



**MATEMATICKO-FYZIKÁLNÍ
FAKULTA**
Univerzita Karlova

BAKALÁŘSKÁ PRÁCE

Ondřej Faiman

THz spektroskopie nanostruktur v blízkém poli

Katedra chemické fyziky a optiky

Vedoucí bakalářské práce: doc. RNDr. Tomáš Ostatnický,
Ph.D.

Studijní program: Fyzika

Studijní obor: Obecná fyzika

Praha 2024

Prohlašuji, že jsem tuto bakalářskou práci vypracoval(a) samostatně a výhradně s použitím citovaných pramenů, literatury a dalších odborných zdrojů. Tato práce nebyla využita k získání jiného nebo stejného titulu.

Beru na vědomí, že se na moji práci vztahují práva a povinnosti vyplývající ze zákona č. 121/2000 Sb., autorského zákona v platném znění, zejména skutečnost, že Univerzita Karlova má právo na uzavření licenční smlouvy o užití této práce jako školního díla podle §60 odst. 1 autorského zákona.

V dne

Podpis autora

Rád bych zde poděkoval svému vedoucímu doc. RNDr. Tomáši Ostatnickému, Ph.D. za jeho podněty a rady vzhledem k věcné i formální stránce práce. Výpočetní kapacity byly poskytnuty projektem e-INFRA CZ (ID:90254) podpořeným Ministerstvem školství, mládeže a tělovýchovy České republiky.

Název práce: THz spektroskopie nanostruktur v blízkém poli

Autor: Ondřej Faiman

Katedra: Katedra chemické fyziky a optiky

Vedoucí bakalářské práce: doc. RNDr. Tomáš Ostatnický, Ph.D., Katedra chemické fyziky a optiky

Abstrakt: V této práci se zabýváme popisem odezvy tenké vrstvy v THz blízkém poli. V první části metodou obrazů odvodíme a ověříme vztahy pro elektrické pole dipólu u dielektrické vrstvy konečné tloušťky, které porovnáme se známým výsledkem pro dielektrický poloprostor (tzv. Point dipole model). V druhé části nejdříve spočteme elektrický potenciál homogenně nabitě kružnice uvnitř dielektrické vrstvy, který poté využijeme k iterativnímu výpočtu potenciálu vyvolaného nelokální odezvou vrstvy. S pomocí Drudeho modelu pro výpočet lokální vodivosti nakonec tento výsledek ověříme určením spektrální závislosti odezvy na polovodičových nanostrukturách s homogenním a nehomogenním rozložením elektronů.

Klíčová slova: terahertzové záření, SNOM, nelokální odezva, tenké vrstvy, model bodového dipólu

Title: THz spectroscopy of nanostructures in near field

Author: Ondřej Faiman

Department: Department of Chemical Physics and Optics

Supervisor: doc. RNDr. Tomáš Ostatnický, Ph.D., Department of Chemical Physics and Optics

Abstract: In this work we propose a new way to describe the response of thin layers in terahertz SNOM (scanning near-field optical microscopy) experiments. In the first section, using the method of images we derive and verify formulae for the electric field of a dipole near a dielectric layer of finite thickness. We then compare the result with the well-known Point dipole model. In the second section, we first find the electric potential of a uniformly charged ring inside a dielectric layer, which we then use to derive a potential induced by a non-local response of the layer. Finally, we apply the Drude model to determine local conductivity, which lets us verify our result on the spectral dependence of the response of semiconductor nanostructures with homogeneous and inhomogeneous electron density.

Keywords: terahertz radiation, SNOM, non-local response, thin layers, Point dipole model

Obsah

Úvod	2
1 Lokální odezva	3
1.1 Pole dipólu a vazebné podmínky	3
1.2 Problém dvou dielektrik	4
1.3 Problém tří dielektrik	6
1.4 Limitní chování potenciálu	10
1.5 Vizualizace výsledků	12
2 Nelokální odezva	16
2.1 Potenciál kružnice v dielektrické vrstvě	16
2.1.1 Kružnice ve vakuu	16
2.1.2 Kružnice v dielektriku	17
2.1.3 Ověření vazebných podmínek a konvergence	19
2.2 Iterativní řešení	21
3 Numerické výpočty	23
3.1 Metodika výpočtů	23
3.2 Homogenní rozložení elektronů	25
3.3 Nehomogenní rozložení elektronů	30
Závěr	35
Seznam použité literatury	36
Seznam obrázků	38

Úvod

Klasická mikroskopie je limitovaná Abbeho difrakčním limitem, který říká, že maximální rozlišení mikroskopu odpovídá polovině vlnové délky použitého záření. Posun v této oblasti představoval rozvoj oblasti rozptylovací optické skenovací mikroskopie v blízkém poli (s-SNOM), která nemá žádný limit související s vlnovou délkou záření.

Princip s-SNOMu spočívá v osvětlení hrotu mikroskopu atomových sil (AFM) fokusovaným paprskem. Optický obraz je potom tvořen z odraženého světla. Hrot mikroskopu kmitá se známou frekvencí, což umožňuje filtraci pozadí (detailnější popis viz například Keilmann a Hillenbrand, 2004).

Poměrně jednoduchý model (PDM-Point dipole model) elektrického pole rozptýleného od hrotu mikroskopu poskytují ve své práci Knoll a Keilmann (Knoll a Keilmann, 2000), kde využijí toho, že vlnová délka signálu přicházejícího na hrot je značně větší než jeho rozměry, a potom je možné elektromagnetickou vlnu aproximovat homogenním elektrickým polem a hrot dielektrickou koulí. Celá úloha poté přechází na hledání pole dipólu u dielektrického poloprostoru. Autorům se v této práci pomocí tohoto modelu podařil vysvětlit například prudký nárůst průřezu odraženého svazku.

Ačkoliv tento model dokáže dobře kvalitativně vysvětlit některé jevy vznikající na s-SNOMu, tak neposkytuje dobrý kvantitativní popis. Jedním takovým jevem je například závislost polarizovatelnosti hrotu mikroskopu na výšce nad vzorkem (tzv. approach curve). Tuto závislost úspěšněji modelovali ve svém článku Cvitkovic, Ocelic a Hillenbrand (2007). Na rozdíl od PDM uvažují hrot jako elipsoid a výsledné pole popisují jako pole dvou monopólů (konečného dipólu) umístěných ve středu křivosti elipsoidu interagujících s dielektrickým poloprostorem, kde se interakce účastní pouze bližší náboj.

Jiný přístup ke zlepšení popisu interakce hrotu se vzorkem poskytnuli Lu a kol. (2020), kteří představili vylepšený model bodového dipólu (IPDM), který bere v úvahu i geometrii hrotu. Autoři zde navrhují upravit poloměr a výšku nad vzorkem dielektrické koule z PDM tak, aby si její polarizace odpovídala s polarizací hrotu interagujícího s dielektrickým poloprostorem vypočítanou numericky metodou konečných prvků.

Žádný z předchozích modelů nicméně nebere v úvahu závislost výsledného pole na tloušťce vzorku. Ta byla experimentálně měřena např. v práci Raschkeho a Lienaua (Raschke a Lienau, 2003). Aizpurua a kol. (2008) ve svém článku nabízejí teoretický popis, který uvažuje konečné rozměry dielektrické vrstvy. Výsledné pole zde autoři popisují jako součet všech rovinných vln odražených na multivrstvě. Zde se jedná ovšem o mikroskopii v infračerveném poli, kde nemůžeme přejít do kvazistacionárního přiblížení. Podobnou úvahu založenou na odrazech vlnění na hranicích vrstvy použili Zhang a kol. (2011).

Naším cílem bude nejprve popsat rozptýlené THz záření plně kvazistacionárním modelem, který bere v úvahu i rozměry vzorku, při lokální i nelokální odezvě dielektrika a tyto modely dále ověřit numerickými výpočty.

1. Lokální odezva

1.1 Pole dipólu a vazebné podmínky

Chceme hledat rozložení elektrického pole rozptýleného na hrotu mikroskopu, který interaguje s dielektrickou vrstvou, v kvazistacionárním přiblížení. Formulujeme tedy náš problém podobně jako v práci Knolla a Keilmanna (Knoll a Keilmann, 2000) jako hledání elektrického pole generovaného dielektrickou koulí o poloměru a a permitivitě ε_k ve vnějším homogenním elektrickém poli \mathbf{E}_0 kolmém k ploše vrstvy (směr osy z).

Koule je umístěná v prostředí o permitivitě ε_1 (označme jako oblast I) ve vzdálenosti z_0 od povrchu vrstvy. Vrstva má tloušťku d a permitivitu ε_2 (oblast II) a je umístěna na substrátu o permitivitě ε_3 (oblast III). Hranici dělicí oblast I a II označíme ∂_1 a hranici mezi II a III označme ∂_2 .

Budeme pracovat ve válcových souřadnicích, kde osa z povede kolmo k vrstvě a prochází středem koule, osu ρ značí vzdálenost od z umístíme na povrch dielektrické vrstvy (viz Obrázek 1.1). Při takto zavedeném souřadném systému získává problém rotační symetrii a vymizí nám závislost na polárním úhlu φ .

Problém dielektrické koule v homogenním elektrickém poli má známé řešení, kde můžeme kouli nahradit dipólem s dipólovým momentem (viz Sedlák a Štoll, 2012, s. 125):

$$\mathbf{p} = 4\pi a^3 \varepsilon_1 \frac{\varepsilon_k - \varepsilon_1}{\varepsilon_k + 2\varepsilon_1} \mathbf{E}_0 = p \mathbf{e}_z, \quad (1.1.1)$$

kde \mathbf{e}_z je jednotkový vektor ve směru osy z . Nás bude nejprve zajímat elektrický potenciál pole dipólu $\phi(\rho, z)$ v celém prostoru, který s elektrickou intenzitou pole souvisí vztahem (viz Sedlák a Štoll, 2012, s. 35 a s. 141):

$$\mathbf{E} = -\nabla\phi = -\frac{\partial\phi}{\partial\rho}\mathbf{e}_\rho - \frac{\partial\phi}{\partial z}\mathbf{e}_z, \quad (1.1.2)$$

kde \mathbf{e}_ρ je jednotkový vektor v radiálním směru od osy z .

Vektor elektrické intenzity musí splnit spojitost tečných složek k vrstvě $E_{\parallel} = \mathbf{E} \cdot \mathbf{e}_\rho$ na ∂_1 a ∂_2 . Pro vektor elektrické indukce \mathbf{D} v dielektriku máme spojitost kolmé složky $D_{\perp} = \mathbf{D} \cdot \mathbf{e}_z$ na ∂_1 a ∂_2 (viz Sedlák a Štoll, 2012, s. 117). Z čehož využitím vztahu $\mathbf{D} = \varepsilon\mathbf{E}$ dostáváme sadu čtyř hraničních podmínek:

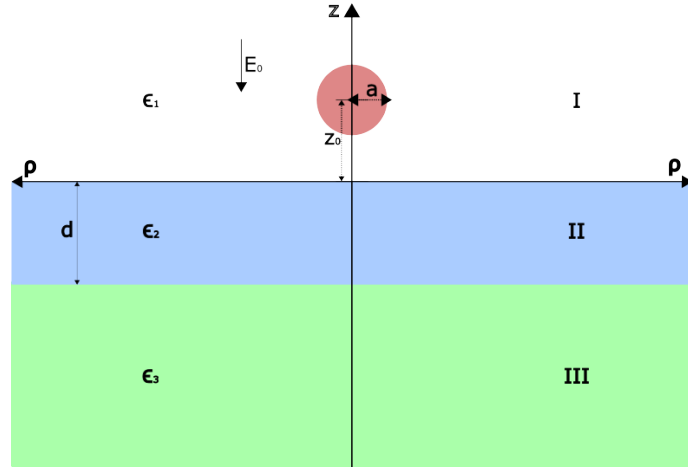
$$\left. \frac{\partial\phi^I}{\partial\rho} \right|_{\partial_1} = \left. \frac{\partial\phi^{II}}{\partial\rho} \right|_{\partial_1}, \quad (1.1.3a)$$

$$\left. \frac{\partial\phi^{II}}{\partial\rho} \right|_{\partial_2} = \left. \frac{\partial\phi^{III}}{\partial\rho} \right|_{\partial_2}, \quad (1.1.3b)$$

$$\varepsilon_1 \left. \frac{\partial\phi^I}{\partial z} \right|_{\partial_1} = \varepsilon_2 \left. \frac{\partial\phi^{II}}{\partial z} \right|_{\partial_1}, \quad (1.1.3c)$$

$$\varepsilon_2 \left. \frac{\partial\phi^{II}}{\partial z} \right|_{\partial_2} = \varepsilon_3 \left. \frac{\partial\phi^{III}}{\partial z} \right|_{\partial_2}, \quad (1.1.3d)$$

kde ϕ^I , ϕ^{II} a ϕ^{III} postupně značíme potenciál v oblastech I, II, III.



Obrázek 1.1: Schematický náčrt problému dielektrické koule v homogenním elektrickém poli u dielektrické vrstvy

Při řešení využijeme známého vztahu pro potenciál dipólu (viz Sedlák a Štoll, 2012, s. 61):

$$\phi_d^k = \frac{1}{4\pi\epsilon_k} \frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{R}d}}{(\rho^2 + (z - z_d)^2)}, \quad (1.1.4)$$

kde $k = \text{I,II,III}$ značí oblast působení, z_d značí polohu dipólu na ose z a $\mathbf{e}_{\mathbf{R}d}$ je jednotkový vektor v radiálním směru od dipólu.

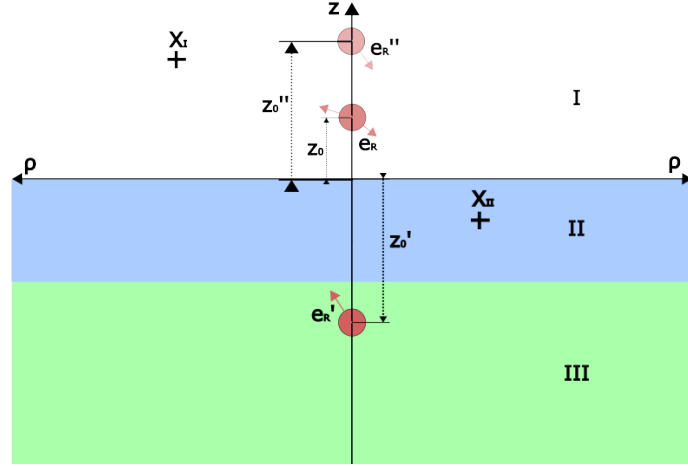
Jeho gradient potom můžeme zapsat jako (viz Sedlák a Štoll, 2012, s. 35):

$$\nabla\phi_d^k = -\frac{1}{4\pi\epsilon_k} \frac{3(\mathbf{p} \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{R}d})\mathbf{e}_{\mathbf{R}d} - \mathbf{p}}{(\rho^2 + (z - z_d)^2)^{3/2}}. \quad (1.1.5)$$

1.2 Problém dvou dielektrik

Abychom splnili sadu čtyř podmínek (1.1.3), použijeme metodu obrazů (popsanou např. v knize Sedlák a Štoll (2012, s. 102)), která spočívá v tom, že někam do prostoru umístíme stejné nosiče náboje (bodový náboj, dipól, ...), jako které máme zadané tak, aby splňovaly danou okrajovou podmínku. Fyzikálně pak tyto obrazy reprezentují náboj nahromaděný na povrchu vodiče či dielektrika.

My začneme plněním podmínek na ∂_1 , kde se hromadí povrchový náboj, který působí v oblasti I i II. Proto umístíme nový dipól do vzdálenosti z'_0 (v oblasti II) od vrstvy s dipólovým momentem \mathbf{p}' . Zároveň přidáme další dipól s dipólovým momentem \mathbf{p}'' do oblasti I ve vzdálenosti z''_0 od vrstvy (viz. Obrázek 1.2). Neznámé parametry z' , z'' , \mathbf{p}' a \mathbf{p}'' určíme z okrajových podmínek.



Obrázek 1.2: Schematický nákras poloh reálného dipólu a zrcadlených dipólů s naznačeným směrem jednotkových vektorů \mathbf{e}_R , \mathbf{e}'_R a \mathbf{e}''_R do libovolného bodu X_I v oblasti I a X_{II} v oblasti II.

Označme ještě jednotkový vektor v radiálním směru od původního dipólu \mathbf{e}_R , od dipólu v oblasti I \mathbf{e}'_R a od dipólu v oblasti II \mathbf{e}''_R . Celkový potenciál pak můžeme zapsat jako (zatím neuvažujeme oblast III):

$$\phi^I = \frac{1}{4\pi\varepsilon_1} \frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{e}_R}{(\rho^2 + (z - z_0)^2)} + \frac{1}{4\pi\varepsilon_1} \frac{\mathbf{p}' \cdot \mathbf{e}'_R}{(\rho^2 + (z + z'_0)^2)}, \quad (1.2.1a)$$

$$\phi^{II} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_2} \frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{e}_R}{(\rho^2 + (z - z_0)^2)} + \frac{1}{4\pi\varepsilon_2} \frac{\mathbf{p}'' \cdot \mathbf{e}''_R}{(\rho^2 + (z - z''_0)^2)}. \quad (1.2.1b)$$

Využitím (1.1.5) a dosazením do podmínky (1.1.3c) pak dostáváme:

$$\begin{aligned} \frac{3p(\mathbf{e}_z \cdot \mathbf{e}_R)^2 - p}{(\rho^2 + z_0^2)^{3/2}} + \frac{3p'(\mathbf{e}_z \cdot \mathbf{e}'_R)^2 - p'}{(\rho^2 + z_0'^2)^{3/2}} &= \frac{3p(\mathbf{e}_z \cdot \mathbf{e}_R)^2 - p}{(\rho^2 + z_0^2)^{3/2}} + \frac{3p''(\mathbf{e}_z \cdot \mathbf{e}''_R)^2 - p''}{(\rho^2 + z_0''^2)^{3/2}}, \\ \frac{3p'z_0'^2}{(\rho^2 + z_0'^2)^{5/2}} - \frac{p'}{(\rho^2 + z_0^2)^{3/2}} &= \frac{3p''z_0''^2}{(\rho^2 + z_0''^2)^{5/2}} - \frac{p''}{(\rho^2 + z_0^2)^{3/2}}. \end{aligned}$$

Aby podmínka byla splněna, musí tedy platit $z'_0 = z''_0$ a $\mathbf{p}' = \mathbf{p}''$.

Dále dosadíme potenciál (1.2.1) do podmínky (1.1.3a) a opět využijeme (1.1.5), čímž dopočítáme závislost z'_0 a \mathbf{p}' na z_0 a \mathbf{p} :

$$\begin{aligned} \frac{1}{4\pi\varepsilon_1} \left(\frac{3(\mathbf{p} \cdot \mathbf{e}_R)(\mathbf{e}_R \cdot \mathbf{e}_\rho)}{(\rho^2 + z_0^2)^{3/2}} + \frac{3(\mathbf{p}' \cdot \mathbf{e}'_R)(\mathbf{e}'_R \cdot \mathbf{e}_\rho)}{(\rho^2 + z_0'^2)^{3/2}} \right) &= \frac{1}{4\pi\varepsilon_2} \frac{3(\mathbf{p} \cdot \mathbf{e}_R)(\mathbf{e}_R \cdot \mathbf{e}_\rho)}{(\rho^2 + z_0^2)^{3/2}} \\ &+ \frac{1}{4\pi\varepsilon_2} \frac{3(\mathbf{p}' \cdot \mathbf{e}''_R)(\mathbf{e}''_R \cdot \mathbf{e}_\rho)}{(\rho^2 + z_0'^2)^{3/2}}, \end{aligned}$$

$$\frac{1}{\varepsilon_1} \frac{(\mathbf{p}' \cdot \mathbf{e}'_R)(\mathbf{e}'_R \cdot \mathbf{e}_\rho)}{(\rho^2 + z_0'^2)^{3/2}} - \frac{1}{\varepsilon_2} \frac{(\mathbf{p}' \cdot \mathbf{e}''_R)(\mathbf{e}''_R \cdot \mathbf{e}_\rho)}{(\rho^2 + z_0'^2)^{3/2}} = \frac{(\mathbf{p} \cdot \mathbf{e}_R)(\mathbf{e}_R \cdot \mathbf{e}_\rho)}{(\rho^2 + z_0^2)^{3/2}} \left(\frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{\varepsilon_1 \varepsilon_2} \right).$$

Všechny dipóly leží na ose z , takže tečné složky (ve směru \mathbf{e}_ρ) vektorů \mathbf{e}'_R a \mathbf{e}''_R musí být na vrstvě stejné. Dostáváme tak:

$$\frac{1}{\varepsilon_1} \frac{(\mathbf{p}' \cdot \mathbf{e}'_R)}{(\rho^2 + z_0'^2)^{3/2}} - \frac{1}{\varepsilon_2} \frac{(\mathbf{p}' \cdot \mathbf{e}''_R)}{(\rho^2 + z_0'^2)^{3/2}} = \frac{\mathbf{e}_R \cdot \mathbf{e}_\rho}{\mathbf{e}'_R \cdot \mathbf{e}_\rho} \frac{(\mathbf{p} \cdot \mathbf{e}_R)}{(\rho^2 + z_0^2)^{3/2}} \left(\frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{\varepsilon_1 \varepsilon_2} \right),$$

$$\frac{1}{\varepsilon_1} \frac{p' z'_0}{(\rho^2 + z'_0{}^2)^{3/2}} + \frac{1}{\varepsilon_2} \frac{p' z'_0}{(\rho^2 + z'_0{}^2)^{3/2}} = \frac{\mathbf{e}_R \cdot \mathbf{e}_\rho}{\mathbf{e}'_R \cdot \mathbf{e}_\rho} \frac{p z_0}{(\rho^2 + z_0^2)^{3/2}} \left(\frac{\varepsilon_2 - \varepsilon_1}{\varepsilon_1 \varepsilon_2} \right),$$

$$\frac{p' z'_0}{(\rho^2 + z'_0{}^2)^{3/2}} = \frac{\mathbf{e}_R \cdot \mathbf{e}_\rho}{\mathbf{e}'_R \cdot \mathbf{e}_\rho} \frac{p z_0}{(\rho^2 + z_0^2)^{3/2}} \left(\frac{\varepsilon_2 - \varepsilon_1}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2} \right).$$

Z čehož vidíme, že abychom dostali rovnost, musíme položit $\mathbf{p}' = \mathbf{p}'' = \frac{\varepsilon_2 - \varepsilon_1}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2} \mathbf{p}$ a $z'_0 = z''_0 = z_0$. Vzniká nám tak imaginární dipól v bodě $z = -z_0$, který působí do oblasti I. Jednotkový vektor v radiálním směru od nově vzniklého dipólu označme \mathbf{e}_{R0} . Dosazením do (1.2.1) dostáváme potenciál:

$$\phi^I = \frac{1}{4\pi\varepsilon_1} \left(\frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{e}_R}{(\rho^2 + (z - z_0)^2)} + \frac{\varepsilon_2 - \varepsilon_1}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2} \frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{e}_{R0}}{(\rho^2 + (z + z_0)^2)} \right), \quad (1.2.2a)$$

$$\phi^{II} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_2} \frac{2\varepsilon_2}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2} \frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{e}_R}{(\rho^2 + (z - z_0)^2)}. \quad (1.2.2b)$$

Tento potenciál odpovídá situaci, kdy místo vrstvy máme dielektrický polo-prostor. Nyní jsou tedy splněné hraniční podmínky pro hranici ∂_1 . Všimneme si z předešlého postupu několika věcí:

- Při zrcadlení dipólu je jeho obraz umístěn na opačnou stranu roviny ve stejné vzdálenosti.
- V rovině, do které zrcadlíme, vytvoří dipól potenciál

$$\phi_n = \frac{2\varepsilon_n}{\varepsilon_n + \varepsilon_s} \frac{\varepsilon_s}{\varepsilon_n} \phi_s. \quad (1.2.3)$$

kde ε_n je permitivita prostředí, do kterého zrcadlíme; ε_s je permitivita prostředí, ze kterého zrcadlíme a ϕ_s je potenciál dipólu, který zrcadlíme.

- Do roviny, ze které zrcadlíme, přibude člen

$$\phi'_n = \frac{\varepsilon_n - \varepsilon_s}{\varepsilon_n + \varepsilon_s} \phi_s \frac{\rho^2 + (z - z_s)^2}{\rho^2 + (z - z_n)^2}, \quad (1.2.4)$$

kde z_s značíme polohu zrcadleného dipólu a z_n polohu odzrcadleného dipólu.

- Při dosazení $z = 0$ je výsledný potenciál spojitý přes rovinu zrcadlení.

1.3 Problém tří dielektrik

Náš potenciál (1.2.2) nyní nespĺňuje podmínky na ∂_2 . Budeme tedy opakovat výše uvedené úvahy o zrcadlení. Odzrcadlíme dipól umístěný z oblasti I (působící v oblasti II) s potenciálem (1.2.2b) podle roviny $z = -d$, pak bude dle výše uvedených úvah nový dipól umístěn na ose z v bodě $z = -(z_0 + 2d)$, a pokud označíme jeho radiální jednotkový vektor \mathbf{e}_{R1} , tak dostaneme celkový potenciál:

$$\phi^I = \frac{1}{4\pi\varepsilon_1} \left(\frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{e}_R}{(\rho^2 + (z - z_0)^2)} + \frac{\varepsilon_2 - \varepsilon_1}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2} \frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{e}_{R0}}{(\rho^2 + (z + z_0)^2)} \right), \quad (1.3.1a)$$

$$\phi^{II} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_2} \frac{2\varepsilon_2}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2} \left(\frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{e}_R}{(\rho^2 + (z - z_0)^2)} + \frac{\varepsilon_3 - \varepsilon_2}{\varepsilon_2 + \varepsilon_3} \frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{e}_{R1}}{(\rho^2 + (z + (z_0 + 2d))^2)} \right), \quad (1.3.1b)$$

$$\phi^{III} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_3} \frac{2\varepsilon_2}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2} \frac{2\varepsilon_3}{\varepsilon_3 + \varepsilon_2} \frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{e}_R}{(\rho^2 + (z - z_0)^2)}, \quad (1.3.1c)$$

Přibyl nám člen do oblasti II, musíme tedy pokračovat opětovným splněním podmínek na ∂_I . Nejdříve si ale pro zjednodušení zavedeme koeficienty:

$$\begin{aligned} r_{21} &= \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}, & t_{12} &= \frac{2\varepsilon_2}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}, \\ r_{23} &= \frac{\varepsilon_3 - \varepsilon_2}{\varepsilon_2 + \varepsilon_3}, & t_{21} &= \frac{2\varepsilon_1}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}, \\ & & t_{23} &= \frac{2\varepsilon_3}{\varepsilon_3 + \varepsilon_2}. \end{aligned} \quad (1.3.2)$$

Nový člen nyní odzrcadlíme podle roviny $z = 0$, jeho poloha na ose bude tedy $z = 2d + z_0$. Výsledné potenciály v jednotlivých oblastech můžeme zapsat jako:

$$\phi^I = \frac{1}{4\pi\varepsilon_1} \left(\frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{e}_R}{(\rho^2 + (z - z_0)^2)} - \frac{r_{21}(\mathbf{p} \cdot \mathbf{e}_{R0})}{(\rho^2 + (z + z_0)^2)} + \frac{t_{12}t_{21}r_{23}(\mathbf{p} \cdot \mathbf{e}_{R1})}{(\rho^2 + (z + (z_0 + 2d))^2)} \right), \quad (1.3.3a)$$

$$\phi^{II} = \frac{t_{12}}{4\pi\varepsilon_2} \left(\frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{e}_R}{(\rho^2 + (z - z_0)^2)} + \frac{r_{23}(\mathbf{p} \cdot \mathbf{e}_{R1})}{(\rho^2 + (z + (z_0 + 2d))^2)} + \frac{r_{21}r_{23}(\mathbf{p} \cdot \mathbf{e}_{R2})}{(\rho^2 + (z - (z_0 + 2d))^2)} \right), \quad (1.3.3b)$$

$$\phi^{III} = \frac{t_{12}t_{23}}{4\pi\varepsilon_3} \frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{e}_R}{(\rho^2 + (z - z_0)^2)}, \quad (1.3.3c)$$

kde jsme \mathbf{e}_{R2} označili jednotkový radiální vektor nového dipólu.

Nyní vedle našeho původního dipólu máme ještě další 3 dipóly, které různě působí v oblastech I, II a III (viz Obrázek 1.3).

Vidíme, že jsme ve stejné situaci jako před zrcadlením potenciálu (1.2.2), tedy že máme dipólový člen ϕ_j^d v oblasti II lokalizovaný na ose z v $z_j > 0$, který musíme zrcadlit přes ∂_2 . Předchozí postup tak chceme iterovat a postupně plnit podmínky na hranicích oblastí ∂_1 a ∂_2 . Shrňme si, co se v j -té iteraci stane:

- Dipól odzrcadlíme přes ∂_2 do polohy na ose z :

$$z'_j = -(z_j + 2d). \quad (1.3.4)$$

- Podle (1.2.3) do ϕ^{III} přibude člen

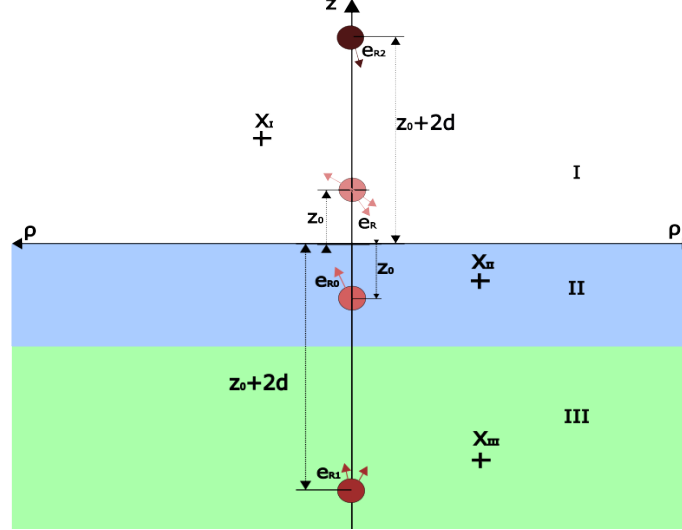
$$\phi_j^{III} = t_{23} \frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_3} \phi_j^d. \quad (1.3.5)$$

- Podle (1.2.4) do ϕ^{II} přibude člen

$$\phi_j^{II} = r_{23} \phi_j^d \frac{\rho^2 + (z - z_j)^2}{\rho^2 + (z - z'_j)^2}. \quad (1.3.6)$$

- Nově vzniklý dipólový člen ϕ_j^{II} v oblasti II odzrcadlíme přes ∂_I do polohy:

$$z''_d = -z'_d.$$



Obrázek 1.3: Rozložení dipólů na ose z vytvářející potenciál (1.3.3) s naznačeným působením jednotlivých dipólů v libovolných bodech X_I , X_{II} a X_{III} postupně v oblastech I, II a III.

- Podle (1.2.3) do ϕ^I přibude člen

$$\phi_j^I = t_{21} \frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1} \phi_j^{II} = t_{21} \frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1} r_{23} \phi_j^d \frac{\rho^2 + (z - z_j)^2}{\rho^2 + (z - z_j'')^2}. \quad (1.3.7)$$

- Podle (1.2.4) do ϕ^{II} přibude člen

$$\tilde{\phi}_j^{II} = r_{21} \phi_j^{II} \frac{\rho^2 + (z - z_j')^2}{\rho^2 + (z - z_j'')^2} = r_{21} r_{23} \phi_j^d \frac{\rho^2 + (z - z_j)^2}{\rho^2 + (z - z_j'')^2}. \quad (1.3.8)$$

- Pro další iteraci vezmeme $\phi_{j+1}^d = \tilde{\phi}_j^{II}$ a $z_{j+1} = z_j''$.

Takto dostáváme rekurzivní předpisy pro členy přispívající do jednotlivých částí celkového potenciálu. Zadáním podle (1.3.3b) že

$$\phi_1^d = \frac{1}{4\pi\varepsilon_2} t_{12} r_{21} r_{23} \frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{e}_{R1}}{(\rho^2 + (z - (z_0 + 2d))^2)},$$

vidíme, že posloupnost poloh zrcadlových dipólů můžeme napsat jako:

$$z_j = (2jd + z_0) \quad (1.3.9)$$

a ze vztahů (1.3.5) až (1.3.8) vyjádříme postupným dosazováním předchozích členů explicitní vztahy pro j -tý člen:

$$\begin{aligned} \phi_j^{III} &= \frac{1}{4\pi\varepsilon_3} r_{21}^j r_{23}^j t_{23} t_{12} \frac{p(z - z_j)}{(\rho^2 + (z - z_j)^2)^{3/2}}, \\ \phi_j^{II} &= \frac{1}{4\pi\varepsilon_2} r_{21}^j r_{23}^{j+1} t_{12} \frac{p(z + z_{j+1})}{(\rho^2 + (z + z_{j+1})^2)^{3/2}}, \\ \phi_j^I &= \frac{1}{4\pi\varepsilon_1} r_{21}^j r_{23}^{j+1} t_{21} t_{12} \frac{p(z + z_{j+1})}{(\rho^2 + (z + z_{j+1})^2)^{3/2}}, \end{aligned}$$

$$\tilde{\phi}_j^{II} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_2} r_{21}^{j+1} r_{23}^{j+1} t_{12} \frac{p(z - z_{j+1})}{(\rho^2 + (z - z_{j+1})^2)^{3/2}}.$$

Přičtením těchto výrazů k potenciálů (1.3.3) a přeindexováním dostaneme výsledný potenciál ve formě sum. Pro přehlednost si ale nejdříve označíme normu vektoru v radiálním směru od dipólu umístěného na ose z v bodě z_d :

$$N(\rho, z, z_j) = \sqrt{\rho^2 + (z - z_j)^2}.$$

Výsledný potenciál má poté tvar:

$$\phi^I = \frac{p}{4\pi\varepsilon_1} \left(\frac{z - z_0}{N^3(\rho, z, z_0)} - r_{21} \frac{z + z_0}{N^3(\rho, z, -z_0)} + t_{12} t_{21} \sum_{j=1}^{\infty} \frac{r_{21}^{j-1} r_{23}^j (z + z_j)}{N^3(\rho, z, -z_j)} \right), \quad (1.3.10a)$$

$$\phi^{II} = \frac{pt_{12}}{4\pi\varepsilon_2} \left(\sum_{j=1}^{\infty} \frac{r_{21}^{j-1} r_{23}^j (z + z_j)}{N^3(\rho, z, -z_j)} + \sum_{j=0}^{\infty} \frac{r_{21}^j r_{23}^j (z - z_j)}{N^3(\rho, z, z_j)} \right), \quad (1.3.10b)$$

$$\phi^{III} = \frac{pt_{12}t_{23}}{4\pi\varepsilon_3} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{r_{21}^j r_{23}^j (z - z_j)}{N^3(\rho, z, z_j)}. \quad (1.3.10c)$$

Pokud chceme ověřit konvergenci, tak platí, že $|r_{21}| < 1$ a $|r_{23}| < 1$, proto srovnáním s geometrickou řadou:

$$\sum_{j=0}^{\infty} r_{23}^j r_{21}^j = \frac{1}{1 - r_{23}r_{21}} < \infty \quad (1.3.11)$$

můžeme říct, že všechny sumy v (1.3.10) konvergují a potenciál pole je tedy všude mimo body z_j a $-z_j$ na ose z konečný (viz Černý a Pokorný, 2021, Věta 9.1.19).

Podle (1.1.2) můžeme nyní spočítat radiální složku intenzity pole E_ρ (horní indexy opět značí příslušnou oblast, na které intenzita pole působí):

$$E_\rho^I = \frac{3\rho p}{4\pi\varepsilon_1} \left(\frac{z - z_0}{N^5(\rho, z, z_0)} - r_{21} \frac{z + z_0}{N^5(\rho, z, -z_0)} + t_{12} t_{21} \sum_{j=1}^{\infty} \frac{r_{21}^{j-1} r_{23}^j (z + z_j)}{N^5(\rho, z, -z_j)} \right), \quad (1.3.12a)$$

$$E_\rho^{II} = \frac{3\rho p t_{12}}{4\pi\varepsilon_2} \left(\sum_{j=1}^{\infty} \frac{r_{21}^{j-1} r_{23}^j (z + z_j)}{N^5(\rho, z, -z_j)} + \sum_{j=0}^{\infty} \frac{r_{21}^j r_{23}^j (z - z_j)}{N^5(\rho, z, z_j)} \right), \quad (1.3.12b)$$

$$E_\rho^{III} = \frac{3\rho p t_{12} t_{23}}{4\pi\varepsilon_3} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{r_{21}^j r_{23}^j (z - z_j)}{N^5(\rho, z, z_j)} \quad (1.3.12c)$$

a také složku elektrické intenzity ve směru osy z :

$$E_z^I = \frac{p}{4\pi\varepsilon_1} \left(\frac{3(z - z_0)^2 - N^2(\rho, z, z_0)}{N^5(\rho, z, z_0)} - r_{21} \frac{3(z + z_0)^2 - N^2(\rho, z, -z_0)}{N^5(\rho, z, -z_0)} + t_{12} t_{21} \sum_{j=1}^{\infty} \frac{r_{21}^{j-1} r_{23}^j (3(z + z_j)^2 - N^2(\rho, z, -z_j))}{N^5(\rho, z, -z_j)} \right), \quad (1.3.13a)$$

$$E_z^{II} = \frac{pt_{12}}{4\pi\varepsilon_2} \left(\sum_{j=1}^{\infty} \frac{r_{21}^{j-1} r_{23}^j (3(z+z_j)^2 - N^2(\rho, z, -z_j))}{N^5(\rho, z, -z_j)} + \sum_{j=0}^{\infty} \frac{r_{21}^j r_{23}^j (3(z-z_j)^2 - N^2(\rho, z, z_j))}{N^5(\rho, z, z_j)} \right), \quad (1.3.13b)$$

$$E_z^{III} = \frac{pt_{12}t_{23}}{4\pi\varepsilon_3} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{r_{21}^j r_{23}^j (3(z-z_j)^2 - N^2(\rho, z, z_j))}{N^5(\rho, z, z_j)}. \quad (1.3.13c)$$

1.4 Limitní chování potenciálu

Chtěli bychom dále ověřit, že jsme potenciál (1.3.10) určili správně. Jeho spojitost dostaneme jednoduše dosazením $z = 0$ a $z = -d$. Stejně tak můžeme ukázat, že složky intenzity (1.3.13) a (1.3.12) plní podmínky (1.1.3). Potenciál by ale navíc v některých krajních situacích měl nabývat známého tvaru. Podíváme se tedy na některé tyto případy.

Můžeme zkoumat chování (1.3.10) v limitě tlusté vrstvy (tedy pro $d \rightarrow \infty$). Zde obsahují jmenovatele sum větší mocniny d než čitatele a limitně jdou tedy všechny výrazy obsahující z_j pro $j > 0$ k nule a my dostáváme potenciál (oblast III nemá smysl uvažovat):

$$\begin{aligned} \phi_{\infty}^I &= \frac{p}{4\pi\varepsilon_1} \left(\frac{z - z_0}{N^3(\rho, z, z_0)} - r_{21} \frac{z + z_0}{N^3(\rho, z, -z_0)} \right), \\ \phi_{\infty}^{II} &= \frac{pt_{12}}{4\pi\varepsilon_2} \frac{z - z_0}{N^3(\rho, z, z_0)}, \end{aligned}$$

který si odpovídá s potenciálem dipólu u poloprostoru s permitivitou ε_2 (1.2.2). Zajímavější pro nás bude případ, kdy vrstvu odstraníme (tedy $d \rightarrow 0$). Zkoumejme nyní limitu potenciálu (1.3.10a):

$$\begin{aligned} \lim_{d \rightarrow 0} \phi^I &= \frac{p}{4\pi\varepsilon_1} \left(\frac{z - z_0}{N^3(\rho, z, z_0)} - r_{21} \frac{z + z_0}{N^3(\rho, z, -z_0)} + t_{12}t_{21}r_{23} \frac{z + z_0}{N^3(\rho, z, -z_0)} \sum_{j=0}^{\infty} r_{21}^j r_{23}^j \right) \\ &= \frac{p}{4\pi\varepsilon_1} \left(\frac{z - z_0}{N^3(\rho, z, z_0)} - r_{21} \frac{z + z_0}{N^3(\rho, z, -z_0)} + t_{12}t_{21}r_{23} \frac{z + z_0}{N^3(\rho, z, -z_0)} \frac{1}{1 - r_{21}r_{23}} \right) \\ &= \frac{p}{4\pi\varepsilon_1} \left(\frac{z - z_0}{N^3(\rho, z, z_0)} - \frac{z + z_0}{N^3(\rho, z, -z_0)} \left(r_{21} - t_{12}t_{21}r_{23} \frac{1}{1 - r_{21}r_{23}} \right) \right), \end{aligned}$$

kde jsme v první rovnosti využili vztah (1.3.9) po dosazení $d = 0$, ve druhé rovnosti jsme použili vztah (1.3.11).

Nyní potřebujeme určit výraz ve vnitřní závorce. Dosadíme tedy z (1.3.2):

$$r_{21} - t_{12}t_{21}r_{23} \frac{1}{1 - r_{21}r_{23}} = \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2} - \frac{4\varepsilon_1\varepsilon_2}{(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)^2} \frac{\varepsilon_3 - \varepsilon_2}{\varepsilon_3 + \varepsilon_2} \frac{1}{1 - \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2} \frac{\varepsilon_3 - \varepsilon_2}{\varepsilon_3 + \varepsilon_2}}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2} - \frac{4\varepsilon_1\varepsilon_2}{(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)^2} \frac{\varepsilon_3 - \varepsilon_2}{\varepsilon_3 + \varepsilon_2} \frac{(\varepsilon_3 + \varepsilon_2)(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)}{2\varepsilon_2(\varepsilon_1 + \varepsilon_3)} \\
&= \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2} - \frac{2\varepsilon_1(\varepsilon_3 - \varepsilon_2)}{(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)(\varepsilon_1 + \varepsilon_3)} \\
&= \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_3}{\varepsilon_1 + \varepsilon_3} = r_{31}
\end{aligned}$$

čímž získáváme výsledek:

$$\lim_{d \rightarrow 0} \phi^I = \frac{p}{4\pi\varepsilon_1} \left(\frac{z - z_0}{N^3(\rho, z, z_0)} - r_{31} \frac{z + z_0}{N^3(\rho, z, -z_0)} \right).$$

Dále se podíváme na chování (1.3.10b). Zde má význam uvažovat pouze $z = 0$, protože se vrstva redukuje pouze na plochu:

$$\begin{aligned}
\lim_{d \rightarrow 0} \phi^{II} &= \frac{pt_{12}}{4\pi\varepsilon_2} \left(-\frac{z_0}{N^3(\rho, z, z_0)} + \sum_{j=1}^{\infty} \frac{r_{21}^{j-1} r_{23}^j z_0}{N^3(\rho, z, z_0)} - \sum_{j=1}^{\infty} \frac{r_{21}^j r_{23}^j z_0}{N^3(\rho, z, z_0)} \right) \\
&= \frac{pt_{12}}{4\pi\varepsilon_2} \left(-\frac{z_0}{N^3(\rho, z, z_0)} + \frac{z_0}{N^3(\rho, z, z_0)} \left(r_{23} \sum_{j=0}^{\infty} r_{21}^j r_{23}^j - \sum_{j=1}^{\infty} r_{21}^j r_{23}^j \right) \right) \\
&= \frac{p}{4\pi\varepsilon_2} \frac{z_0}{N^3(\rho, z, z_0)} \left(-t_{12} + t_{12} \frac{r_{23} - r_{23}r_{21}}{1 - r_{12}r_{23}} \right).
\end{aligned}$$

Nyní opět vyjádříme výraz v závorce:

$$\begin{aligned}
-t_{12} + t_{12} \frac{r_{23} - r_{23}r_{21}}{1 - r_{12}r_{23}} &= -\frac{2\varepsilon_2}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2} + \frac{2\varepsilon_2}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2} \frac{\varepsilon_3 - \varepsilon_2}{\varepsilon_3 + \varepsilon_2} \frac{1 - \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}}{1 - \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2} \frac{\varepsilon_3 - \varepsilon_2}{\varepsilon_3 + \varepsilon_2}} \\
&= \frac{2\varepsilon_2}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2} \left(-1 + \frac{\varepsilon_3 - \varepsilon_2}{\varepsilon_3 + \varepsilon_2} \frac{2\varepsilon_2(\varepsilon_2 + \varepsilon_3)}{2\varepsilon_2(\varepsilon_1 + \varepsilon_3)} \right) \\
&= \frac{-2\varepsilon_2}{\varepsilon_1 + \varepsilon_3}.
\end{aligned}$$

Získáváme tak:

$$\lim_{d \rightarrow 0} \phi^{II} = \frac{-p}{2\pi(\varepsilon_1 + \varepsilon_3)} \frac{z_0}{N^3(\rho, z, z_0)}.$$

Nakonec nás zajímá limita (1.3.10c):

$$\begin{aligned}
\lim_{d \rightarrow 0} \phi^{III} &= \frac{pt_{12}t_{23}}{4\pi\varepsilon_3} \frac{(z - z_0)}{N^3(\rho, z, z_0)} \sum_{j=0}^{\infty} r_{21}^j r_{23}^j \\
&= \frac{p}{4\pi\varepsilon_3} \frac{(z - z_0)}{N^3(\rho, z, z_0)} \frac{t_{12}t_{23}}{1 - r_{23}r_{21}} \\
&= \frac{p}{4\pi\varepsilon_3} \frac{(z - z_0)}{N^3(\rho, z, z_0)} \frac{4\varepsilon_2\varepsilon_3}{(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)(\varepsilon_2 + \varepsilon_3)} \frac{(\varepsilon_3 + \varepsilon_2)(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)}{2\varepsilon_2(\varepsilon_1 + \varepsilon_3)} \\
&= \frac{p}{4\pi\varepsilon_3} \frac{(z - z_0)}{N^3(\rho, z, z_0)} \frac{2\varepsilon_3}{\varepsilon_1 + \varepsilon_3} \\
&= \frac{pt_{13}}{4\pi\varepsilon_3} \frac{(z - z_0)}{N^3(\rho, z, z_0)},
\end{aligned}$$

kde jsme použili značení

$$t_{13} = \frac{2\varepsilon_3}{\varepsilon_1 + \varepsilon_3}.$$

Získáváme tak limitní tvar 1.3.10:

$$\begin{aligned}\phi^I &= \frac{p}{4\pi\varepsilon_1} \left(\frac{z - z_0}{N^3(\rho, z, z_0)} - r_{31} \frac{z + z_0}{N^3(\rho, z, -z_0)} \right), \\ \phi^{II} &= \frac{-p}{2\pi(\varepsilon_1 + \varepsilon_3)} \frac{z_0}{N^3(\rho, z, z_0)}, \\ \phi^{III} &= \frac{pt_{13}}{4\pi\varepsilon_3} \frac{(z - z_0)}{N^3(\rho, z, z_0)},\end{aligned}$$

kde oblast I odpovídá $z > 0$, oblast II $z = 0$ a oblast III $z < 0$. Potenciál si opět odpovídá s výrazem (1.2.2) pro dielektrický poloprostor, ale tentokrát s permitivitou ε_3 . Dosazením $z = 0$ do všech částí snadno věříme, že je odvozený limitní výraz spojitý.

1.5 Vizualizace výsledků

Nyní známe explicitní vzorce pro elektrickou intenzitu a potenciál dipólu u dielektrické vrstvy na substrátu a provedli jsme jejich ověření. Můžeme si tedy vizualizovat jejich průběh a srovnat je s výsledkem pro dielektrický poloprostor.

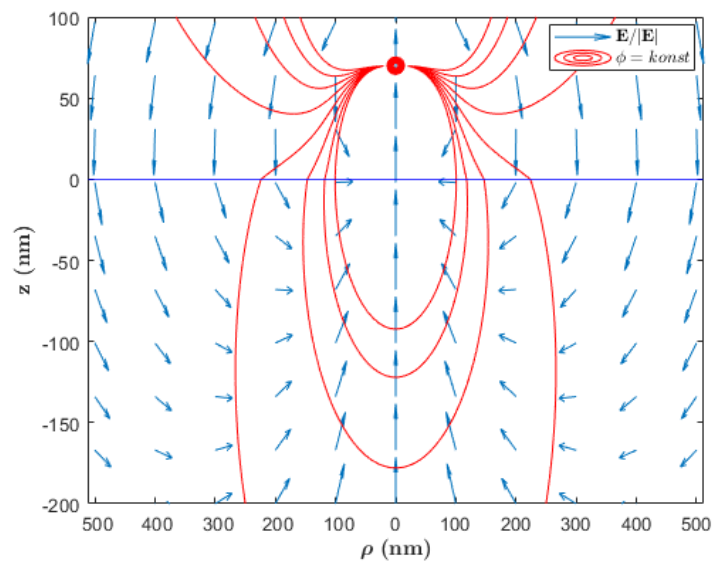
Budeme volit parametry podobné jako v experimentu na vrstvě SiO_2 nanesené na Si substrátu, který provedl Zhang a kol. (2011). Tloušťku vrstvy nastavíme na $d = 85$ nm, hrot umístíme do výšky $b = 40$ nm nad vrstvu a bude mít poloměr $a = 30$ nm (samotný dipól bude tedy ve výšce $z_0 = 70$ nm).

Hrot se nachází ve vzduchu o relativní permitivitě $\varepsilon_r^I \approx 1$, vrstva SiO_2 má pro záření o frekvencích kolem $\omega_l = 1000 \text{ cm}^{-1}$ relativní permitivitu $\varepsilon_r^{II} \approx 5$ a leží na substrátu o $\varepsilon_r^{III} \approx 11,7$. Pro jednoduchost neuvažujeme interakci hrotu se vzorkem a zvolíme konstantní permitivitu hrotu $\varepsilon_r^k = 4$. E_0 nám zde působí pouze jako multiplikativní konstanta, proto zvolíme $E_0 = 1 \text{ V/m}$.

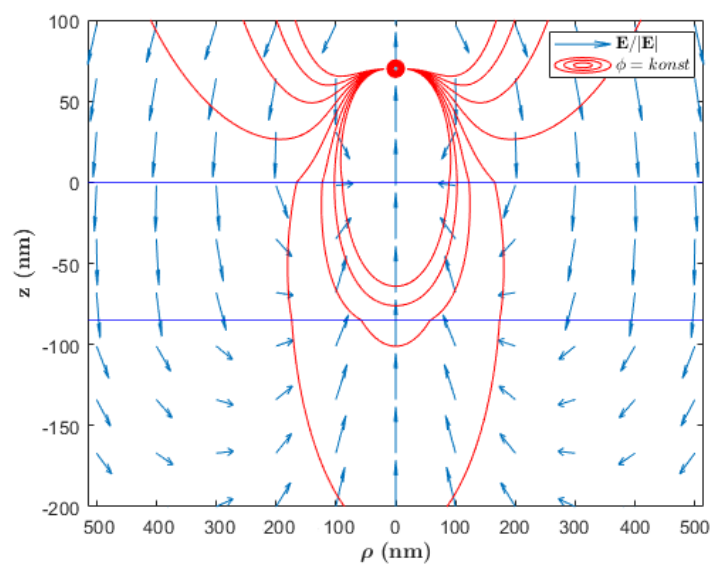
Na Obrázcích 1.4 a 1.5 jsou zobrazeny pole jednotkových vektorů \mathbf{E} s vyznačenými plochami konstantního potenciálu dipólu u poloprostoru a u vrstvy. Můžeme si zde všimnout, že ve směru proti ose z od dipólu se obě pole liší tvarem ekvipotenciál a že se u vrstvy mění směr vektorového pole pomaleji. V prostoru nad vrstvou mají pak obě pole podobný charakter.

Na Obrázcích 1.6 až 1.8 vidíme průběh ϕ , $\varepsilon_i^r E_z$ a E_ρ (ε_i^r značíme relativní permitivitu příslušného prostředí, kde působí elektrické pole) v řezu $\rho = 350$ nm (nemůžeme volit řez rovinou $\rho = 0$ nm, neboť by zde byla složka E_ρ nulová, což by nám o jejím průběhu nic neřeklo). Na těchto křivkách si krom odlišností průběhu v obou geometriích (hlavně uvnitř vrstvy) všimneme, že jsou všechny spojitě, jak to požadují vazebné podmínky.

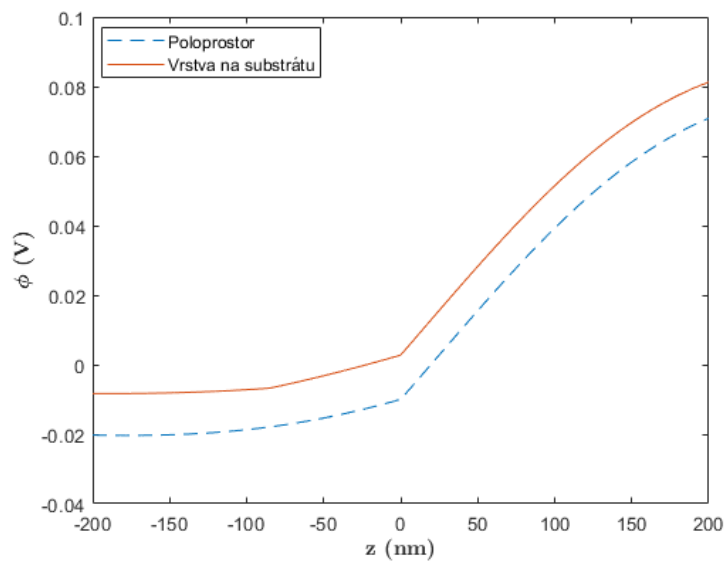
Nakonec ve stejném řezu ukazujeme na Obrázku 1.9 velikosti vektoru elektrické intenzity $|\mathbf{E}|$. Zde si můžeme všimnout, že v okolí maxima intenzity nad vrstvou (okolo bodu $z = 125$ nm) je pole vrstvy silnější než pole poloprostoru, což bude vyvolané povrchovým nábojem na ∂_2 . $|\mathbf{E}|$ je měřitelná veličina, při měření na vrstvě bychom tedy měli dostat silnější signál.



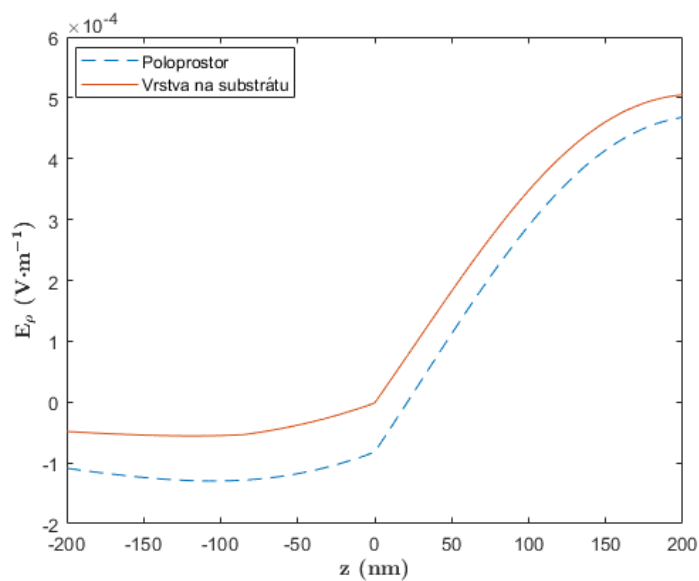
Obrázek 1.4: Pole jednotkových vektorů intenzity elektrického pole dipólu u dielektrického poloprostoru s vyznačenými ekvipotenciálními plochami.



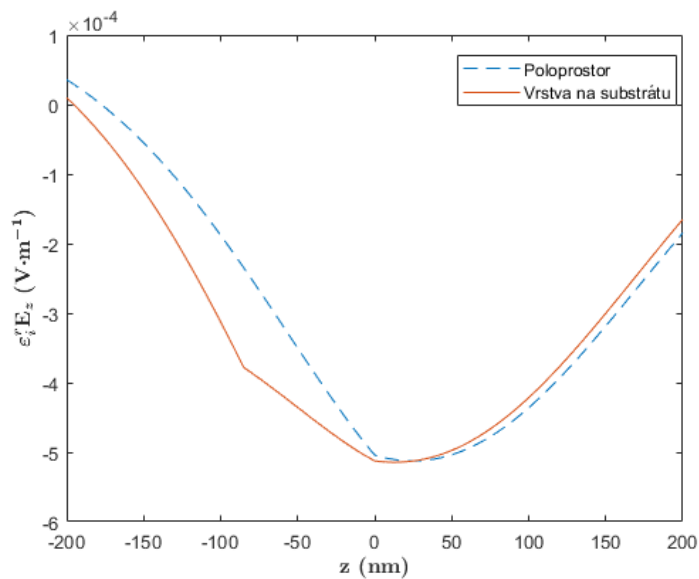
Obrázek 1.5: Pole jednotkových vektorů intenzity elektrického pole dipólu u dielektrické vrstvy tloušťky d umístěné na substrátu s vyznačenými ekvipotenciálními plochami.



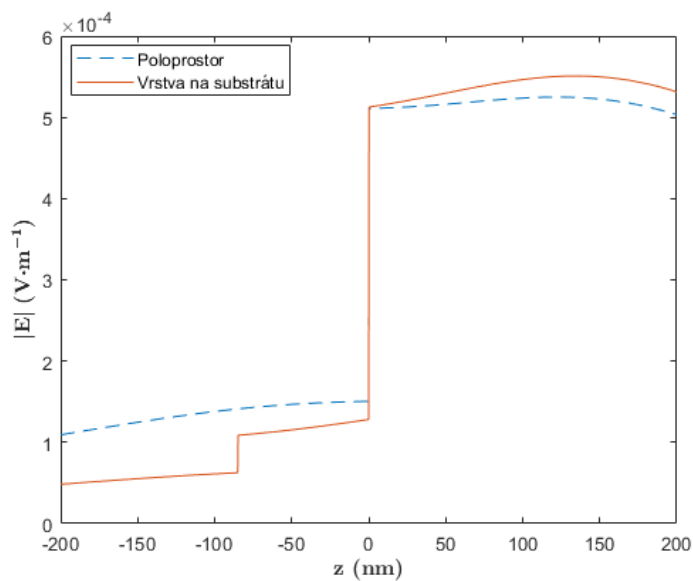
Obrázek 1.6: Průběh potenciálu elektrického pole ve vzdálenosti 350 nm od osy z pro dipól u dielektrického poloprostoru a vrstvy na substrátu.



Obrázek 1.7: Průběh radiální komponenty intenzity elektrického pole ve vzdálenosti 350 nm od osy z pro dipól u poloprostoru a vrstvy na substrátu.



Obrázek 1.8: Průběh z-tové komponenty intenzity elektrického pole vynásobené relativní permitivitou příslušného prostředí ve vzdálenosti 350 nm od osy z pro dipól u dielektrického poloprostoru a vrstvy na substrátu.



Obrázek 1.9: Průběh velikosti vektoru intenzity elektrického pole ve vzdálenosti 350 nm od osy z pro dipól u dielektrického poloprostoru a vrstvy na substrátu.

2. Nelokální odezva

Dosud jsme uvažovali jen to, že dipól u dielektrické vrstvy vytváří povrchové náboje, které jsme reprezentovali ve formě zrcadlených dipólů. V klasickém přiblížení je tato úvaha v pořádku, nicméně pokud vezmeme v úvahu kvantovou teorii, dipól začne uvnitř dielektrika generovat navíc objemové náboje, které poté ovlivňují náboje povrchové, což vede ke změně rozložení náboje ve vrstvě, atd. Při hledání rozložení elektrického pole v prostoru nám tak vzniká self-konzistentní problém, kdy je hledané pole na sobě závislé (nelokální odezva). My k jeho nalezení použijeme úvahu podobnou iterativnímu řešení Harteeho rovnic (viz např. Daniš, 2019, s. 76). Nejdříve ale potřebujeme jeden přípravný výsledek.

2.1 Potenciál kružnice v dielektrické vrstvě

Začneme řešením rozložení potenciálu kružnice umístěné uvnitř dielektrické vrstvy, což se nám bude hodit později, až budeme chtít znát potenciál, který vyvolává objemový náboj ve vrstvě, který musí být ze symetrie problému na kružnici se středem na ose dipólu konstantní. Podrobnější vysvětlení bude poskytnuto v další kapitole.

Náš problém můžeme formulovat podobně jako problém dipólu u dielektrické vrstvy. Mějme kružnici o poloměru R s lineární nábojovou hustotou λ umístěnou na ose z v bodě $-z_0$ (souřadný systém umísťujeme stejně jako v minulém problému, také znovu používáme válcové souřadnice) pod povrchem dielektrické vrstvy o tloušťce d a permitivitě ε_2 . Vrstva leží na substrátu o permitivitě ε_3 a nad vrstvou je prostředí o permitivitě ε_1 . Označme opět prostředí I, vrstvu II a substrát III, hranici mezi I a II jako ∂_1 a hranici mezi II a III jako ∂_2 (schéma situace viz Obrázek 2.1).

2.1.1 Kružnice ve vakuu

Potenciál kružnice s výše uvedenými parametry v bodě (z, ρ) ve vakuu označíme $v^0(z, \rho, -z_0, R, \lambda)$ a můžeme ho vyjádřit jako (viz Ciftja a kol., 2009):

$$v^0(z, \rho, -z_0, R, \lambda) = \frac{4\lambda R}{4\pi\varepsilon_0} \frac{K\left(\frac{4\rho R}{(\rho+R)^2+(z+z_0)^2}\right)}{\sqrt{(\rho+R)^2+(z+z_0)^2}}, \quad (2.1.1)$$

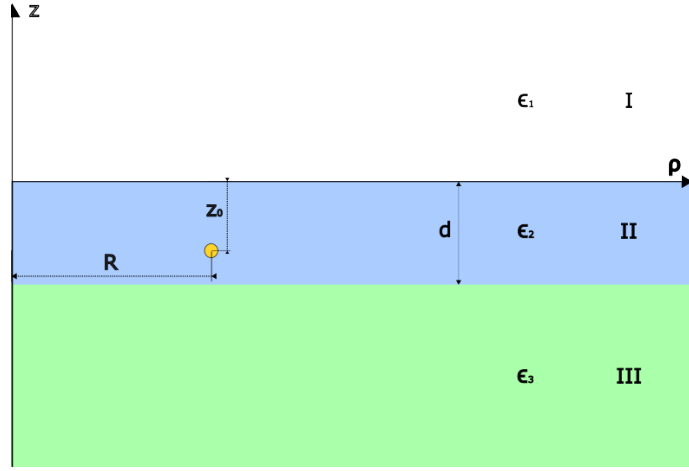
kde ε_0 je permitivita vakua a funkce $K(m)$ značí úplný eliptický integrál prvního druhu definovaný (viz např. Beebe, 2017, s. 624):

$$K(m) = \int_0^{\pi/2} \frac{1}{\sqrt{1-m^2\sin^2(\theta)}} d\theta, \quad (2.1.2)$$

pro $0 \leq m < 1$ s vlastností $K(0) = \pi/2$ a $\lim_{m \rightarrow 1} K(m) = \infty$.

Pro derivování budeme potřebovat ještě úplný eliptický integrál druhého druhu (viz např. Beebe, 2017, s. 627):

$$E(m) = \int_0^{\pi/2} \sqrt{1-m^2\sin^2(\theta)} d\theta.$$



Obrázek 2.1: Schématický náčrt nabité kružnice v dielektrické vrstvě ve válcových souřadnicích.

2.1.2 Kružnice v dielektriku

Úlohu budeme opět řešit zrcadlením přes hranice ∂_1 a ∂_2 . Z předchozích výpočtů již víme, jak vypadají obrazy dipólů při zrcadlení do dielektrik. My budeme předpokládat, že nabitá kružnice se chová stejně (využijeme tedy koeficienty (1.3.2)) a správnost výpočtů ověříme dosazením do podmínek (1.1.3). Jedinou změnou bude použití koeficientů:

$$\begin{aligned} r_{32} &= -r_{23}, \\ r_{12} &= -r_{21}, \end{aligned} \quad (2.1.3)$$

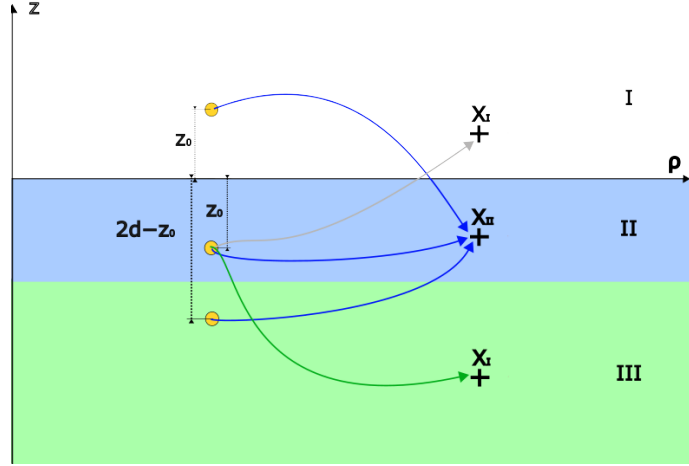
protože zdroj elektrického pole se tentokrát nachází uvnitř vrstvy, takže bude vyvolávat opačný povrchový náboj, než kdyby se nacházela v prostředí nad povrchem. Koeficienty t ponecháme stejné, neboť nerozhodují o polaritě povrchového náboje.

Pro větší přehlednost si ještě v dalších výpočtech zavedeme pomocnou funkci:

$$K_e(z, \rho, z_0, R) = \frac{K\left(\frac{4\rho R}{(\rho+R)^2+(z-z_0)^2}\right)}{\sqrt{(\rho+R)^2+(z-z_0)^2}}. \quad (2.1.4)$$

Nejdříve kružnici odzrcadlíme přes obě hranice tak, že umístíme kružnice se stejným poloměrem do bodů $z_{11} = z_0$ a $-z_{21} = -(2d - z_0)$ (viz. Obrázek 2.2). Změnu lineární hustoty náboje vyjádříme přenásobením příslušnými koeficienty (1.3.2) a (2.1.4). Z minulé kapitoly ještě víme, že nová kružnice působí pouze v oblasti, ze které zrcadlíme, původní kružnice pak i v té, do které zrcadlíme. Celkový potenciál $V(z, \rho, -z_0, R, \lambda)$ má po prvním zrcadlení tvar (horní indexy opět značí příslušnou oblast působení):

$$\begin{aligned} V^I &= \frac{t_{21}\lambda R}{\pi\epsilon_1} K_e(z, \rho, -z_0, R), \\ V^{II} &= \frac{\lambda R}{\pi\epsilon_2} (K_e(z, \rho, -z_0, R) + r_{12}K_e(z, \rho, z_0, R) \\ &\quad + r_{32}K_e(z, \rho, -(2d - z_0), R)), \end{aligned}$$



Obrázek 2.2: Schématický náčrt kružnic po prvním zrcadlení s naznačeným působením v libovolných bodech X_I , X_{II} a X_{III} postupně v oblastech I, II a III.

$$V^{III} = \frac{t_{23}\lambda R}{\pi\varepsilon_3} K_e(z, \rho, -z_0, R).$$

Nyní jsme v situaci, kdy kružnice v oblasti I v bodě z_{11} zajistila splnění hraničních podmínek na ∂_1 , ale porušuje tyto podmínky na ∂_2 , proto ji musíme odzrcadlit podle ∂_2 do bodu $-z_{12} = -(2d + z_0)$. Ze stejných důvodů musíme odzrcadlit kružnici z z_{21} přes ∂_1 do bodu $z_{21} = 2d - z_0$. Výsledný potenciál bude mít po druhém kole zrcadlení tvar:

$$\begin{aligned} V^I &= \frac{t_{21}\lambda R}{\pi\varepsilon_1} (K_e(z, \rho, -z_0, R) + r_{32}K_e(z, \rho, -(2d - z_0), R)), \\ V^{II} &= \frac{\lambda R}{\pi\varepsilon_2} (K_e(z, \rho, -z_0, R) + r_{12}K_e(z, \rho, z_0, R) + r_{32}K_e(z, \rho, -(2d - z_0), R) \\ &\quad + r_{12}r_{32}K_e(z, \rho, -(2d + z_0), R) + r_{32}r_{12}K_e(z, \rho, 2d - z_0, R)), \\ V^{III} &= \frac{t_{23}\lambda R}{\pi\varepsilon_3} (K_e(z, \rho, -z_0, R) + r_{12}K_e(z, \rho, z_0, R)). \end{aligned}$$

Čímž jsme se dostali do stejné situace jako po konci prvního kola zrcadlení, tedy že máme dvě nové kružnice (jedna v I a druhá v III), kde obě působí v II a každá z nich plní podmínky na jedné hranici, ale na druhé je porušuje. Předchozí postup můžeme proto iterovat. V každém kole vzniknou 2 kružnice, které budou umístěny v bodech:

$$z_{1j} = 2(j-1)d + z_0, \quad -z_{2j} = -(2jd - z_0); \quad \text{pro } j \in \{1, 2, \dots\} \quad (2.1.5)$$

nebo:

$$z_{2j} = 2jd - z_0; \quad -z_{1j} = -(2(j-1)d + z_0), \quad \text{pro } j \in \{1, 2, \dots\}, \quad (2.1.6)$$

kde kružnice umístěné v oblasti III přispívají do V^{II} a V^I , kružnice z I potom do V^{II} a V^{III} .

Ještě si z potenciálu po předchozím zrcadlení všimneme, že nám budou v oblasti I, resp. III, dvě řady funkcí K_e , kde jedna bude přenásobena koeficienty r_{32} a r_{12} se stejnými exponenty a u druhé bude exponent r_{32} , resp. r_{12} , o jedna větší.

Oblast II pak tvoří součet řad z obou oblastí. Když toto nyní víme, můžeme zapsat celkový potenciál:

$$V^I = \frac{t_{21}\lambda R}{\pi\varepsilon_1} \left(\sum_{j=0}^{\infty} r_{12}^j r_{32}^j K_e(z, \rho, -(2jd + z_0), R) + \sum_{j=1}^{\infty} r_{32}^j r_{12}^{j-1} K_e(z, \rho, -(2jd - z_0), R) \right), \quad (2.1.7a)$$

$$V^{II} = \frac{\lambda R}{\pi\varepsilon_2} \left(\sum_{j=1}^{\infty} r_{12}^j r_{32}^j K_e(z, \rho, -(2jd + z_0), R) + \sum_{j=1}^{\infty} r_{32}^j r_{12}^{j-1} K_e(z, \rho, -(2jd - z_0), R) \right. \quad (2.1.7b)$$

$$\left. + \sum_{j=0}^{\infty} r_{12}^j r_{32}^j K_e(z, \rho, 2jd - z_0, R) + \sum_{j=0}^{\infty} r_{32}^j r_{12}^{j+1} K_e(z, \rho, 2jd + z_0, R) \right),$$

$$V^{III} = \frac{t_{23}\lambda R}{\pi\varepsilon_3} \left(\sum_{j=0}^{\infty} r_{12}^j r_{32}^j K_e(z, \rho, 2jd - z_0, R) + \sum_{j=0}^{\infty} r_{32}^j r_{12}^{j+1} K_e(z, \rho, 2jd + z_0, R) \right). \quad (2.1.7c)$$

Tento potenciál představuje celkový potenciál $V(z, \rho, -z_0, R, \lambda)$ nabité kružnice uvnitř dielektrické vrstvy v celém prostoru.

2.1.3 Ověření vazebných podmínek a konvergence

Nyní musíme ověřit správnou volbu potenciálu. Musíme tedy otestovat, zda platí podmínky (1.1.3) a zda je potenciál spojitý. Budeme potřebovat parciální derivace (2.1.4) podle souřadnic, které spočítáme s použitím programu Mathematica:

$$\frac{\partial K_e}{\partial z}(z, \rho, z_0, R) = \frac{-(z - z_0) E\left(\frac{4R\rho}{(R+\rho)^2 + (z-z_0)^2}\right)}{((R - \rho)^2 + (z - z_0)^2) \sqrt{(R + \rho)^2 + (z - z_0)^2}}, \quad (2.1.8)$$

$$\frac{\partial K_e}{\partial \rho}(z, \rho, z_0, R) = \frac{(R^2 - \rho^2 + (z - z_0)^2) E\left(\frac{4R\rho}{(R+\rho)^2 + (z-z_0)^2}\right)}{2\rho((R - \rho)^2 + (z - z_0)^2) \sqrt{(R + \rho)^2 + (z - z_0)^2}} - \frac{K\left(\frac{4R\rho}{(R+\rho)^2 + (z-z_0)^2}\right)}{2\rho \sqrt{(R + \rho)^2 + (z - z_0)^2}}. \quad (2.1.9)$$

U funkcí (2.1.9) a (2.1.4) si všimneme, že po dosazení $z = 0$ jsou sudé ve třetím argumentu a funkce (2.1.8) je v tomto případě ve třetím argumentu lichá, což se nám bude hodit v dalších výpočtech.

Při ověřování podmínek na ∂_2 budeme dosazovat do (2.1.4), (2.1.8) a (2.1.9) $z = -d$. Ve všech těchto funkcích se první a třetí argument vyskytují pouze v rozdílu. Dosazením z_{1i} z (2.1.5) a $-z_{1i}$ z (2.1.6) do (2.1.4) dostaneme identitu:

$$K_e(-d, \rho, 2(j-1)d + z_0, R) = K_e(0, \rho, (2j-1)d + z_0, R), \quad (2.1.10)$$

$$K_e(-d, \rho, -(2(j-1)d + z_0), R) = K_e(0, \rho, (2j-3)d + z_0, R), \quad (2.1.11)$$

podobně pro parciální derivace (2.1.8) a (2.1.9) a posloupnosti z_{2j} a $-z_{2j}$.

Začneme ověřováním spojitosti. Argumenty ρ a R nyní nehrají roli, proto je budeme pro teď ignorovat. Dosazením $z = -d$ do V^{II} (označme V_{-d}^{II}) dostaneme:

$$\begin{aligned} V_{-d}^{II} &= \frac{\lambda R}{\pi \varepsilon_2} \left(\sum_{j=1}^{\infty} r_{12}^j r_{32}^j K_e(0, (2j-1)d + z_0) + \sum_{j=1}^{\infty} r_{32}^j r_{12}^{j-1} K_e(0, (2j-1)d - z_0) \right. \\ &\quad \left. + \sum_{j=0}^{\infty} r_{12}^j r_{32}^j K_e(0, (2j+1)d - z_0) + \sum_{j=0}^{\infty} r_{32}^j r_{12}^{j+1} K_e(0, (2j+1)d + z_0) \right) \\ &= \frac{\lambda R}{\pi \varepsilon_2} \left((1 + r_{32}) \sum_{j=0}^{\infty} r_{12}^{j+1} r_{32}^j K_e(0, (2j+1)d + z_0) \right. \\ &\quad \left. + (1 + r_{32}) \sum_{j=0}^{\infty} r_{32}^j r_{12}^j K_e(0, (2j+1)d - z_0) \right) \\ &= \frac{2\lambda R}{\pi(\varepsilon_2 + \varepsilon_3)} \left(\sum_{j=0}^{\infty} r_{12}^{j+1} r_{32}^j K_e(0, (2j+1)d + z_0) \right. \\ &\quad \left. + \sum_{j=0}^{\infty} r_{32}^j r_{12}^j K_e(0, (2j+1)d - z_0) \right), \end{aligned}$$

kde jsme v první rovnosti využili vztahů (2.1.10) a (2.1.11) a výše vysvětlené sudosti funkce K_e . V poslední rovnosti jsme pak využili rozpisu koeficientů (1.3.2) a (2.1.3).

Dosazením do V^{III} (označme V_{-d}^{III}) podobnými úpravami dostaneme:

$$\begin{aligned} V_{-d}^{III} &= \frac{2\lambda R}{\pi(\varepsilon_2 + \varepsilon_3)} \left(\sum_{j=0}^{\infty} r_{12}^j r_{32}^j K_e(0, (2j+1)d - z_0) \right. \\ &\quad \left. + \sum_{j=0}^{\infty} r_{32}^j r_{12}^{j+1} K_e(0, (2j+1)d + z_0) \right). \end{aligned}$$

Z čehož vidíme, že $V_{-d}^{II} = V_{-d}^{III}$, a proto potenciál je spojitý na ∂_2 .

Ze tvaru podmínky (1.1.3b) a toho, že (2.1.9) je při $z = 0$ ve třetím argumentu také sudá, je zřejmé, že výpočet by vypadal podobně, pouze bychom v potenciálech (2.1.7b) a (2.1.7c) vyměnili K_e za příslušnou derivaci. Tečná složka elektrické intenzity je tedy při průchodu přes ∂_2 spojitá.

Zbývá nám ověřit (1.1.3d), dosadíme tedy do (2.1.8) $z = -d$ ve druhé oblasti (označme $\frac{\partial V_{-d}^{II}}{\partial z}$). Jediný rozdíl oproti předchozímu výpočtu je ten, že po využití

(2.1.10) a (2.1.11) je funkce ve třetím argumentu lichá, čímž dostáváme:

$$\begin{aligned} \frac{\partial V_{-d}^{II}}{\partial z} &= \frac{\lambda R}{\pi \varepsilon_2} \left((1 - r_{32}) \sum_{j=0}^{\infty} r_{12}^{j+1} r_{32}^j K_e(0, (2j+1)d + z_0) \right. \\ &\quad \left. + (1 - r_{32}) \sum_{j=0}^{\infty} r_{32}^j r_{12}^j K_e(0, (2j+1)d - z_0) \right) \\ &= \frac{2\lambda R \varepsilon_3}{\pi \varepsilon_2 (\varepsilon_2 + \varepsilon_3)} \left(\sum_{j=0}^{\infty} r_{12}^{j+1} r_{32}^j K_e(0, (2j+1)d + z_0) \right. \\ &\quad \left. + \sum_{j=0}^{\infty} r_{32}^j r_{12}^j K_e(0, (2j+1)d - z_0) \right). \end{aligned}$$

Při dosazení do (2.1.8) ve třetí oblasti (označme $\frac{\partial V_{-d}^{II}}{\partial z}$) lichost nevyužijeme a výpočet je stejný jako u dosazení do původní funkce, tedy:

$$\frac{\partial V_{-d}^{II}}{\partial z} = V_{-d}^{III}.$$

Z těchto výpočtů po vynásobení příslušnými permitivitami dostáváme splnění poslední podmínky:

$$\varepsilon_2 \frac{\partial V_{-d}^{II}}{\partial z} = \varepsilon_3 \frac{\partial V_{-d}^{III}}{\partial z}.$$

Ověření na ∂_1 bychom provedli výpočtem pro $z = 0$ v (2.1.7a) a (2.1.7b), čímž by nám podobně jako výše vyšla spojitost a splnění podmínek (1.1.3a) a (1.1.3c).

Nakonec se ještě můžeme ptát, zda sumy v (2.1.7) konvergují mimo singulární body $z = \pm z_{1j}$ a $z = \pm z_{2j}$. Funkce K_e klesá v sumách monotónně k nule (proto je omezená) a součin $r_{32}^j r_{12}^j$ tvoří konvergentní geometrickou řadu, proto podle Abelova kritéria řady ve výrazu pro potenciál kružnice v dielektrické vrstvě konvergují (viz Černý a Pokorný, 2021, s. 85).

2.2 Iterativní řešení

Nyní můžeme přistoupit k vyšetření pole vyvolaného nelokální odezvou vrstvy. Na konci kapitoly 1.3 jsme dostali výraz pro potenciál pole dipólu u vrstvy ϕ v lokální odezvě. Uvažujme nyní, že toto pole vyvolalo ve vrstvě objemový náboj:

$$\delta q(z, \rho) = -\varepsilon_2 \int_0^\infty \int_{-d}^0 \hat{P}(z, \rho, z', \rho') \phi(z', \rho') dz' d\rho' = -\varepsilon_2 \hat{P} * \phi(z', \rho'), \quad (2.2.1)$$

kde \hat{P} je nelokální kvantově-mechanický operátor hustoty náboje (výpočet pro nanokrystal ve tvaru krychle provedli například Ostatnický a kol. (2018)) a znak $*$ pro integrování přes čárkované souřadnice jsme zavedli pro zkrácení zápisu.

Potenciál vyvolaný tímto nábojem můžeme zapsat jako superpozici potenciálů polí kružnic uvnitř vrstvy:

$$\varphi'_1(z, \rho) = -\varepsilon_2 \int_{II} V(z, \rho, z_0, R_0) \hat{P} * \phi(z'_0, R'_0) dV_0,$$

kde jsme využili toho, že v potenciálu pole kružnice (2.1.7) je lineární nábojová hustota pouze multiplikatívní konstanta a lze ji vytknout z funkce..
Celkový potenciál elektrického pole má potom tvar

$$\varphi_1(z, \rho) = \phi(z, \rho) + \varphi'_1(z, \rho).$$

Vidíme, že se tím změnilo pole vyvolávající objemový náboj, můžeme tedy takto pokračovat. V n-tém kroku bude mít potenciál pole vyvolané vrstvou tvar

$$\varphi'_n(z, \rho) = -\varepsilon_2 \int_{II} V(z, \rho, z_{n-1}, R_{n-1}) \hat{P} * \varphi_{n-1}(z'_{n-1}, R'_{n-1}) dV_{n-1},$$

do kterého můžeme rekurzivně dosazovat předchozí členy, dostaneme tak odezvu vrstvy v n-tém kroku ve tvaru sumy:

$$\varphi'_n(z, \rho) = \sum_{k=0}^{n-1} (-\varepsilon_2)^{k+1} \underbrace{\int_{II} \dots \hat{P} * \int_{II}}_{k+1 \text{ integrálů}} V(z', \rho', z_0, R_0) \hat{P} * \phi(z'_0, R'_0) dV_0 \dots dV_k.$$

Potenciál výsledného pole v nelokální odezvě dostaneme jako limitu těchto výrazů:

$$\varphi = \phi + \sum_{k=0}^{\infty} (-\varepsilon_2)^{k+1} \int_{II} \dots \hat{P} * \int_{II} V(z', \rho', z_0, R_0) \hat{P} * \phi(z'_0, R'_0) dV_0 \dots dV_k. \quad (2.2.2)$$

Na $-\varepsilon_2$ v této řadě můžeme nahlížet jako na poruchový parametr, díky kterému každý další člen řady dává menší příspěvek a řada proto bude konvergovat. V další kapitole poté uvidíme, že roli poruchového parametru může přebrat i jiná veličina.

Ke klasické elektrodynamice můžeme přejít nahrazením operátoru \hat{P} lokálním Laplaceovým operátorem Δ :

$$\varphi = \phi + \sum_{k=0}^{\infty} (-\varepsilon_2)^{k+1} \int_{II} \dots \Delta \int_{II} V(z, \rho, z_0, R_0) \Delta \phi(z_0, R_0) dV_0 \dots dV_k.$$

Klasicky v dielektriku ale dipól negeneruje žádný náboj, což znamená, že je ve vrstvě splněna Laplaceova rovnice

$$\Delta \phi = 0,$$

proto je celý součet nulový a pole je rovno poli dipólu u dielektrické vrstvy.

3. Numerické výpočty

Na závěr chceme ověřit chování potenciálu (2.2.2) výpočtem. Získat nelokální kvantově-mechanický operátor \hat{P} pro naši vrstvu je obecně složitá úloha přesahující rámec této práce, proto k výpočtu použijeme Drudeho model, který nám dává lokální vodivost, čímž získáme nenulovost sumy v (2.2.2) díky rozložení volných elektronů ve vrstvě. Aplikujeme tak tedy zatím pouze složitější lokální model.

3.1 Metodika výpočtů

Naším cílem bude nyní získat schéma pro numerické výpočty. Vyjdeme z Drudeho modelu pro vodivost $\sigma(\omega, z, \rho)$ v bodě vrstvy (z, ρ) , když v ní působí elektromagnetické pole o úhlové frekvenci ω (viz např. Born a Wolf (1980, s. 625)):

$$\sigma(\omega, z, \rho) = \frac{\mu e n(z, \rho)}{1 - i\omega\tau}, \quad (3.1.1)$$

kde μ je mobilita elektronů, τ je střední volná doba, e je elementární náboj a $n(z, \rho)$ je hustota elektronů v daném místě. Z toho poté můžeme podle definice určit komplexní permitivitu vrstvy:

$$\hat{\epsilon}_2 = \epsilon_2 + i\frac{\sigma}{\omega}. \quad (3.1.2)$$

Využitím Ohmova zákona můžeme spočítat proudovou hustotu \mathbf{j} z působícího pole \mathbf{E} :

$$\mathbf{j} = \sigma\mathbf{E},$$

z čehož dosazením do rovnice kontinuity dostáváme vztah elektrického pole a vodivosti k hustotě náboje δq :

$$\nabla \cdot (\sigma\mathbf{E}) = -\frac{\partial(\delta q)}{\partial t},$$

kde t značíme čas.

My budeme nyní pro jednoduchost provedeme zanedbání členu $\nabla \cdot \mathbf{E}$, protože bychom museli provádět operaci numerického Laplaceova operátoru, která je numericky nestabilní a výpočty s ní jsou náročné. V dalších kapitolách budeme diskutovat, jaký vliv to má na výsledky výpočtů. Dále využitím pravidel toho, že před aplikací pole byla nábojová hustota v celé vrstvě nulová, dostaneme z rovnice kontinuity vztah:

$$\delta q(\omega, z, \rho) = -i\frac{\mathbf{E} \cdot \nabla\sigma}{\omega}. \quad (3.1.3)$$

Odtud hned vidíme tvar lokálního operátoru \hat{P} :

$$\hat{P}(z, \rho, z', \rho') = -i\delta(z - z')\delta(\rho - \rho')\frac{(\nabla\sigma) \cdot \nabla}{\epsilon_2\omega},$$

kde $\delta(z - z')$ a $\delta(\rho - \rho')$ značí Diracovu delta. Roli poruchového parametru zde tedy přebírá výraz i/ω .

My si nejdříve zvolíme, že po aplikaci pole jsou elektrony homogenně rozložené (jedná se o vlastnost materiálu, proto ji můžeme volit):

$$n(z) = NH(-z)H(z+d),$$

kde N je homogenní hustota elektronů a $H(z)$ a $H(z+d)$ jsou Heavisideovy funkce definované jako:

$$H(z) = \begin{cases} 1 & \text{pro } z \geq 0, \\ 0 & \text{pro } z \leq 0. \end{cases}$$

Pokud budeme chtít spočítat gradient funkce $H(-z)$, dostaneme:

$$\nabla H(-z) = -\mathbf{n}_s \delta(z),$$

kde \mathbf{n}_s je vnitřní normála roviny $z = 0$ (směřující do vrstvy). Obdobně pro funkci $H(z+d)$.

Dosažením do (3.1.3) a (3.1.1) tak dostaneme explicitní výraz pro hustotu elektrického náboje pro homogenní rozložení elektronů:

$$\delta q(\omega, z) = -\frac{iE_z \mu e N}{\omega(1 - i\omega\tau)} (\delta(z) + \delta(z+d)). \quad (3.1.4)$$

Dále nás bude zajímat tvar pole, když zvolíme Gaussovské rozložení elektronů ve vrstvě:

$$n(z) = \frac{N'}{(d/4)\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(z+d/2)^2}{2(d/4)^2}\right) H(-z)H(z+d),$$

kde N' je normovací konstanta a d je tloušťka vrstvy. Když z toho opět dosadíme do (3.1.3) a (3.1.1), dostaneme rozložení náboje pro nehomogenní hustotu elektronů ve vrstvě:

$$\delta q'(\omega, z) = \frac{4iE_z \mu e N'}{\omega d(1 - i\omega\tau)\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(z+d/2)^2}{2(d/4)^2}\right) \left(\frac{(z+d/2)}{(d/4)^2} - \delta(z) - \delta(z+d)\right). \quad (3.1.5)$$

V reálných experimentech špička mikroskopu kmitá, díky čemuž dochází k demodulaci signálu, a nás pak zajímají vyšší harmonické frekvence, které odpovídají odezvě vrstvy na pole rozptýlené hrotem.

Abychom se tedy přiblížili realitě, bude nás zajímat velikost průmětu odražené elektrické intenzity do směru kmitání hrotu (v našem případě tedy z-tovou složku) v závislosti na frekvenci vlnění. Ze zdrojového pole ϕ v (2.2.2) proto odečteme původní dipólový člen (pole rozptýlené hrotem) a necháme pouze zrcadlené členy (v samotné integrální sumě tento člen ale musíme ponechat). Prakticky budeme počítat potenciál pole nad a pod bodem, kde je umístěn zdrojový dipól, a poté provedeme numerickou derivaci ve směru z .

K výpočtu sumy použijeme metodu konečných prvků, kde můžeme s výhodou využít, že pro předem určenou mřížku nám stačí pouze jednou vypočítat potenciál elektrického pole kružnice ve vrstvě (pro všechny body mřížky, ale zároveň i pro všechny poloměry a středy) a že další člen řady dostaneme působením \hat{P} na předchozí a integrací, čímž se výpočet každého dalšího členu řady redukuje pouze na prvkové násobení matic a numerické integrování. Jako zastavovací kritérium

sumy použijeme parametr ξ , který představuje počet platných míst, na kolik se liší poslední dva příspěvky. Také budeme chtít, aby se sečetlo alespoň 5 prvních členů a maximálně 30 členů (abychom zamezili nekonečným cyklům). Všechny simulace jsme pak kvůli jejich početní a časové náročnosti spouštěli s využitím kapacit MetaCentra.

Výpočet budeme chtít vztáhnout k aktuálním experimentům THz spektroskopie na polovodičových nanostrukturách, proto parametry pro (3.1.1) připodobníme k těm, které použili v práci Ostatnický a kol. (2018) na nanostruktuře GaAs.

Berme tedy mobilitu elektronů $\mu = 10^4 \text{ cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$, střední volný čas $\tau = 270 \text{ fs}$, homogenní hustotu elektronů $N = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ a $N' = 10^{17} \text{ cm}^{-2}$ (používáme o řád vyšší hustotu než ve zmiňované práci, aby byla ve výpočtech dobře vidět spektrální závislost počítaného elektrického pole), poloměr hrotu $a = 40 \text{ nm}$ a jeho relativní permitivitu $\varepsilon_r^k = 4$, relativní permitivitu prostředí $\varepsilon_r^I = 1$, vrstvy $\varepsilon_r^{II} = 13,7$ a substrátu $\varepsilon_r^{III} = 11,7$. Velikost přicházejícího pole nastavíme na $E_0 = 1 \text{ V/m}$. Dipól pak umístíme do výšky $z_0 = 50 \text{ nm}$. Tloušťku vrstvy d budeme měnit

3.2 Homogenní rozložení elektronů

Nejdříve provedeme výpočet elektrického pole za předpokladu, že jsou elektrony ve vrstvě homogenně rozmístěny. Zde využijeme toho, že se k výsledku můžeme dostat dvěma přístupy, čímž ověříme správnost našeho modelu.

Numerickým výsledkem zde nazveme intenzitu elektrického pole, kterou určíme numerickým sečtením (2.2.2), kde hustotu náboje budeme u každého členu určovat pomocí (3.1.4). Analytickým výsledkem pak nazveme intenzitu elektrického pole, kterou získáme sečtením (1.3.13) bez zdrojového dipólu, kde za ε_2 dosadíme komplexní permitivitu vypočtenou z (3.1.1) a (3.1.2). Výsledky vypočítané těmito dvěma způsoby by se potom měly shodovat.

Pro začátek jsme určili průmět do směru z intenzity elektrického pole v místě dipólu (značíme $\text{Re}(E_z)$ reálnou a $\text{Im}(E_z)$ imaginární část) pro vrstvu tlustou $d = 30 \text{ nm}$ na mřížce se 125 body ve směru ρ a 30 body ve směru z (viz Obrázek 3.1) pro frekvence ν od 0,4 do 3 THz. Na Obrázku 3.2 potom ukazujeme velikost tohoto průmětu (značíme $|E_z|$) pro zmiňované parametry výpočtu.

Dále jsme určili velikost průmětu intenzity elektrického pole do osy z pro vrstvu s $d = 50 \text{ nm}$ na hrubší mřížce se 125 body ve směru ρ a 30 body ve směru z a jemnější mřížce se 135 body ve směru ρ a 50 body ve směru z (viz Obrázek 3.3) pro frekvence ν od 0,4 do 1,7 THz. Pro názornost jsme ještě pro tuto tloušťku vynesli na Obrázku 3.4 velikost rozdílu analytického $|E_a|$ a numerického výsledku $|E_n|$ na obou mřížkách.

Diskutujme nejdříve porovnání numerických a analytických výsledků. Všechny vypočtené spektrální závislosti mají společné to, že s rostoucí frekvencí dochází k lepším shodám. Abychom toto vysvětlili, musíme si uvědomit, že když provádíme výpočet pro vyšší frekvence, tak klesá poruchový parametr, proto další členy řady mají na výsledek menší vliv (a řada navíc rychleji konverguje). To se projevívá v přesnosti výpočtu, neboť v každém kroku provádíme numericky nestabilní operaci derivace, která nám do procesu vnáší numerické chyby.

Tento efekt je dobře vidět na Obrázcích 3.3 a 3.4, kde pro jemnější mřížku dochází k lepší shodě, neboť více bodů mřížky znamená lepší přesnost derivací. Na Obrázku 3.1 je navíc vidět, že u imaginární části pro frekvence nižší než asi 1 THz dochází k velkým rozdílům. Zde zřejmě navíc bude hrát roli fakt, že imaginární složka je o řád menší než reálná, proto zde probíhá odečítání a dělení malých čísel a může docházet k tzv. cancelaci.

Rozdíly v přesnostech závislostí na obou vrstvách na Obrázcích 3.2 a 3.3 si pak můžeme vysvětlit tím, že ačkoliv se tloušťka vrstvy zvětšila skoro dvojnásobně, tak počet bodů mřížky je prakticky stejný.

Podívejme se ještě na vliv zanedbaného členu $\sigma \nabla \cdot \mathbf{E}$ v 3.1.3. Na Obrázku 3.5 vynášíme poměr uvažovaného a použitého členu z rovnice (3.1.3) v bodě $z = 0$ nm a $\rho = 0,01$ nm vypočítané z analytického řešení pro obě tloušťky vrstev. Vidíme zde, že zanedbaný člen je asi o řád nižší a ve sledovaném spektrálním oboru je podíl maximální asi pro $\nu = 0,4$ THz.

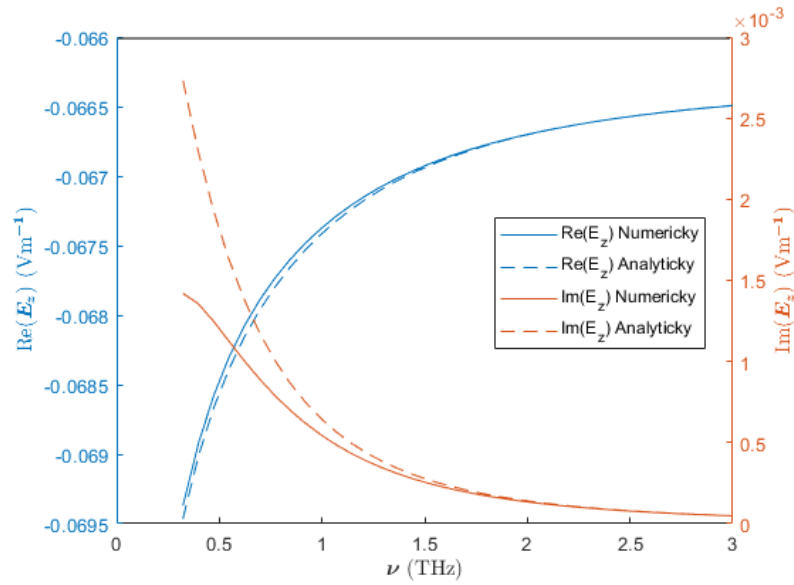
Pro obě vrstvy se pak poměr mění pouze v řádu několik setin. Jelikož se ale numerické a analytické výsledky shodují ve vyšších frekvencích dobře, můžeme tak říct, že rostoucí nepřesnost s klesající frekvencí je způsobena zanedbáním členu minimálně a chybu tak můžeme přisoudit spíše uvažovaným numerickým efektům a diskretizaci problému.

Obraťme se nyní na samotný průběh křivek. Stačí se nám dívat pouze na průběh analytických výsledků, kde z Obrázků 3.2 a 3.3 vidíme, že se obě křivky shora přibližují k hodnotě, která odpovídá intenzitě při reálné permitivitě $\varepsilon_r^{II} = 13,7$. Zároveň je zřejmé, že intenzita počítaného pole slabší vrstvy je trochu silnější.

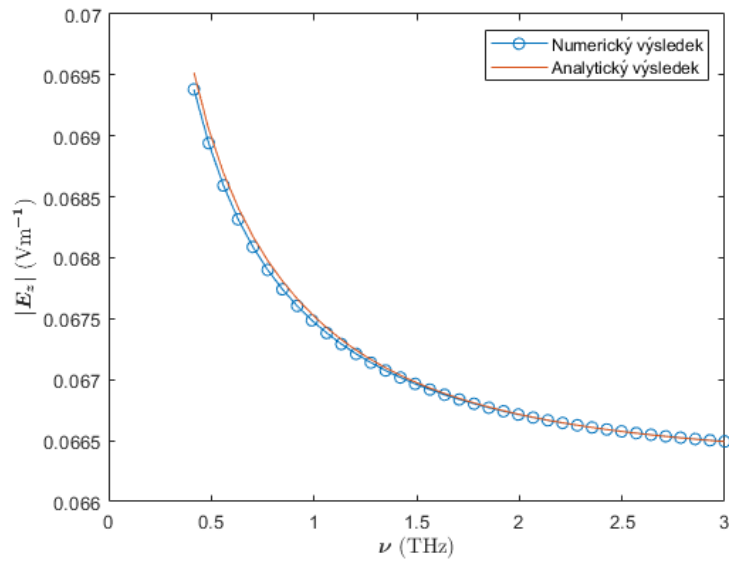
Dosazením 3.1.1 pro homogenní rozložení náboje do 3.1.2 můžeme explicitně napsat reálnou a imaginární část permitivity vrstvy:

$$\hat{\varepsilon}_2 = \left(\varepsilon_2 - \frac{\mu e \tau N}{1 + \omega^2 \tau^2} \right) + i \frac{\mu e N}{\omega(1 + \omega^2 \tau^2)}.$$

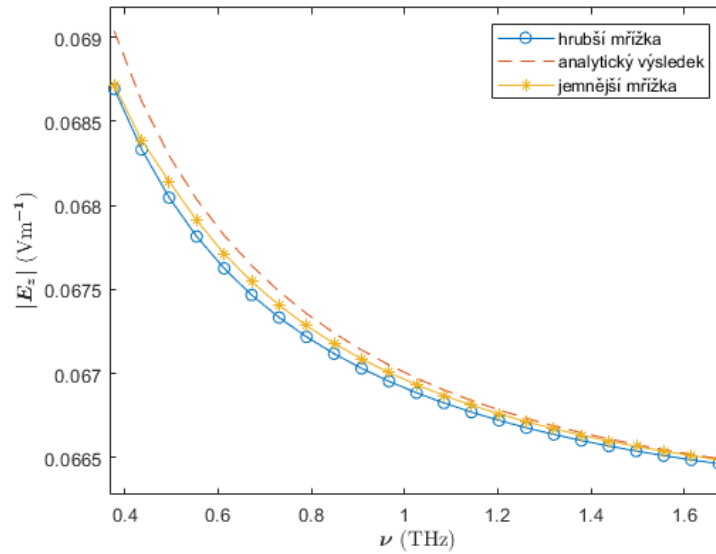
Zde vidíme, že silnější spektrální závislost bude vykazovat imaginární část komplexní permitivity (rychleji roste s klesající frekvencí), což vyvolává větší kontrast permitivit mezi vrstvou a prostředím, resp. substrátem. V důsledku čehož, jak již víme z předešlých kapitol, vyvolává vrstva silnější pole (ze vzorce 1.3.13). Vysvětlení vyšší intenzity pole slabší vrstvy pak můžeme vidět na Obrázku 1.9, kde jsme v kapitole 1.5 popsali, jak nad vrstvou vzniká silnější pole než nad poloprostorem (tedy i než nad silnější vrstvou) díky nahromaděným vázaným povrchovým nábojům na hranici se substrátem.



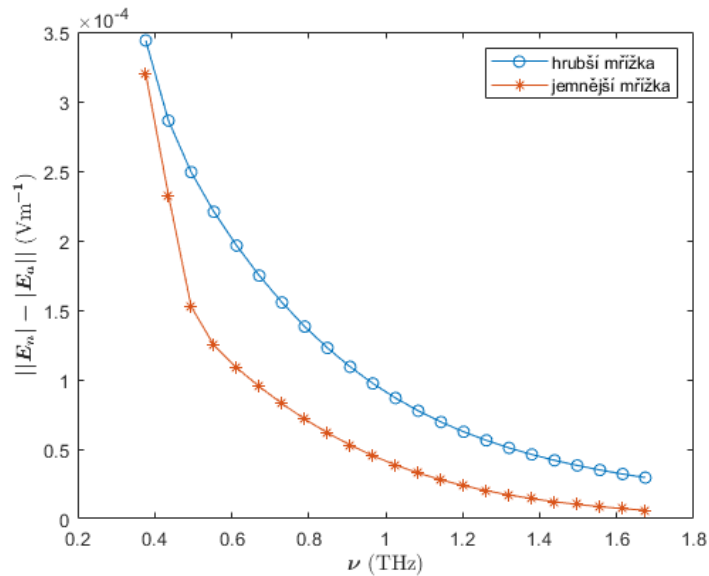
Obrázek 3.1: Porovnání imaginární a reálné části analytického a numerického výsledku průmětu do osy z intenzity elektrického pole v místě dipólu pro $d = 30$ nm a mřížku se 125 body ve směru ρ a 30 body ve směru z .



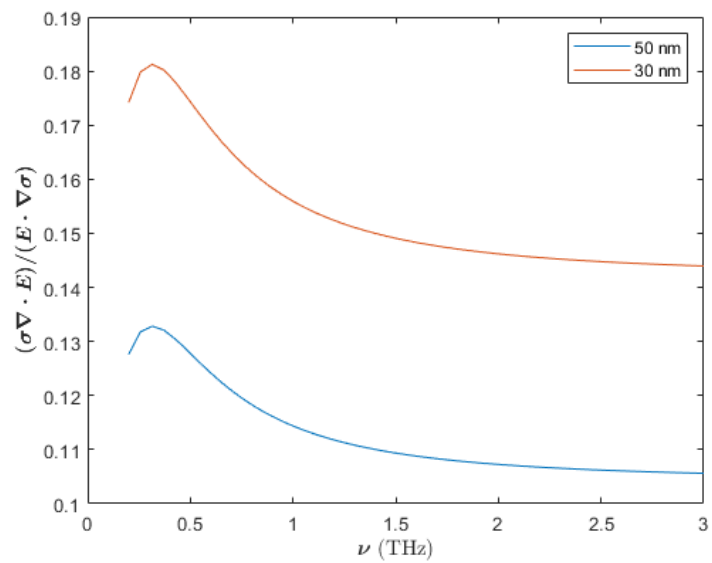
Obrázek 3.2: Porovnání velikosti analytického a numerického výsledku průmětu do osy z intenzity elektrického pole v místě dipólu pro $d = 30$ nm a mřížku se 125 body ve směru ρ a 30 body ve směru z .



Obrázek 3.3: Porovnání analytického a numerického výsledku velikosti průmětu do osy z intenzity elektrického pole v místě dipólu pro $d = 50$ nm pro jemnější mřížku se 125 body ve směru ρ a 50 body ve směru z a hrubší mřížku se 125 body ve směru ρ a 30 body ve směru z .



Obrázek 3.4: Rozdíl analytického výsledku $|E_a|$ a numerického výsledku $|E_n|$ průmětu do osy z intenzity elektrického pole v místě dipólu pro $d = 50$ nm pro jemnější mřížku se 125 body ve směru ρ a 50 body ve směru z a hrubší mřížku se 125 body ve směru ρ a 30 body ve směru z .



Obrázek 3.5: Spektrální závislost poměru požitého členu z (3.1.3) $\mathbf{E} \cdot \nabla \sigma$ a zanedbaného členu $\sigma \nabla \cdot \mathbf{E}$ vypočítaný z analytického řešení v bodě $z = 0$ nm a $\rho = 0,01$ nm pro $d = 30$ nm a $d = 50$ nm.

3.3 Nehomogenní rozložení elektronů

Náš numerický přístup, kde využíváme vzorce (2.2.2), nám nyní umožní provést výpočet při nehomogenním rozložení elektronů ve vrstvě. My si zvolíme Gaussovské rozložení, kde jsme si odvodili z Drudeho modelu, že hustota náboje bude mít tvar (3.1.5).

Pro 4 tloušťky vrstev tedy spočítáme spektrální průběh E_z pro frekvence ν od 0,2 do 3 THz. Na Obrázku 3.6 uvádíme reálnou část výsledku, na Obrázku 3.7 imaginární část výsledku a na Obrázku 3.8 ukazujeme výslednou absolutní hodnotu $|E_z|$. Nakonec ještě na Obrázku 3.9 vykreslujeme spektrální průběh parametru ξ v semilogaritmické stupnici.

Podívejme se nejdříve krátce na přesnost výpočtů. Zde je již nemůžeme porovnat s jinými a ověřit tak jejich platnost. Nicméně z Obrázku 3.9 je jasné, že stále platí, že se numerická přesnost zlepšuje s rostoucí ν a také s tloušťkou vrstvy. My jsme opět na výpočty použili mřížku se 125 body ve směru ρ a 30 body ve směru z , což nám ve vynesném spektrálním rozsahu dalo poměrně rozumné výsledky. Pro nižší frekvence už byly znatelné chyby, proto tyto hodnoty intenzity pole neuvádíme.

I zde se můžeme ptát na vliv zanedbání $\sigma \nabla \cdot \mathbf{E}$ v rovnici (3.1.3). V minulé podkapitole jsme ukázali, že na průběh závislosti s homogenním rozložením elektronů má větší vliv rozměr použité mřížky, než zanedbaný člen. Zde se situace komplikuje, protože jsou přítomny i objemové náboje. V prvním členu řady (2.2.2) má ale člen $\nabla \cdot \mathbf{E}$ význam vázaných objemových nábojů ve vrstvě pokud zde působí pole dipólu, ty se tam ovšem nevyskytují, a tak do prvního členu sumy $\nabla \cdot \mathbf{E}$ nepřispívá. Na tvar křivky tak bude mít minimální vliv, protože první člen sumy je dominantní a další jdou rychle k nule kvůli rychlému poklesu poruchového parametru. Pro naše účely, kdy nás zajímá hlavně modulace křivek, je tak aproximace stále vhodná.

Co se týká samotných průběhů, tak na rozdíl od případu s homogenním rozložením elektronů ve vrstvě není nyní spektrální závislost monotónně klesající, ale intenzita pole klesá až do určité frekvence, odkud začne opět růst (u reálné část je to naopak) a přibližovat se k hodnotě, kterou bychom dostali při reálné permitivitě vrstvy ε_2 . Tento efekt je více znatelný u reálné části než u imaginární. Navíc u silnějších vrstev dochází k prohloubení vzniklého minima (u reálné části se zvyšuje maximum) a jeho posunu k nižším frekvencím.

Výše popsaný jev se můžeme pokusit vysvětlit analýzou konvergence a sumy (1.3.13). Nejdříve si uvědomíme, že konvergence závislosti ke spektrálně nezávislé hodnotě je důsledek klesajícího poruchového parametru i/ω , takže příspěvek sumy v 2.2.2 je malý oproti poli dipólu u vrstvy.

Klesající část křivek můžeme vysvětlit stejně jako klesání v předchozí kapitole. Také jsme uvedli, že pokud zvětšíme tloušťku vrstvy, tak můžeme čekat pokles odraženého signálu, což objasňuje, proč s rostoucím d vznikají hlubší minima.

Jelikož zde ale nyní započítáváme i objemový náboj, tak se projeví i další efekt, který je vidět na Obrázku 1.8 a 1.9. Uvnitř vrstvy je pole tlumené vlivem vyšší permitivity než má okolí, jak ale klesá kontrast permitivit, tak zároveň klesá i tlumení, což způsobuje vyšší hustotu elektronů (3.1.5).

Máme tedy dva působící efekty, které souvisí s tím, že s rostoucí frekvencí klesá kontrast permitivit mezi vrstvou a prostředím, resp. substrátem., kde jeden

způsobuje zeslabení signálu nad vrstvou a druhý zesílení pole ve vrstvě, což způsobuje silnější odezvu volných nábojů. V jistém bodě pak tato odezva dokáže vyrovnat ztrátu způsobenou poklesem hustoty vázaných povrchových nábojů. V tomto místě vzniká minimum.

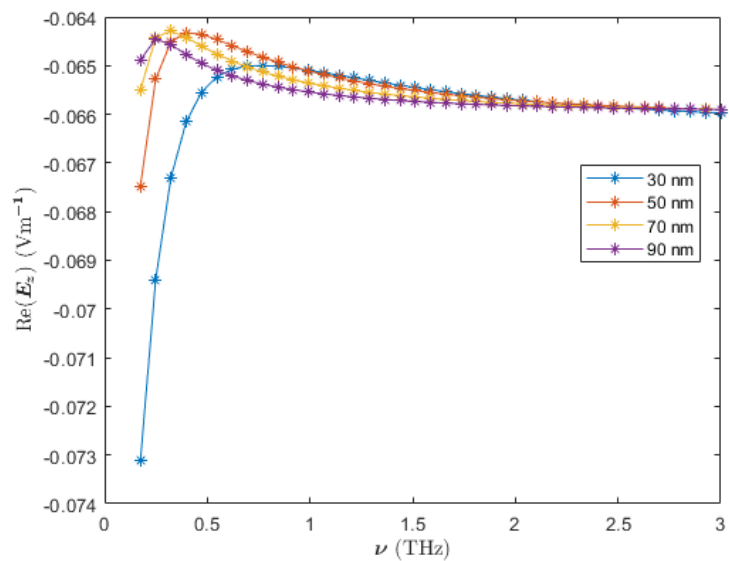
Odtud už odezva elektronů roste rychleji než klesá odezva vázaných nábojů, tudíž dochází k zesílení, ale jelikož jde imaginární část komplexní permitivity k nule, tak intenzita elektrického pole zdola konverguje k frekvenčně nezávislé hodnotě.

Tyto úvahy ovšem znamenají, že nemonotónní průběh křivek není způsobený tvarem rozložení elektronů 3.1.5, nýbrž vlastnostmi budícího pole u vrstvy 1.3.13 a tím, že uvažované rozložení je nehomogenní, v důsledku čehož vzniká objemový náboj. Zopakovali jsme tedy výpočet pro tloušťku vrstvy $d = 30$ nm s kvadratickým rozložením náboje

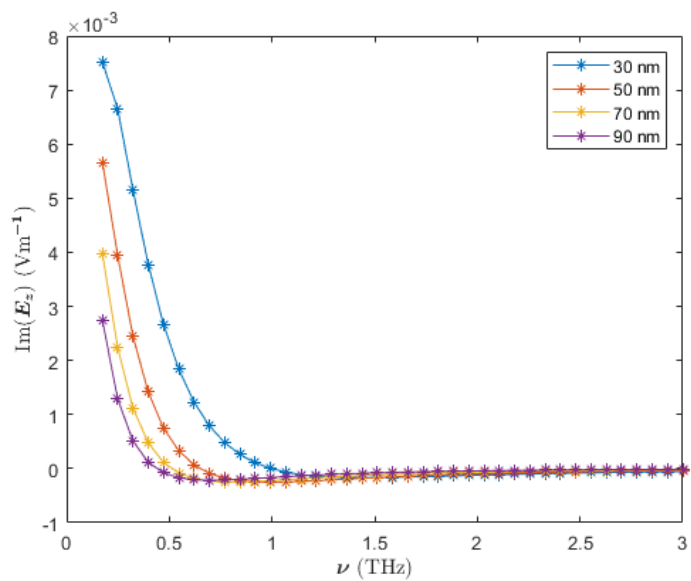
$$n(z) = \frac{6N'}{d^3} z^2 H(-z) H(z + d),$$

které se kvalitativně značně liší od použitého Gaussovského průběhu. Výsledky porovnáváme na Obrázku 3.10. Zde vidíme, že v uvažovaných frekvencích mají obě křivky podobných charakter a minima vůči sobě nejsou znatelně posunuta. Křivka kvadratického průběhu konverguje k limitní hodnotě pomaleji a má hlubší minimum, nicméně to jsme mohli čekat, neboť je ve výpočtu přítomno více povrchových nábojů, které mají za následek větší pokles intenzity pole s rostoucí frekvencí působícího pole.

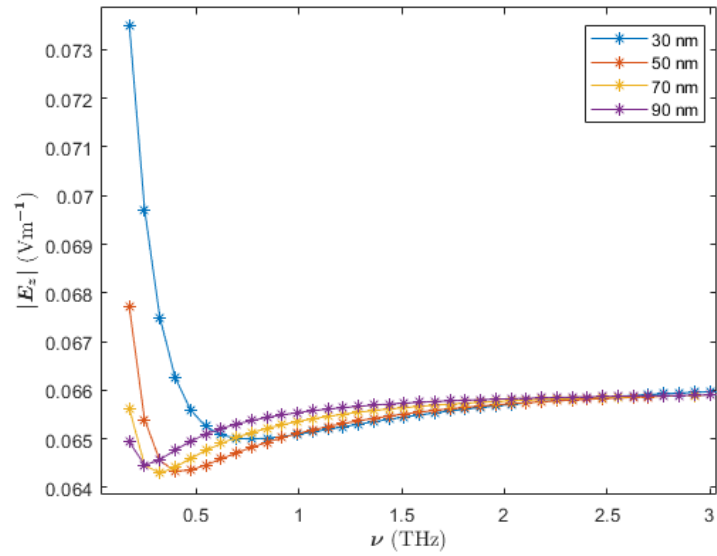
Změnili jsme tak razantně charakter rozložení náboje, ale kvalitativní průběh závislosti se změnil v rámci očekávání, což potvrzuje, že naše úvahy o tom, že modulace křivek je způsobená klesajícím kontrastem permitivit by mohly odpovídat realitě.



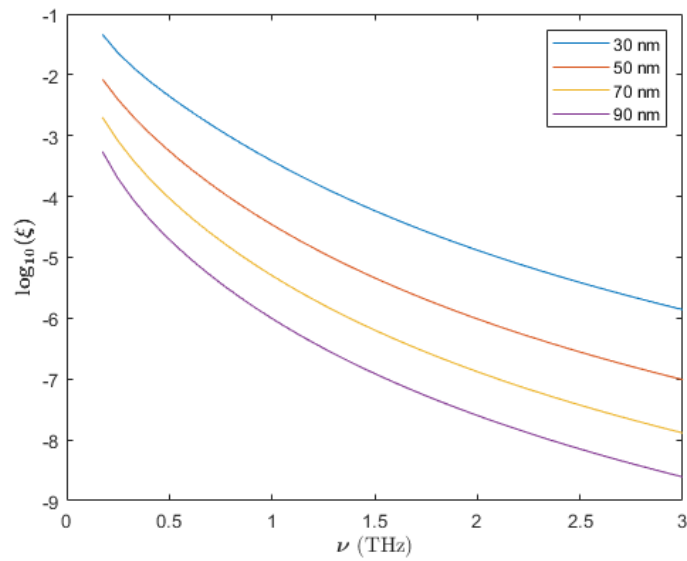
Obrázek 3.6: Reálná část průmětu do osy z intenzity elektrického pole v místě dipólu pro čtyři tloušťky vrstvy při Gaussovském rozložení volných elektronů.



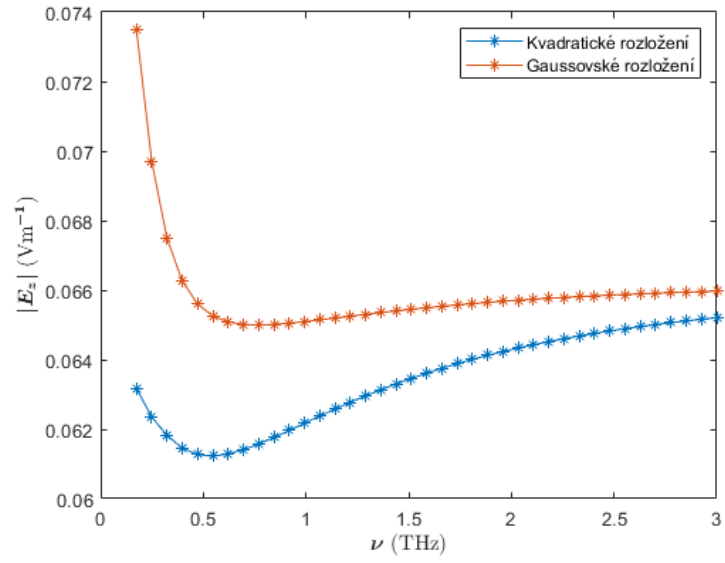
Obrázek 3.7: Imaginární část průmětu do osy z intenzity elektrického pole v místě dipólu pro čtyři tloušťky vrstvy při Gaussovském rozložení volných elektronů.



Obrázek 3.8: Velikost průmětu do osy z intenzity elektrického pole v místě dipólu pro čtyři tloušťky vrstvy při Gaussovském rozložení volných elektronů.



Obrázek 3.9: Spektrální závislost parametru výpočtu ξ (relativního rozdílu dvou posledních členů sumy) v semilogaritmické škále při Gaussovském rozložení volných elektronů.



Obrázek 3.10: Porovnání spektrálních závislostí velikosti průmětu do osy z intenzity elektrického pole v místě dipólu kvadratického a Gaussovského průběhu hustoty volných elektronů ve vrstvě při $d = 30$ nm.

Závěr

Na základě modelu dipólu u dielektrického poloprostoru, který ve své práci prezentují Knoll a Keilmann (2000), jsme odvodili vztah pro elektrický potenciál a elektrickou intenzitu dipólu u dielektrické vrstvy na substrátu, který můžeme použít pro matematické modelování v SNOM experimentech s THz zářením.

Dále jsme ukázali, jak odvozené vztahy v různých limitách přecházejí v původní vzorce. Pro přístup s vrstvou i poloprostorem jsme poté provedli výpočet s parametry reálného experimentu s tenkou vrstvou SiO_2 nanesenou na substrátu Si a srovnali jsme kvalitativní průběhy jejich polí. Jeden důležitý závěr, který jsme z toho výpočtu dostali je ten, že ačkoliv náš model předpovídá slabší elektrické pole uvnitř vrstvy, tak vlivem nahromaděných povrchových nábojů na hranici substrátu a vrstvy je potom signál nad vrstvou zesílený.

Následně jsme se zaměřili na hledání elektrického pole vyvolaného nelokální odezvou vrstvy. Celá úloha byla symetrická vůči otočení kolem osy z , proto jsme započali výpočtem potenciálu elektrického pole homogenně nabitě kružnice uvnitř dielektrické vrstvy, která je základním rotačně symetrickým nosičem nábojem. Zde jsme využili poznatků z předchozích výpočtů. Poté jsme pouze ověřili splnění okrajových podmínek.

Dále jsme iterativně odvodili vztah pro potenciál elektrického pole dipólu vrstvy při započítané nelokální odezvě ve formě integrální řady s poruchovým parametrem. Stěžejním bodem tohoto výsledku je kvantově-mechanický operátor hustoty náboje \hat{P} . Jeho určení je však nad rámec této práce. Když jsme tedy chtěli provést výpočty na základě tohoto vzorce, museli jsme zvolit alternativní postup.

Využili jsme Drudeho modelu a stacionární rovnice kontinuity. Tak jsme dostali tvar lokálního operátoru \hat{P} , čímž jsme zatím provedli pouze výpočty lokální odezvy v přítomnosti volného náboje.

Jako parametry samotného výpočtu jsme zvolili takové, které sedí na polovodič GaAs, který se aktuálně v experimentech využívá. Zkoumali jsme nejdříve odezvu při nehomogenním rozložení volného náboje, kde jsme měli možnost srovnat výpočty z našeho modelu s výpočty analytickými. Ukázali jsme také, že neshody v těchto dvou přístupech jsou způsobeny numerickými nepřesnostmi a náš model tak v tomto směru dává dobré výsledky.

Dále jsme přešli k situaci, kdy jsou elektrony ve vrstvě Gaussovsky rozložené. Zde jsme provedli výpočty pro vrstvy o tloušťkách 30 až 90 nm. Z výsledků jsme vyčetli dva působící efekty: s rostoucí frekvencí klesá kontrast permitivit, v důsledku čehož roste intenzita pole ve vrstvě a zároveň klesá intenzita pole nad vrstvou vyvolaná hromaděním povrchového vázaného náboje. Toto má pak za následek vznik minima a nemonotónnost.

Pro reálné použití našeho modelu je v budoucnu potřeba určit tvar operátoru \hat{P} při nelokální odezvě. Také musíme zmínit, že je celý náš model založený na PDM, který trpí na určité známé nedostatky. Nicméně při numerických výpočtech potom není problém využít IPDM, který metodou konečných prvků dokáže vzít v úvahu i tvar hrotu mikroskopu. Popřípadě můžeme uvážit, že tvar poruchové řady není závislý na tvaru zdrojového pole vytvořeného hrotem, proto dipólový model může nahradit například i model elipsoidu (konečného dipólu) pro vrstvu.

Seznam použité literatury

- AIZPURUA, J., TAUBNER, T., DE ABAJO, F. J. G., BREHM, M. a HILLENBRAND, R. (2008). Substrate-enhanced infrared near-field spectroscopy. *Opt. Express*, **16**(3), 1529–1545. doi: 10.1364/OE.16.001529. URL <https://opg.optica.org/oe/abstract.cfm?URI=oe-16-3-1529>.
- BEEBE, N. H. F. (2017). Elliptic integral functions. In *The Mathematical-Function Computation Handbook*, pages 619–692. Springer International Publishing AG, Switzerland. ISBN 3319641093.
- BORN, M. a WOLF, E. (1980). *Principles of optics : electromagnetic theory of propagation, interference and diffraction of light*. Pergamon Press, Oxford, 6th ed. edition. ISBN 0-08-026482-4.
- CIFTJA, O., BABINEAUX, A. a HAFEEZ, N. (2009). The electrostatic potential of a uniformly charged ring. *European Journal of Physics*, **30**, 623. doi: 10.1088/0143-0807/30/3/019.
- CVITKOVIC, A., OCELIC, N. a HILLENBRAND, R. (2007). Analytical model for quantitative prediction of material contrasts in scattering-type near-field optical microscopy. *Opt. Express*, **15**(14), 8550–8565. doi: 10.1364/OE.15.008550. URL <https://opg.optica.org/oe/abstract.cfm?URI=oe-15-14-8550>.
- DANIŠ, S. (2019). *Atomová fyzika a elektronová struktura látek*. První vydání. MatfyzPress, Praha 8. ISBN 987-80-7378-376-1.
- KEILMANN, F. a HILLENBRAND, R. (2004). Near-field microscopy by elastic light scattering from a tip: One contribution of 13 to a theme 'nano-optics and near-field microscopy'. *Philosophical transactions. Series A, Mathematical, physical, and engineering sciences*, **362**, 787–805. doi: 10.1098/rsta.2003.1347.
- KNOLL, B. a KEILMANN, F. (2000). Enhanced dielectric contrast in scattering-type scanning near-field optical microscopy. *Optics Communications*, **182** (4), 321–328. ISSN 0030-4018. doi: [https://doi.org/10.1016/S0030-4018\(00\)00826-9](https://doi.org/10.1016/S0030-4018(00)00826-9). URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0030401800008269>.
- LU, G., ZHAO, R., YIN, H., XIAO, Z. a ZHANG, J. (2020). Improved point dipole model for subwavelength resolution scattering near-field optical microscopy (snom). *International Journal of Antennas and Propagation*, **2020**, 9293018. ISSN 1687-5869. doi: 10.1155/2020/9293018. URL <https://doi.org/10.1155/2020/9293018>.
- OSTATNICKÝ, T., PUSHKAREV, V., NĚMEC, H. a KUŽEL, P. (2018). Quantum theory of terahertz conductivity of semiconductor nanostructures. *Phys. Rev. B*, **97**, 085426. doi: 10.1103/PhysRevB.97.085426. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.97.085426>.
- RASCHKE, M. B. a LIENAU, C. (2003). Apertureless near-field optical microscopy: Tip-sample coupling in elastic light scattering. *Applied Physics*

Letters, **83**(24), 5089–5091. ISSN 0003-6951. doi: 10.1063/1.1632023. URL <https://doi.org/10.1063/1.1632023>.

SEDLÁK, B. a ŠTOLL, I. (2012). *Elektrina a magnetismus*. Třetí vydání. Karolínium, Praha. ISBN 978-80-246-2198-2.

ZHANG, L., ANDREEV, G., FEI, Z., MCLEOD, A., DOMINGUEZ, G., THIEMENS, M., CASTRO NETO, A., BASOV, D. a FOGLER, M. (2011). Near-field spectroscopy of silicon dioxide thin films. *Phys. Rev. B*, **85**. doi: 10.1103/PhysRevB.85.075419.

ČERNÝ, R. a POKORNÝ, M. (2021). *Základy matematické analýzy pro studenty fyziky 2*. MatfyzPress, Praha. ISBN 978-80-7378-454-6.

Seznam obrázků

1.1	Schematický nákres problému dielektrické koule v homogenním elektrickém poli u dielektrické vrstvy	4
1.2	Schematický nákres poloh reálného dipólu a zrcadlených dipólů s naznačeným směrem jednotkových vektorů $\mathbf{e}_{\mathbf{R}}$, $\mathbf{e}'_{\mathbf{R}}$ a $\mathbf{e}''_{\mathbf{R}}$ do libovolného bodu X_{I} v oblasti I a X_{II} v oblasti II.	5
1.3	Rozložení dipólů na ose z vytvářející potenciál (1.3.3) s naznačeným působením jednotlivých dipólů v libovolných bodech X_{I} , X_{II} a X_{III} postupně v oblastech I, II a III.	8
1.4	Pole jednotkových vektorů intenzity elektrického pole dipólu u dielektrického poloprostoru s vyznačenými ekvipotenciálními plochami.	13
1.5	Pole jednotkových vektorů intenzity elektrického pole dipólu u dielektrické vrstvy tloušťky d umístěné na substrátu s vyznačenými ekvipotenciálními plochami.	13
1.6	Průběh potenciálu elektrického pole ve vzdálenosti 350 nm od osy z pro dipól u dielektrického poloprostoru a vrstvy na substrátu.	14
1.7	Průběh radiální komponenty intenzity elektrického pole ve vzdálenosti 350 nm od osy z pro dipól u poloprostoru a vrstvy na substrátu.	14
1.8	Průběh z -tové komponenty intenzity elektrického pole vynásobené relativní permitivitou příslušného prostředí ve vzdálenosti 350 nm od osy z pro dipól u dielektrického poloprostoru a vrstvy na substrátu.	15
1.9	Průběh velikosti vektoru intenzity elektrického pole ve vzdálenosti 350 nm od osy z pro dipól u dielektrického poloprostoru a vrstvy na substrátu.	15
2.1	Schématický nákres nabitě kružnice v dielektrické vrstvě ve válcových souřadnicích.	17
2.2	Schématický nákres kružnic po prvním zrcadlení s naznačeným působením v libovolných bodech X_{I} , X_{II} a X_{III} postupně v oblastech I, II a III.	18
3.1	Porovnání imaginární a reálné části analytického a numerického výsledku průmětu do osy z intenzity elektrického pole v místě dipólu pro $d = 30$ nm a mřížku se 125 body ve směru ρ a 30 body ve směru z	27
3.2	Porovnání velikosti analytického a numerického výsledku průmětu do osy z intenzity elektrického pole v místě dipólu pro $d = 30$ nm a mřížku se 125 body ve směru ρ a 30 body ve směru z	27
3.3	Porovnání analytického a numerického výsledku velikosti průmětu do osy z intenzity elektrického pole v místě dipólu pro $d = 50$ nm pro jemnější mřížku se 125 body ve směru ρ a 50 body ve směru z a hrubší mřížku se 125 body ve směru ρ a 30 body ve směru z	28

3.4	Rozdíl analytického výsledku $ E_a $ a numerického výsledku $ E_n $ průmětu do osy z intenzity elektrického pole v místě dipólu pro $d = 50$ nm pro jemnější mřížku se 125 body ve směru ρ a 50 body ve směru z a hrubší mřížku se 125 body ve směru ρ a 30 body ve směru z	28
3.5	Spektrální závislost poměru pozitivního členu z (3.1.3) $\mathbf{E} \cdot \nabla \sigma$ a zanedbaného členu $\sigma \nabla \cdot \mathbf{E}$ vypočítaný z analytického řešení v bodě $z = 0$ nm a $\rho = 0,01$ nm pro $d = 30$ nm a $d = 50$ nm.	29
3.6	Reálná část průmětu do osy z intenzity elektrického pole v místě dipólu pro čtyři tloušťky vrstvy při Gaussovském rozložení volných elektronů.	32
3.7	Imaginární část průmětu do osy z intenzity elektrického pole v místě dipólu pro čtyři tloušťky vrstvy při Gaussovském rozložení volných elektronů.	32
3.8	Velikost průmětu do osy z intenzity elektrického pole v místě dipólu pro čtyři tloušťky vrstvy při Gaussovském rozložení volných elektronů.	33
3.9	Spektrální závislost parametru výpočtu ξ (relativního rozdílu dvou posledních členů sumy) v semilogaritmické škále při Gaussovském rozložení volných elektronů.	33
3.10	Porovnání spektrálních závislostí velikosti průmětu do osy z intenzity elektrického pole v místě dipólu kvadratického a Gaussovského průběhu hustoty volných elektronů ve vrstvě při $d = 30$ nm. . . .	34