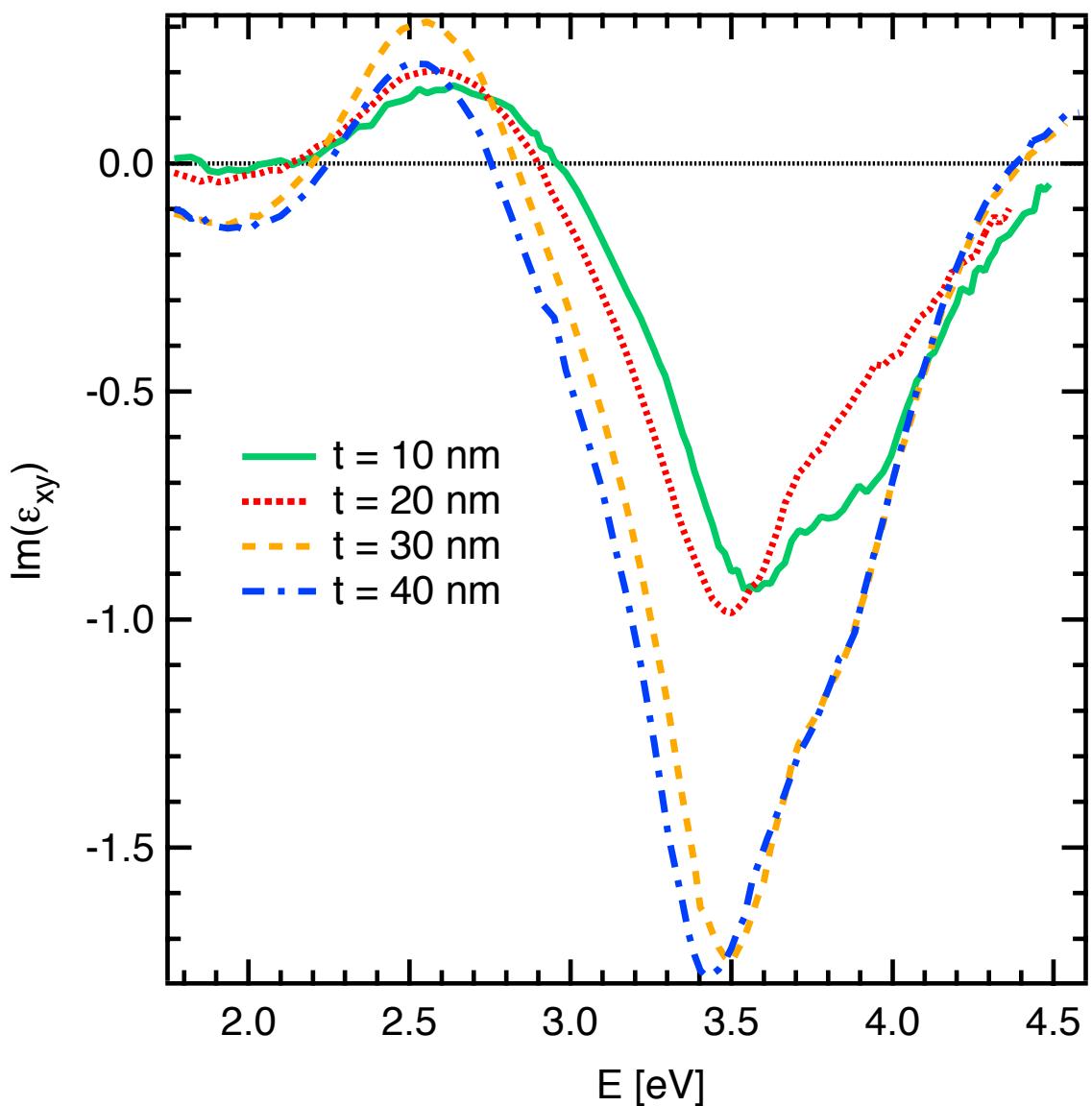
Obrázek 7.3: Spektra diagonálních prvků tenzoru permitivity vrstvy  $La_{2/3}Sr_{1/3}MnO_3$  deponované na substrátu  $SrTiO_3$  pro různé tloušťky  $t$  vrstvy [59]. Plné křivky odpovídají reálné části diagonálnímu prvku tenzoru permitivity, tečkováné křivky odpovídají imaginární části



Obrázek 7.4: Spektra komplexní permitivity  $SrTiO_3$  substrátu [28].



Obrázek 7.5: Vypočítané spektrum reálné části nediagonálního prvku tenzoru permitivity  $\varepsilon_{xy}$  pro různé tloušťky  $t$  vrstev.



Obrázek 7.6: Vypočítané spektrum imaginární části nediagonálního prvku tenzoru permitivity  $\varepsilon_{xy}$  pro různé tloušťky  $t$  vrstev.

nální permitivity se však objevuje malý parazitní pík - zhruba od 3.4 do 3.6 eV a zesiluje tím linii elektronového přechodu. Tento jev nesouvisí s elektronovými přechody ve vrstvě, ale jedná se o důsledek nepřesných konstant substrátu, které jsme použili. Maximum tohoto parazitního píku odpovídá totiž ostrému maximu reálné části permitivity substrátu. Můžeme tedy usuzovat, že se nám úplně nepodařilo parametrisovat magnetooptickými konstantami pouze vrstvu  $La_{2/3}Sr_{1/3}MnO_3$  a v nediagonálních prvcích tenzoru permitivity se proto objevuje také (i když pouze malý) vliv substrátu. Při pohledu na graf 7.4 zjistíme, že by se tento vliv dal eliminovat, pokud by absorbční hrana substrátu byla posunuta k nižším energiím. Takovýto posun absorbční hrany je spojen s nečistotami vyskytujícími se v látce [28]. Můžeme tedy usuzovat, že se nejedná pouze o čistý substrát  $SrTiO_3$ , ale část vrstvy  $La_{2/3}Sr_{1/3}MnO_3$  difunduje do substrátu a vytváří jakousi přechodovou vrstvu, která již nemá stejně optické vlastnosti jako čistý substrát.

Mikroskopické analýze naměřených magnetooptických spekter se věnovaly některé publikace. Tato analýza je poměrně složitá a obtížná a nedává jednoznačné výsledky.

Yamaguchi ve své práci [17] analyzoval spektra MO konstant vypočítaných z naměřených spekter polárního Kerrova jevu. Dochází v ní k závěru, že průběhy magnetooptických spekter ovlivňují dva elektronové přechody s energiemi 1.2 a 3.5 eV (první z nich v našich spekterech nepozorujeme). Tyto přechody jsou diamagnetického typu a jejich původ se dá vysvětlit spin-orbitálním rozštěpením vzbuzeného stavu, do kterého je elektron excito-ván. Ze zkušeností s granáty  $Y_{3-x}Bi_xFe_5O_{12}$ , kde stavy  $t_{2g}$  jsou spin-orbitálně rozštěpeny, dochází Yamaguchi ve své analýze k závěru, že tyto přechody jsou způsobeny mechanismem přechodu elektronu z O 2p stavu do Mn 3d singletního  $e_g$  stavu (přechod 1) a  $t_{2g}$  tripletního stavu rozštěpeného spin-orbitální interakcí (přechod 2). Tedy

$$t_{2g}^3 e_g^1 \rightarrow t_{2g}^3 e_g^2 L ,$$

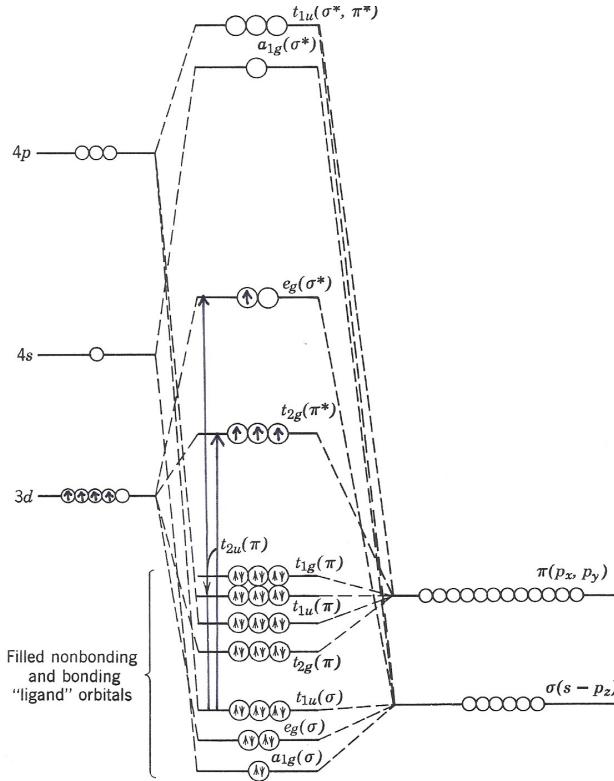
$$t_{2g}^3 e_g^1 \rightarrow t_{2g}^4 e_g^1 L .$$

V případě druhého přechodu musí mít elektron vzhledem k Hundovu pravidlu minoritně orientovaný spin.

Tyto přechody jsou schematicky znázorněny na obrázku 7.7 v jednoelektronovém přiblížení. Při započítání elektrostatické interakce 3d elektronů sousedních atomů je energie hladin  $e_g$  a  $t_{2g}$  jiná, než v jednoelektronovém přiblížení.

Fumagalii ve své práci [19] uvádí dva elektronové přechody o energiích 2.8 a 3.8 eV. Mechanismus přechodů však vysvětluje podobně. Dle jeho názoru se jedná o přechody z O 2p stavů, do stavů Mn 3d rozštěpených krystalovým polem. První z nich odpovídá přechodu do  $e_g$  stavu, druhý potom do  $t_{2g}$  stavu.

My se v naší analýze přikláníme spíše k výsledkům získaným Yamaguchim, a to tak, že ze spekter magnetooptických konstant lze uvažovat pouze jeden elektronový přechod s



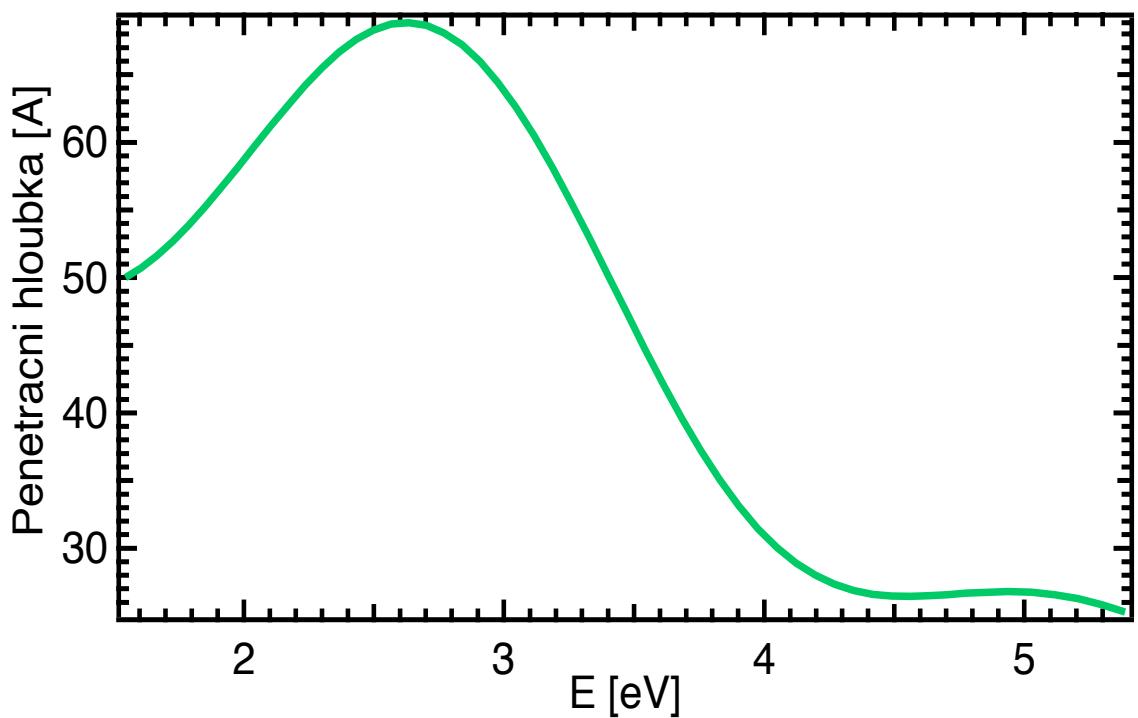
Obrázek 7.7: Schematické znázornění elektronových přechodů v jednoelektronovém přiblžení.

energií 3.5 eV, který je způsoben přechodem elektronu ze stavů O 2p do stavů Mn 3d  $t_{2g}$  rozštěpených spinorbitální vazbou, tedy

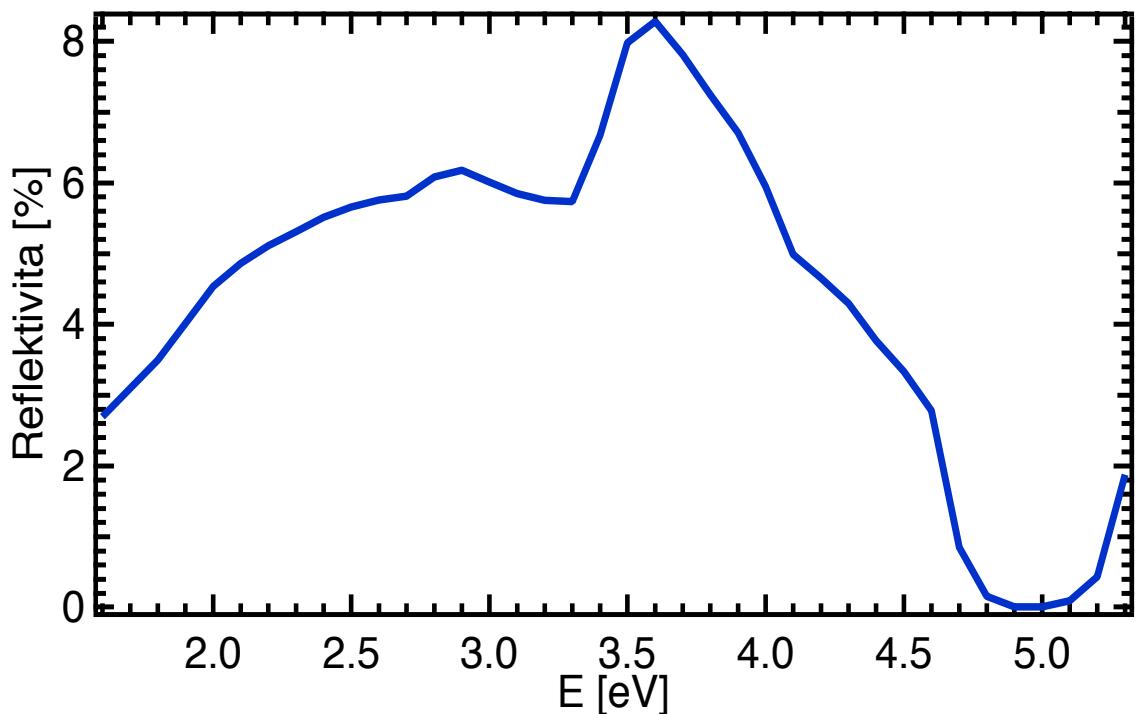
$$t_{2g}^3 e_g^1 \rightarrow t_{2g}^4 e_g^1 L$$

Z grafů 7.5 a 7.6 je zřetelné, že průběh magnetooptických parametrů vrstvy  $La_{2/3}Sr_{1/3}MnO_3$  se nemění ani v závislosti na tloušťce. Polohy maxim a minim spekter nejsou vůči sobě posunuté. Mírné posunutí u vzorku s tloušťkou 10 nm je nejspíše způsobeno vyšší drsností povrchu i nepřesnou hodnotou udávané tloušťky, a tedy nepřesným určením optických a magnetooptických konstant. Amplitudy v grafech 7.5 a 7.6 se mění s tloušťkou. Tuto skutečnost lze vysvětlit tím, že se jedná o velmi tenké vrstvy. S přibývající tloušťkou roste jejich saturační magnetizace a snad i  $T_C$ . Proto roste i amplituda Kerrova efektu z něhož se MO konstanty počítají. To potvrzují měření ze SQUID magnetometru [60].

Zajímavým rysem polárních spekter Kerrova jevu je rozšíření spektroskopické struktury v okolí 3.5 eV, které je nejznatelnější pro nejmenší tloušťku 10 nm a ubývá se zvyšující se tloušťkou  $La_{2/3}Sr_{1/3}MnO_3$  vrstvy. Tento jev se dá interpretovat jako příspěvek šíření ve vrstvě, odrazu od rozhraní vrstva/substrát a zpětného šíření. Pokud spočítáme



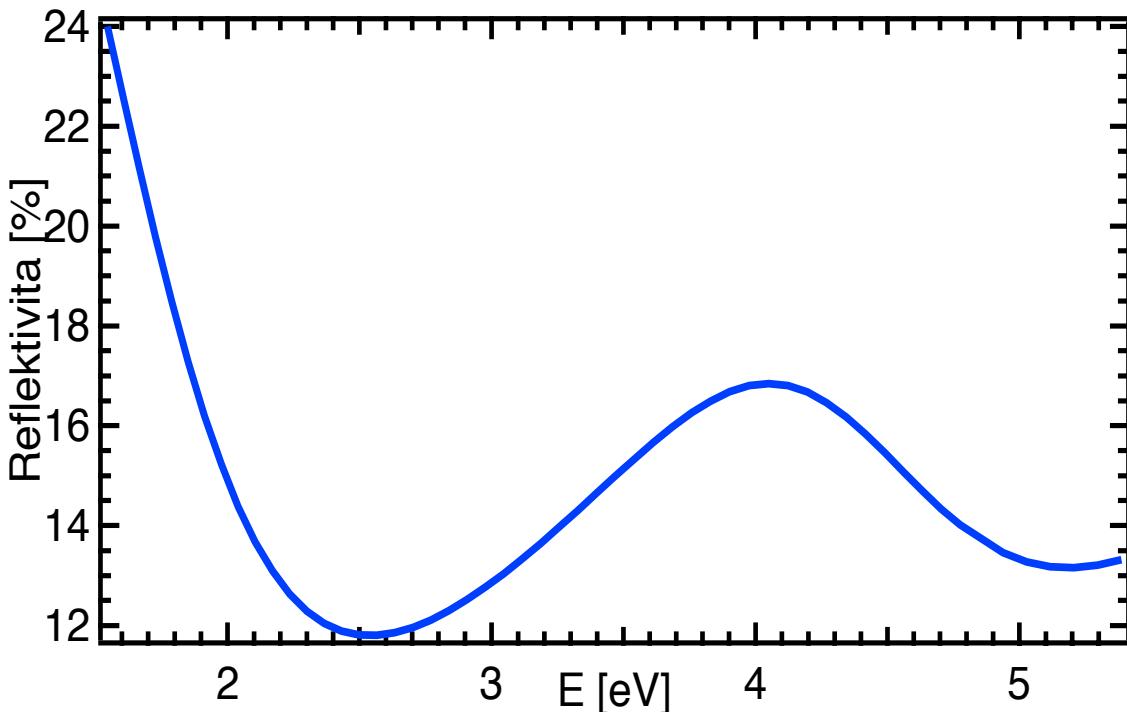
Obrázek 7.8: Spektrum spočítané penetrační hloubky  $La_{2/3}Sr_{1/3}MnO_3$ .



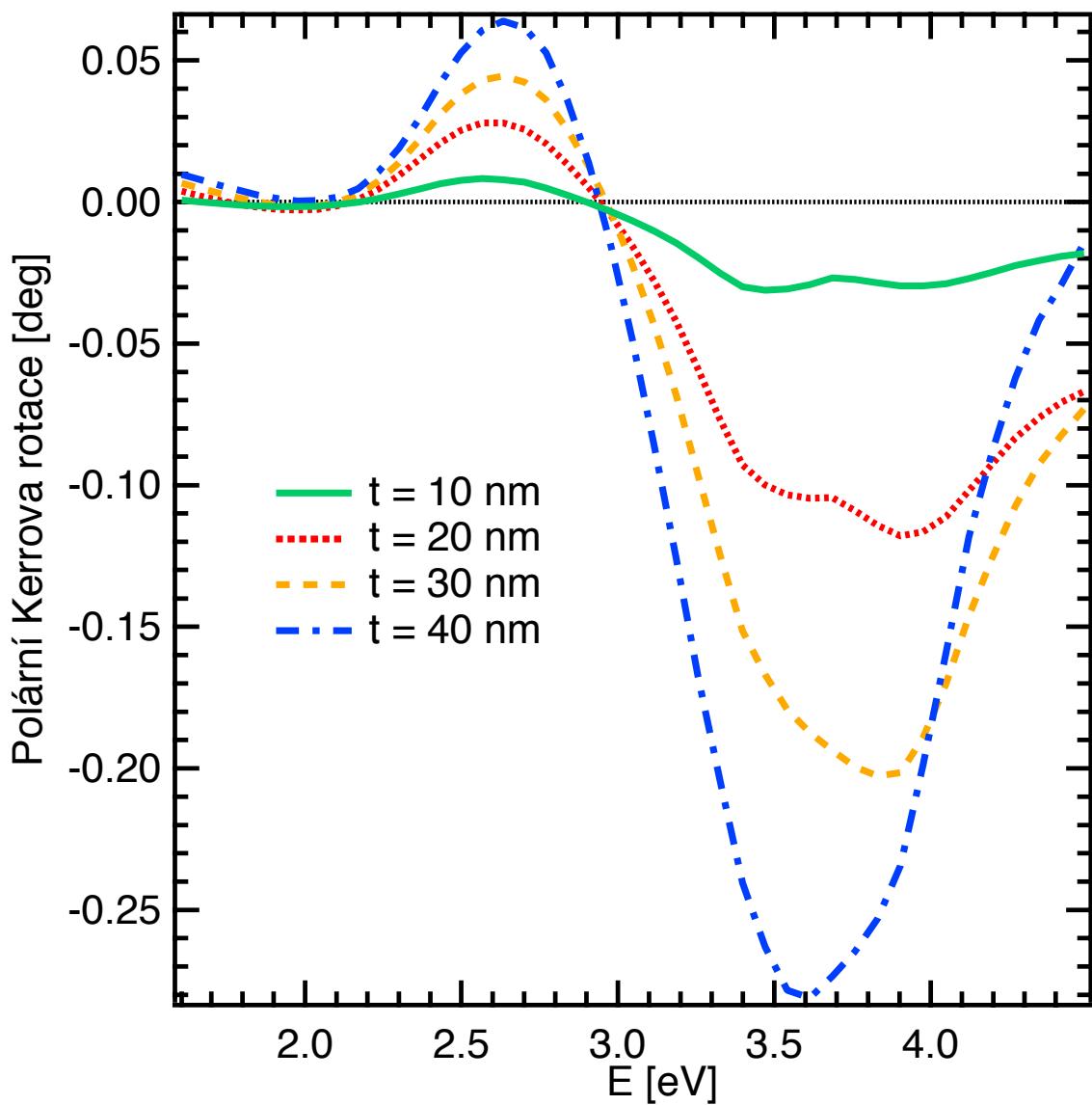
Obrázek 7.9: Spektrum spočítané reflektivity na rozhraní  $La_{2/3}Sr_{1/3}MnO_3/SrTiO_3$ .

penetrační hloubku podle vztahu (3.17) a vyneseme její závislost na energii dopadajícího fotonu (viz. graf 7.8), zjistíme, že elektromagnetická vlna vniká poměrně hluboko do vrstvy. Maximum nastává přibližně pro 2.5 eV a je zhruba 6.8 nm. Vliv šíření ve vrstvě a odrazu od substrátu by proto měl být nejvíce znatelný u první spektroskopické struktury ve spektru Kerrovy rotace. Tato skutečnost však není v námi naměřených spektrech výrazně znatelná. Příspěvek šíření v tenké vrstvě však neovlivňuje pouze velikost penetrační hloubky, ale také reflektivita na rozhraní vrstva/substrát. Její průběh v závislosti na energii dopadajících fotonů je znázorněn v grafu 7.9. Na tomto grafu si můžeme povšimnout poměrně ostrého maxima u energie 3.6 eV. Této hodnotě energie také odpovídá minimum spektra polární Kerrovy rotace. Lze tedy usuzovat, že rozšíření druhé spektroskopické struktury v polárním spektru Kerrovy rotace je způsobeno velkou penetrační hloubkou a maximem reflektivity na rozhraní vrstva/substrát a jedná se o příspěvek šíření ve vrstvě  $La_{2/3}Sr_{1/3}MnO_3$  a odrazu od substrátu. Tento vliv u první spektroskopické struktury není tak významný kvůli slabé magnetooptické odezvě vrstvy v tomto energetickém rozsahu a poloviční reflektivitě na rozhraní vrstva/substrát. Vliv příspěvku šíření elektromagnetické vlny v  $La_{2/3}Sr_{1/3}MnO_3$  může mít také za následek již zmíněné posunutí polohy maxima a minima v našich spektrech k vyšším energiím vůči spektrům uváděných v jiných publikacích [18, 17, 19, 20].

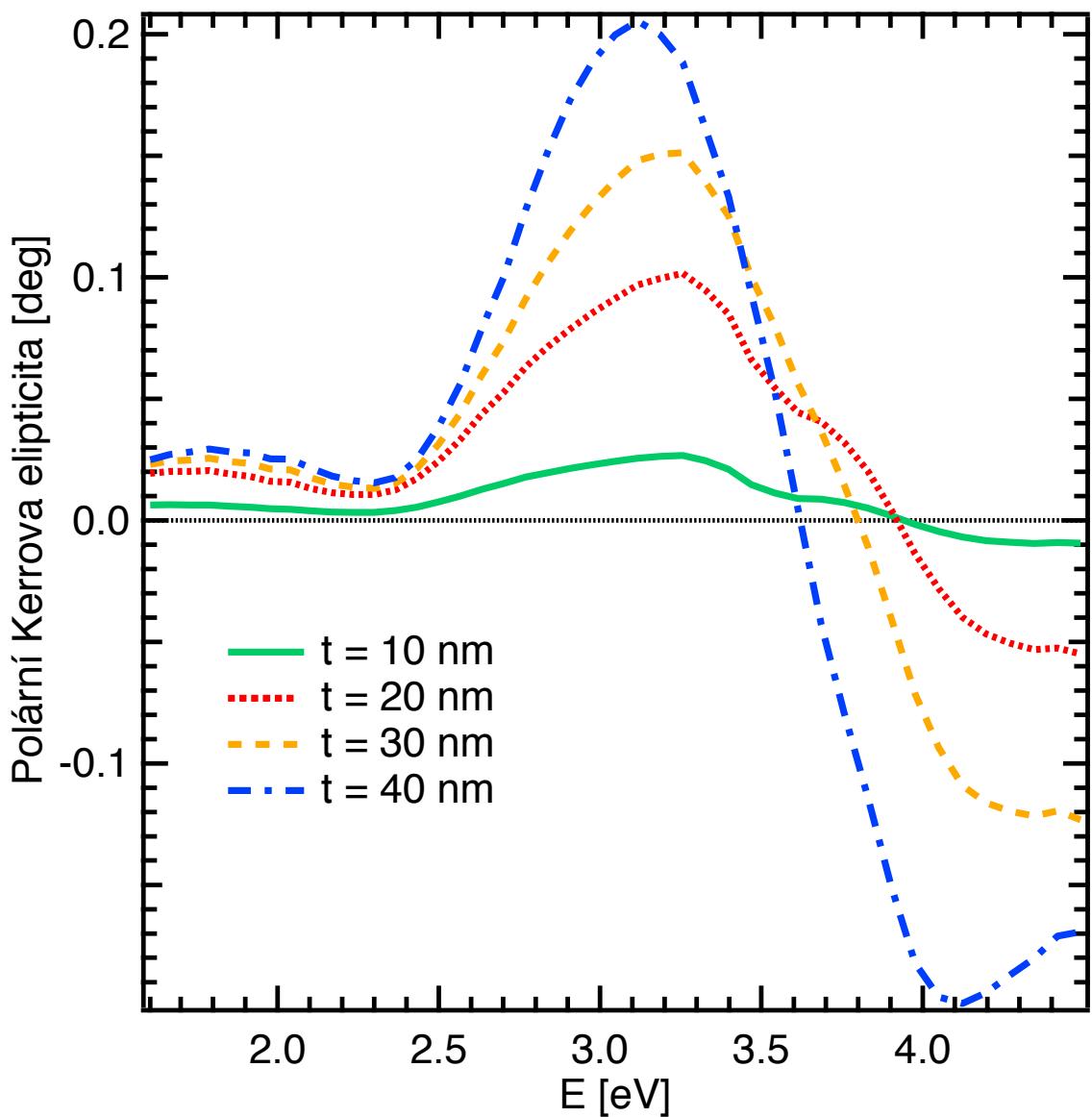
Z daných optických konstant lze jednoduše spočítat reflektivitu samotné vrstvy



Obrázek 7.10: Spektrum spočítané reflektivity samostatné vrstvy  $La_{2/3}Sr_{1/3}MnO_3$



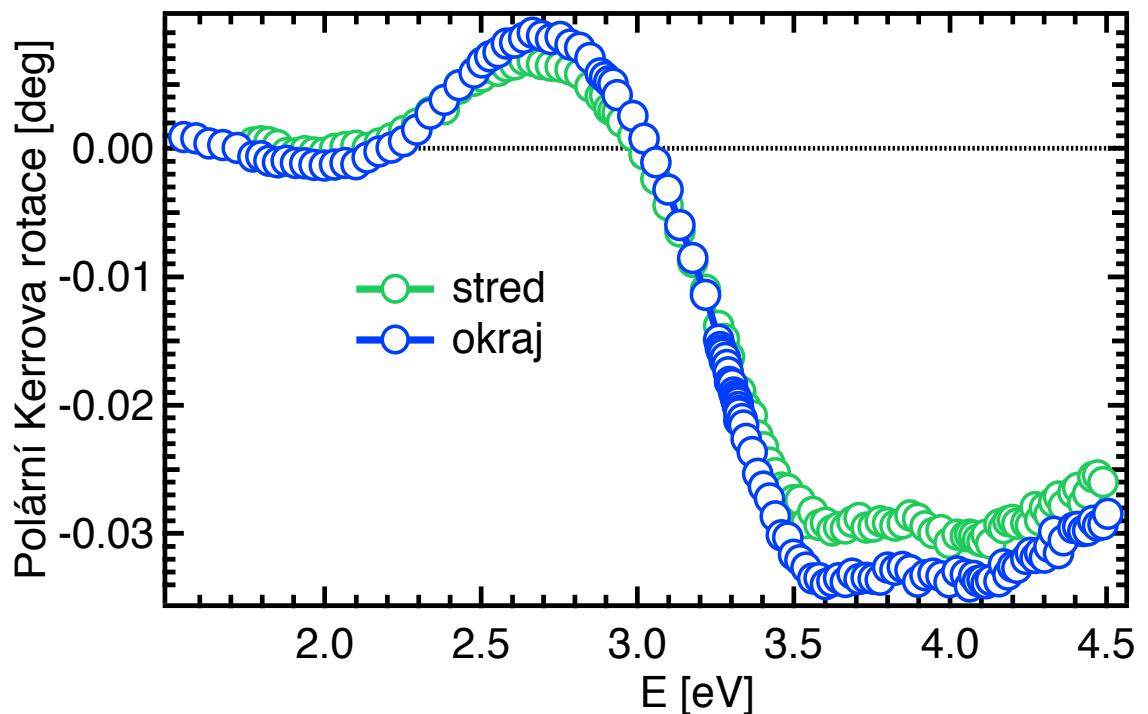
Obrázek 7.11: Modelová spektra polární Kerrovy rotace pro různé tloušťky vrstev.



Obrázek 7.12: Modelová spektra polární Kerrovovy ellipticity pro různé tloušťky vrstev.

$La_{2/3}Sr_{1/3}MnO_3$  podle vztahů (3.25) a (3.26). Její spektrální závislost je znázorněna v grafu 7.10 (k výpočtu byly použity optické konstanty vzorku s tloušťkou vrstvy 30 nm). Průběh je srovnatelný s průběhem reflektivity, který měřil Arima *a kol.* [61] na vzorcích  $LaMnO_3$ . Z grafu je patrné, že u nižších energií se začíná uplatňovat vliv Drudeho členu (viz. kapitola 3. a [27]), který popisuje vnitropásové přechody. Na druhou stranu pro energie vyšší než 2.5 eV se reflektivita dá dobře popsát Lorentzovým oscilátorem popisujícím mezipásové přechody.

Pro další výpočty jsme uvažovali magnetooptické konstanty vypočítané z polárního spektra vzorku s tloušťkou vrstvy 30 nm, který dle naší zkušenosti měl nejkvalitnější povrch. Se znalostí všech potřebných parametrů můžeme nyní spočítat modelová spektra polární Kerrovovy rotace a ellipticity. Tato spektra jsou znázorněna v grafech 7.11 a 7.12. Modelové křivky jsou v dobré shodě s experimentálními výsledky. Polohy maxim a minim modelových spekter se vůči experimentálním datům neposouvají. Lze tedy říci, že optické a magnetooptické konstanty získané na vzorku s tloušťkou vrstvy 30 nm velmi dobře popisují chování tenkých vrstev  $La_{2/3}Sr_{1/3}MnO_3$  s libovolnou tloušťkou. Nejpodstatnější rozdíl vůči experimentálním datům je u modelové křivky pro vzorek s tloušťkou vrstvy 10 nm. Pro zjištění stupně homogeneity tohoto vzorku jsme proto provedli ještě jedno měření při okraji vzorku. Porovnání naměřených spekter je znázorněno v grafu 7.13. Jak je z grafu



Obrázek 7.13: Experimentální spektra polární Kerrovovy rotace měřená ve dvou pozicích na vzorku s tloušťkou vrstvy  $t = 10$  nm

patrné, průběh spektra i jeho amplituda odpovídá spektru naměřenému v centru vzorku. Můžeme tedy usuzovat, že homogenita vzorku je i navzdory malé tloušťce poměrně dobrá.

Rozdíl mezi experimentálně naměřenými spektry a modelovými křivkami u tohoto vzorku lze tedy vysvětlit nepřesně udávanou tloušťkou vrstvy. To je pochopitelné vzhledem k její malé hodnotě.

V polární konfiguraci jsme také měřili vzorek s tloušťkou vrstvy 60 nm. Spektrum toho vzorku a jeho srovnání s modelovou křivkou je znázorněno v grafu 7.14. Z grafu je patrné, že amplitudy experimentálních dat jsou nižší než amplitudy u vzorku s tloušťkou vrstvy 40 nm. I v porovnání s modelovými křivkami jsou amplitudy experimentálních dat menší. Tato skutečnost může být způsobena tím, že při takto vysoké tloušťce nestačí již vrstva sledovat strukturu substrátu a začíná se "bortit", což potvrzuje tvrzení, že s přibývající tloušťkou stoupá míra drsnosti povrchu [21]. Vlivem rozptylu na povrchu vzorku tedy měříme menší amplitudy Kerrova jevu. V důsledku "zborcení" ideální struktury může mít vzorek také menší saturační magnetizaci, a proto i menší amplitudy Kerrova jevu. To potvrzují měření ze SQUID magnetometru.

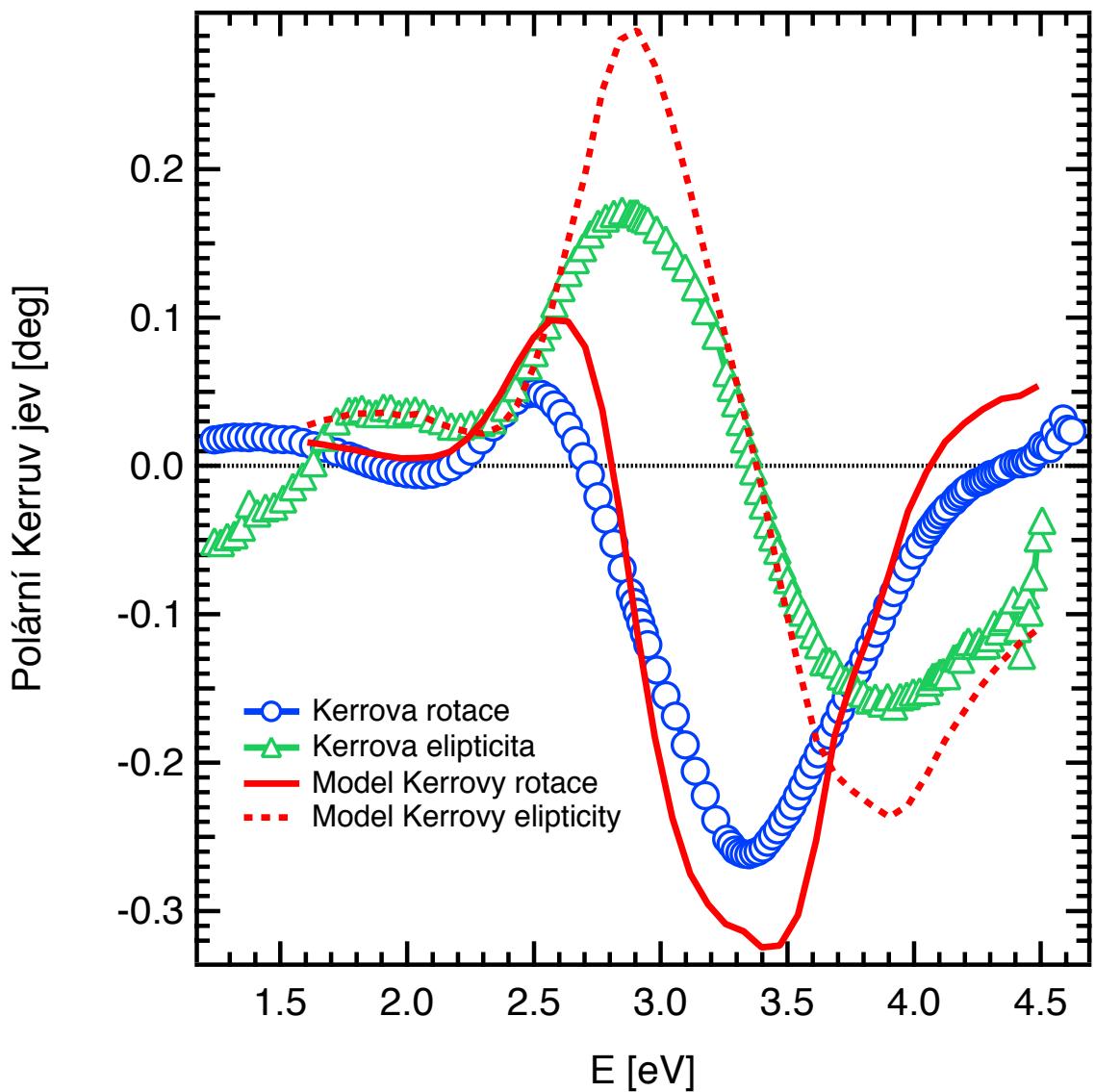
## 7.2 Longitudinální magnetizace

V longitudinálním uspořádání jsme měřili spektra při úhlu dopadu 54 stupňů a velikosti magnetického pole  $B = 0.1$  T [21]. Vzorek byl upevněn na nemagnetické destičce vložené do magnetického obvodu zajišťující longitudinální uspořádání magnetizace. Dopadající vlna byla  $p$  - polarizovaná. Měřili jsme ve spektrálním oboru 1.2 až 4.5 eV ze stejných důvodů jako v případě polární konfigurace. Při vyhodnocování spekter jsme postupovali jako v případě polárních spekter. Protože jsme měřili efekt, který je slabší než polární a úhel dopadu nebyl kolmý, míra šumu v měřeném signálu byla podstatně vyšší. V důsledku toho jsme proměřili pouze spektra Kerrovy longitudinální rotace.

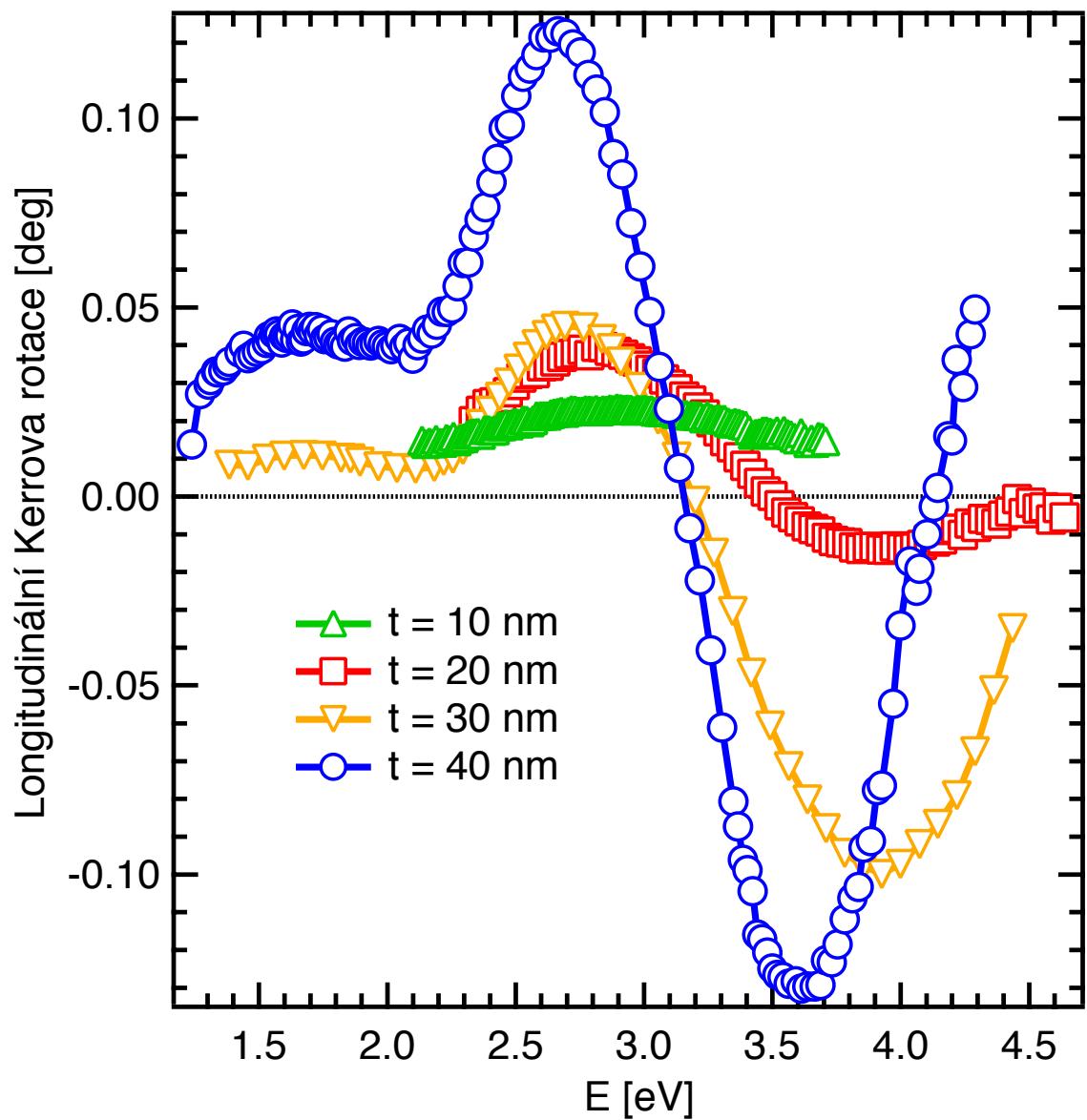
Změřená spektra longitudinální Kerrovy rotace pro různé tloušťky vrstev jsou znázorňena v grafu 7.15.

Z grafu 7.15 je patrné, že amplitudy longitudinálního Kerrova jevu jsou zhruba poloviční oproti polárnímu. Naměřeným spektrům opět dominují dvě význačné spektroskopické struktury. Maximum spekter longitudinální Kerrovy rotace nastává pro energie blízké 2.7 eV. Minimum nastává pro energie okolo 3.7. eV a posunuje se k vyšším energiím s ubývající tloušťkou vrstvy. Z grafu je patrné, že výsledný efekt nejmenší tloušťky 10 nm je velmi malý a z důvodu vysoké míry šumu v měřeném signálu je jeho spektrální rozsah velice úzký.

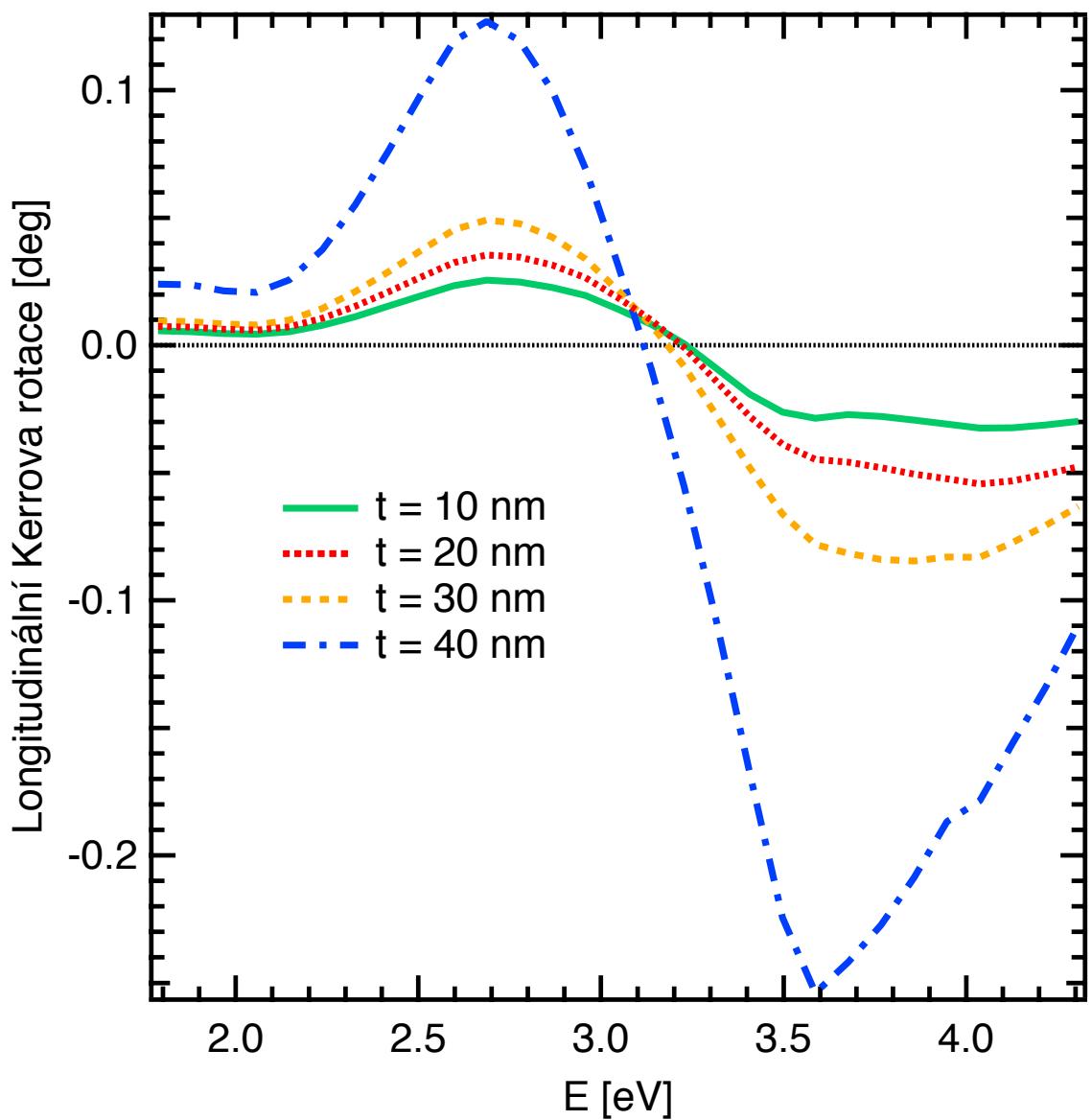
Spočítali jsme modelové křivky s pomocí teorie uvedené v kapitole 4. K výpočtu jsme opět použili optické a magnetooptické konstanty získané na 30 nm tenké vrstvě. Modelová



Obrázek 7.14: Experimentální spektrum polárního Kerrova jevu a jeho srovnání s modelovými křivkami pro vzorek s tloušťkou vrstvy 60 nm.



Obrázek 7.15: Experimentální spektra vzorků pro longitudinální orientaci magnetizace



Obrázek 7.16: Modelová spektra vzorků pro longitudinální orientaci magnetizace

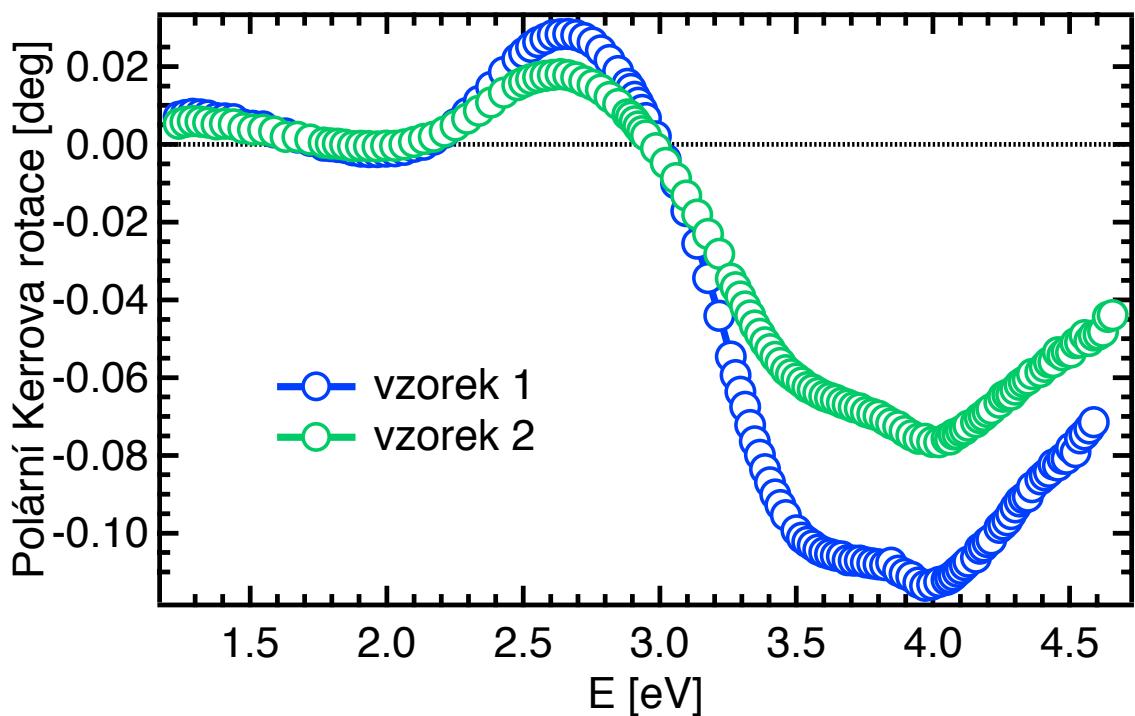
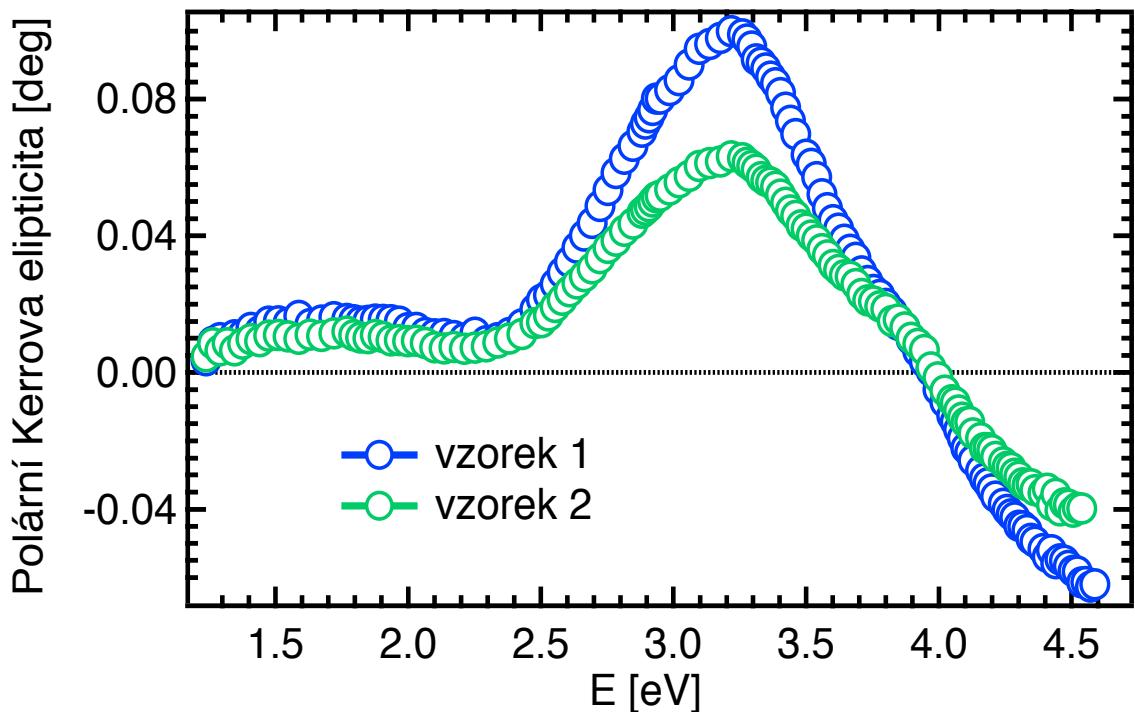
spektra jsou znázorněna v grafu 7.16. Průběhy teoreticky vypočítaných spekter poměrně dobře popisují experimentální data. Odchylky od 3.5 do 4 eV jsou způsobeny nepřesnými magnetooptickými konstantami vrstvy, ve kterých se nám nepodařilo zcela odizolovat vliv optických konstant substrátu. Tyto odchylky jsou nejvíce znatelné pro vzorek s toušťkou 40 nm, který vykazuje největší amplitudy efektu.

## 7.3 Vliv postdepozitních podmínek na spektra Kerrova jevu

Zjišťovali jsme vliv odlišných podmínek po depozici  $La_{2/3}Sr_{1/3}MnO_3$  vrstvy na tvar spekter polárního Kerrova jevu. V grafech 7.17 a 7.18 jsou znázorněny průběhy experimentálních spekter Kerrova jevu pro dva vzorky stejně tloušťky  $t = 20$  nm. Oba vzorky byly deponovány při stejných podmínkách, avšak postdepozitní podmínky byly různé.

- vzorek č.1: Rychlé ochlazení z  $T_{depos}$  na  $T = 300^\circ C$  v atmosféře směsi  $(O_2 + O_3)$ , poté chlazení ve vakuu s tlakem kyslíku  $P(O_2) = 5 \times 10^{-7}$  na pokojovou teplotu.
- vzorek č.2: Rychlé ochlazení z  $T_{depos}$  na  $T = 250^\circ C$  v atmosféře směsi  $(O_2 + O_3)$ , ustálení na této teplotě v kyslíkové atmosféře  $P(O_2) = 500\text{mbar}$  po dobu 10 min. Poté chlazení rychlostí  $7^\circ C/min$  na pokojovou teplotu.

Jak je patrné z grafů 7.17 a 7.18, průběh spektra polární Kerrovy rotace ani ellipticity se nemění. Z naměřených spekter můžeme pouze usuzovat, že vzorek č.1 má větší saturační magnetizaci, což následně potvrdila měření SQUID magnetometrem [60]. Takováto změna postdepozitních podmínek nemění strukturu vrstvy, pouze posouvá Curieovu teplotu  $T_C$  k vyšším hodnotám.

Obrázek 7.17: Vliv změny depozitních parametrů na polární Kerrou rotaci.  $t = 20$  nmObrázek 7.18: Vliv změny depozitních parametrů na polární Kerrou ellipticitu.  $t = 20$  nm

# Kapitola 8

## Závěr

### Studované vzorky a experimentální metody

V rámci předkládané diplomové práce jsme se zabývali optickými a magnetooptickými vlastnostmi tenkých vrstev  $La_{2/3}Sr_{1/3}MnO_3$  na substrátu  $SrTiO_3$  (001). Tyto vlastnosti byly studovány na vzorcích s rozdílnou tloušťkou  $La_{2/3}Sr_{1/3}MnO_3$  v rozmezí od 10 do 60 nm. Vzorky byly připraveny pulzní laserovou depozicí v laboratoři CRISMAT - ISMRA, CNRS v Caen ve Francii skupinou Prof. B. Merceyho. Pro lepší interpretaci výsledků nám byly poskytnuty některé výsledky měření na SQUID magnetometru a obrázky povrchové morfologie pořízené pomocí AFM mikroskopie. K teoretickým výpočtům jsme použili výsledky elipsometrických experimentů měřených na těchto vzorcích Dr. J. Mistríkem, ve skupině Prof. Yamaguchiho na Shizuoka Univerzity v Japonsku.

K našemu studiu byla použita magnetooptická reflexní spektroskopie. Měření bylo prováděno v polární konfiguraci (téměř kolmý dopad) a v longitudinální konfiguraci (úhel dopadu byl nastaven na 54 stupňů). Magnetooptická spektra mají rozsah energií 1.2 až 4.5 eV. Magnetické pole bylo nastaveno na  $470mT$  v polární konfiguraci a na  $100mT$  v longitudinální konfiguraci. Obě hodnoty postačovaly k nasycení vzorků. Vysoká přesnost měření byla zajištěna polarizační modulací. V longitudinálním uspořádání byla v důsledku poměrně malé reflektivity (pod 30%) a tudíž vysoké úrovně šumu v měřeném signálu proměřena pouze spektra Kerrovy longitudinální rotace. U dvou vzorků stejné tloušťky byl zjištován vliv změny postdepozitních parametrů na tvar spekter polárního Kerrova jevu.

### Experimentální výsledky

Spektrum polárního Kerrova jevu dominují dvě maxima opačných znamének. První z nich se nachází v blízkosti energie 2.6 eV a není výrazně tloušťkově závislá. Druhá dosahuje minima spektra pro hodnotu energie 3.6 eV a je znatelně tloušťkově závislá s viditelným

rozšířením pro tloušťky menší než 40 nm. Naměřená spektra svým průběhem splňují disperzní relace - polární Kerrova elipticita prochází inflexním bodem v oblasti energií, kde má polární Kerrova rotace své maximum. Tímto jsme si také ověřili, že elipticita byla měřena se správným fázovým rozdílem  $\delta$  a tedy kalibrace fázových destiček byla správná.

Longitudinální spektra Kerrovy rotace vykazují podobný průběh, jako spektra polární. Opět zde dominují dvě význačné spektroskopické struktury opačných znamének v blízkosti 2.7 a 3.7 eV. Amplitudy rotace jsou zhruba poloviční.

Průběhy naměřených polárních spekter a jejich amplitudy jsou v dobré shodě s průběhy uváděnými v jiných publikacích, avšak maxima a minima našich spekter jsou mírně posunuty směrem k vyšším energiím.

## Interpretace experimentálních výsledků

Při interpretaci naměřených spekter jsme vycházeli z modelu optické interakce elektromagnetické vlny v anizotropním prostředí. V případě polárního i longitudinálního Kerrova jevu byly vytvořeny počítacové modely v programu MATLAB.

K výpočtu jsme použili optické konstanty naměřené J. Mistríkem na těchto vzorcích a optické konstanty substrátu jsme převzali z literatury. Konstanty substrátu převzaté z literatury byly získané z měření na samostatných vzorcích, a proto ve skutečnosti zcela neodpovídají konstantám substrátu na námi měřených vzorcích. To bylo pozorováno u spekter vypočítaných magnetooptických konstant vrstvy  $La_{2/3}Sr_{1/3}MnO_3$ , kdy se nám nepodařilo zcela odfiltrovat vliv substrátu. Tento jev si můžeme vysvětlit difuzí atomů vrstvy do substrátu. Z vypočítaných magnetooptických konstant si lze udělat rámcovou představu, jaké elektronové přechody v  $La_{2/3}Sr_{1/3}MnO_3$  jsou magnetoopticky aktivní.

I přes tuto skutečnost však elektromagnetický model velmi dobře popisuje změřená spektra polárního a longitudinálního Kerrova jevu. Jeho užitečnost spočívá v tom, že naznačuje, kdy je třeba uvážit působení mikroskopických mechanismů.

## Náměty pro další výzkum

Rozšíření magnetooptické spektroskopie na šikmé úhly dopadu v polární konfiguraci. Díky většímu počtu spekter by se dala uvážit při modelování existence přechodové vrstvy mezi  $La_{2/3}Sr_{1/3}MnO_3$  a  $SrTiO_3$ . Získali bychom tím, jak přesnější magnetooptické konstanty  $La_{2/3}Sr_{1/3}MnO_3$ , tak i rámcovou představu, jak hluboko do substrátu  $La_{2/3}Sr_{1/3}MnO_3$  difunduje a jestli je naše představa správná. Dále by bylo užitečné fitovat spektra magnetooptických konstant vrstvy pomocí mikroskopických modelů a potvrdit tím správnost elektronových přechodů v látce uváděných v literatuře.

# Literatura

- [1] M. Hase, I. Terasaki, and K. Uchinokura, Phys. Rev. Lett. **70**, 3651 (1993).
- [2] S. Taniguchi *et al.*, J. Phys. Soc. Jap. **64**, 2758 (1995).
- [3] M. Uehara *et al.*, J. Phys. Soc. Jap. **65**, 2764 (1996).
- [4] R. M. Kusters, J. Singleton, D. A. Keen, and R. M. W. Hayes, Physica B **155**, 362 (1989).
- [5] R. von Helmholz, J. Wecker, B. Holtzapfel, L. Schultz, and K. Samwer, Phys. Rev. Lett. **71**, 2331 (1993).
- [6] K. Chahara, T. Ohno, M. Kasai, and Y. Kozono, App.Phys. Lett. **63**, 1990 (1993).
- [7] S. Jin *et al.*, Science **264**, 413 (1994).
- [8] M. N. Baibich, J. M. Broto, A. Fert, F. N. V. Dau, and F. Petroff, Phys. Rev. Lett. **61**, 2472 (1988).
- [9] Internetové stránky společnosti Western Digital.
- [10] Internetové stránky společnosti IBM.
- [11] G. H. Jonker and J. H. van Santen, Phisica **16**, 337 (1950).
- [12] E. O. Wollan and W. C. Koehler, Phys. Rev. **100**, 545 (1955).
- [13] C. Zener, Phys. Rev. **81**, 440 (1951).
- [14] J. B. Goodenough, Phys. Rev. **100**, 564 (1955).
- [15] Y. Tokura and Y. Tomoika, J. Mag. Mag. Mater. **200**, 1 (1999).
- [16] A. P. Ramirez, J. Phys.: Condens. Matter **9**, 8171 (1997).
- [17] S. Yamaguchi, Y. Okimoto, K. Ishibashi, and Y. Tokura, Phys. Rev. B **58**, 6862 (1998).

- [18] T. J. A. Popma and M. G. J. Kaminga, Phys. Rev. B **58**, 6862 (1998).
- [19] P. Fumagalli, C. Spaeth, and G. Gutherodt, IEEE Trans. Magn. **31**, 3277 (1995).
- [20] J. Cho, M. Gomi, and M. Abe, Jap. J. App. Phys. **29**, 1686 (1990).
- [21] M. Koubaa *et al.*, J. Mag. Mag. Mater. **272-276**, 1812 (2004).
- [22] Š. Višňovský, Czech. J. Phys. B **36**, 625 (1986).
- [23] Š. Višňovský and K. Yasumoto, Czech. J. Phys. B **51**, 229 (2001).
- [24] M. Nývlt, *Optical interactions in ultrathin magnetic film structures*, PhD thesis, MFF UK, 1996.
- [25] R. M. A. Azaam and N. M. Bashara, *Ellipsometry and Polarized Light* (North Holland, 1977).
- [26] M. Born and E. Wolf, *Principles of Optics* (Cambridge University Press, Cambridge, 1980).
- [27] F. Wooten, *Optical Properties of solids* (Academic Press, 1972).
- [28] D. W. Lynch and W. R. Hunter, *Handbook of Optical Constants of Solids* (ed. by E. Palik) (Academic Press, 1986).
- [29] W. Wettling, J. Mag. Mag. Mater. **3**, 147 (1976).
- [30] Š. Višňovský, Československý časopis pro fyziku **40**, 559 (1990).
- [31] D. B. Melrose and R. C. McPhedran, *Electromagnetic processes in dispersive media* (Cambridge University Press, Cambridge, 1991).
- [32] Š. Višňovský, Czech. J. Phys. B **36**, 559 (1990).
- [33] M. Valvoda, M. Polcarová, and P. Lukáč, *Základy strukturní analýzy* (Karolinum, Praha, 1992).
- [34] B. A. Auld and D. A. Wilson, J. App. Phys. **38**, 3331 (1967).
- [35] B. di Bartolo, *Optical Interactions in Solids* (John Wiley and Sons, 1968).
- [36] J. C. Suits, IEEE Trans. Magn. **38**, 3331 (1967).
- [37] A. K. Zvezdin and V. A. Kotov, *Modern Magnetooptics and Magneto-optical Materials* (Institute of Physics Publishing, 1997).

- [38] S. Krupička, *Fyzika feritů a příbuzných magnetických kysličníků* (Academia, Praha, 1969).
- [39] Š. Višňovský, Optické interakce v magnetických krystalech (doktorská disertační práce), 1989.
- [40] Y. R. Shen, Phys. Rev. **133**, A511 (1964).
- [41] F. L. C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, *Quantum Mechanics I, II* (Herrmann, Paris, 1977).
- [42] J. Ballhausen, *Introduction to Ligand field theory* (McGraw-Hill, 1962).
- [43] O. Litzman and M. Sekanina, *Užití grup ve fyzice* (Academia, 1982).
- [44] J. Fišer, *Úvod do molekulové symetrie* (SNTL, Praha, 1980).
- [45] P. Yeh, J. Opt. Soc. Am. **69**, 742 (1979).
- [46] K. Rokushima and J. Yamakita, J. Opt. Soc. Am. **73**, 901 (1983).
- [47] E. Noponen and J. Turunen, J. Opt. Soc. Am. **11**, 2494 (1994).
- [48] Návod k námi používanému synchronnímu detektoru.
- [49] M. Billardon, Ann. Phys. **7**, 233 (1962).
- [50] V. Goldschmidt, *Geochemistry* (Oxford University Press, 1958).
- [51] A. M. Haghiri-Gosnet and J. P. Renard, J. Phys. D: Appl. Phys **36**, R127 (2003).
- [52] A. S. Davydov, *Kvantová mechanika* (SPN, Praha, 1978).
- [53] J. M. D. Coey, M. Viret, L. Ranno, and K. Ounadjela, Phys. Rev. Lett. **75**, 3910 (1995).
- [54] W. Prellier, B. Mercey, and A. M. Haghiri-Gosnet, *Strain effects in manganite films(Encyclopedia of Nanoscience and Nanotechnology)* (American Science Publishers, 2003).
- [55] W. Prellier, M. Rajeswari, T. Venkatesan, and R. L. Green, App.Phys. Lett. **75**, 1446 (1999).
- [56] C. L. Lu, Z. L. Wang, C. Kwou, and Q. X. Jia, J. App. Phys. **88**, 4032 (2000).
- [57] T. Kanki, H. Tanaka, and T. Kawai, Solid State Comm. **114**, 267 (2000).

- [58] A. M. Haghiri-Gosnet, J. Wolfman, and B. Mercey, J. App. Phys. **88**, 4257 (200).
- [59] J. Mistřík, Doposud nepublikovaná elipsometrická měření na tenkých vrstvách LSMO, 2004.
- [60] M. Koubaa, *Études , optiques et magnéto-optiques de films minces contraints en  $L_{2/3}Sr_{1/3}MnO_3$ : role des paramètres de croissance et influence de l'épaisseur*, PhD thesis, Universite Paris XI, Orsay, Francie, 2004.
- [61] T. Arima and Y. Tokura, J. Phys. Soc. Jap. **64**, 2488 (1995).



# Summary

In last decades, epitaxial films of perovskites containing 3d and 4f cations attracted a considerable interest. After discovery of the high temperature superconductivity, a colossal magnetoresistence has been found in perovskites. These materials exhibit large changes of electrical resistance when an external magnetic field is applied. This effect is useful for development of low magnetic field sensors with dimensions potentially reduced down to the nanometer range. A high data density in magnetic recording has already been achieved with sensors exploiting a giant magnetoresistence effect and it is increasing. The colossal magnetoresistence may induce analogous progress in future. These materials are studied by many laboratories from many physical aspects.

The thesis is focused to the experimental study of physical properties of the  $\text{La}_{2/3}\text{Sr}_{1/3}\text{MnO}_3$  thin films using optical and magneto-optical methods. It forms a part of a long-term research project conducted in collaboration between Faculty of Mathematics and Physics at Charles University in Prague (magneto-optical spectroscopy), Institut d'Electronique Fondamentale at University Paris XI in Orsay (sample preparation, structural diagnostics and transport measurements) and Research Institute of Electronics at Shizuoka University (spectroscopic ellipsometry).

Chapter 1 presents an introduction to the subject of the thesis.

Chapter 2 deals with a physical description of polarized monochromatic light and defines magnetooptical Kerr parameters for incident s and p polarizations.

Chapter 3 describes how to characterize optical properties of non-magnetic and magnetic crystals with different symmetries by using macroscopic electromagnetic theory where these properties are described by a permittivity tensor. Microscopic Lorentz-Drude and semiclassical models are also discussed.

Chapter 4 is devoted to a detailed analysis of the response of plane electromagnetic waves with anisotropic media using the theory for two-dimensional anisotropic dielectric gratings in the limit of uniform anisotropic media. Most attention is paid to the magneto-optical effects at polar and longitudinal magnetizations.

Experimental method based on the azimuth modulation and compensation technique forms the subject of Chapter 5. The magnetooptical spectrometer covers a photon energy range from 1.5 eV to 4.5 eV. Magnetic fields up to 1.4 Tesla can be applied. A precision of the ellipsometric angle determination is  $10^{-4}$  degree.

The structure and electronic properties of perovskites and details of sample preparation and characterization are given in Chapter 6. The  $\text{La}_{2/3}\text{Sr}_{1/3}\text{MnO}_3$  films were deposited on  $\text{SrTiO}_3(001)$  substrates by a pulsed laser deposition at a reduced substrate temperature of 630°C under a low oxygen/ozone pressure of  $5 \times 10^{-3}$  mbar. The thickness of the films ranged between 10 nm and 60 nm. The surface roughness was lower than 0.2 nm.

The spectroscopic magneto-optical results, their discussion and interpretation are given in Chapter 7. The best-resolved spectra were obtained for the film thickness of 40 nm. Two strong peaks of opposite sign centred near 2.6 eV and 3.6 eV dominate the polar Kerr rotation spectra. The MO spectra show features typical for spin- and parity-allowed electric dipole transitions. They are assigned to Mn states broadened by  $\text{Mn}^{3+} - \text{Mn}^{4+}$  intervalence coupling. Dependence on film thickness is discussed. Main results were presented at International Conference on Magnetism and published in Journal of Magnetism and Magnetic Materials. Chapter 8 summarizes the subject of the thesis, experimental approaches which have been used, experimental results and their interpretation. Finally, some topics for the future research in this field are proposed.